

门电压控制的硅烯量子线中电子输运性质*

安兴涛[†] 刁淑萌

(河北科技大学理学院, 石家庄 050018)

(2014年4月2日收到; 2014年5月6日收到修改稿)

硅烯是由单层硅原子形成的二维蜂窝状晶格结构, 具有石墨烯类似的电学性质, 由于硅烯中存在比较强的自旋轨道耦合而备受关注. 本文利用非平衡格林函数方法研究了门电压控制的硅烯量子线中电子输运性质和能带结构. 研究发现, 只有在较强的门电压下, 而且硅烯量子线具有较好的锯齿形或扶手椅形边界而不存在额外硅原子时, 硅烯量子线中才存在无能隙的自旋极化边缘态. 另外, 计算结果表明这种门电压控制的硅烯量子线中边缘态在每个能谷处自旋是极化的. 这些计算结果将为实验上利用电场制作硅烯纳米结构提供理论支持.

关键词: 硅烯, 量子线, 非平衡格林函数

PACS: 73.63.Nm, 73.21.Hb, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.63.187304

1 引言

硅烯是一种由单层原子硅组成的二维蜂窝状晶格结构, 其物理特性与石墨烯极为近似. 实验上已经能够在银表面生长出这种硅烯结构, 因此最近关于硅烯的研究越来越受到人们的重视^[1]. 由于硅烯和石墨烯具有类似的蜂窝状晶体结构所以在石墨烯中所发现的(或预言的)基于狄拉克电子的各种新奇量子现象几乎都可以在硅烯中获得^[2-4]. 硅烯与石墨烯相比二者有两点显著不同: 其一, 由于较长的Si—Si键长和部分 sp^3 杂化轨道的引入, 导致其表现为非共面的翘曲结构, 而这种翘曲结构会使得硅烯中的本征自旋轨道耦合较强, 这种本征自旋轨道耦合会在狄拉克点处打开一个能隙, 其大小为1.55 meV, 这比石墨烯中本征自旋轨道耦合打开的能隙要大得多, 因此理论预言在硅烯中可以实现量子自旋霍尔效应^[2]; 其二, 由于硅烯的翘曲结构, 垂直硅烯表面的电场会破坏体系的反转对称, 因此利用电场可以调节硅烯的能隙以及实现拓扑量子相变^[3-5], 而石墨烯中所有碳原子在同一平面内, 外加垂直电场是无法调节其能隙的.

最近, 越来越多的理论工作关注于硅烯纳米结构的输运性质^[6-16], 尤其是自旋相关的输运性质. 利用硅烯纳米带上的门电压^[6]、局域磁场^[7]或者利用边缘态与体态的相互耦合^[8], 理论上可以得到非常大的电子自旋极化率, 从而可以设计基于硅烯材料的自旋过滤器件. 利用第一性原理, 通过计算硅烯纳米带的输运性质, 人们发现其中存在非常大的巨磁电阻效应^[9,10]. 虽然如此, 关于硅烯纳米结构中许多新奇的输运性质还有待于我们去探索. 当系统存在门电压时, 强的门电压激发的电场引起的交错势会使其下方的硅烯发生从量子自旋霍尔相到普通带绝缘体相的拓扑相变^[4]. 我们感兴趣的问题是: 在与门电压相邻的硅烯量子线边界处是否会形成新的边缘态? 本文研究了利用门电压形成的硅烯量子线中的电子输运性质, 利用非平衡格林函数方法计算了零温下体系的电导. 研究发现, 当锯齿形边界的硅烯量子线宽度比较大时, 非常强的门电压可以在硅烯量子线中形成新的无能隙的自旋极化边缘态, 这种边缘态与原来的硅烯/真空界面的边缘态不同, 它是谷自旋极化的, 也就是在不同的能谷, 自旋是相反的; 而较弱的门电压会使体系打开能隙, 从而使边缘态发生散射. 这些研究不仅对

* 国家自然科学基金(批准号: 11104059, 61176089)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: anxt2005@163.com

理解材料的基本性质是至关重要的, 而且对新型器件的设计和发展有着重要的意义.

2 理论与模型

本文研究的模型是在锯齿形边界的硅烯纳米带表面上对称地上下加上门电压, 从而在两个门电压之间形成量子线, 如图 1 所示.

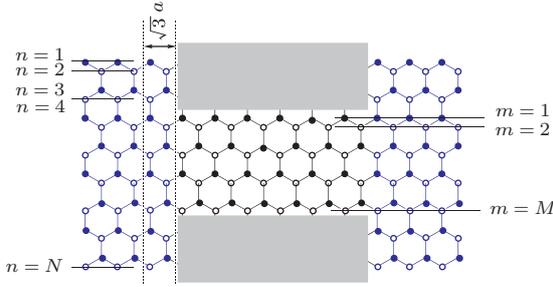


图 1 门电压控制下锯齿形硅烯纳米带中形成的量子线模型. 两个灰色方框表示硅烯纳米带表面上所加的对称门电压; 两条虚线之间的原子表示选取的原胞; N 代表硅烯纳米带总宽度, M 代表中间量子线的宽度, α 代表最近邻硅原子间的距离

在紧束缚近似下, 硅烯量子线的哈密顿可写为 [2,3,13]

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle ij \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{\text{SO}}}{3\sqrt{3}} \\
 & \times \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \alpha\beta} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \\
 & - i \frac{2}{3} \lambda_{\text{R}} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \alpha\beta} \mu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{d}_{ij}^0)_z c_{j\beta} \\
 & + \sum_{i \in \{V_i\}, \alpha} \eta_i V_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中 $c_{i\alpha}^\dagger$ 表示在位置 i 处产生一个自旋为 α 的电子; $\langle i, j \rangle$ 和 $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ 分别代表求和要遍及所有最近邻和次近邻的跃迁; (1) 式中, 第一项为最近邻跃迁项, 跃迁能为 t ; 第二项为有效的自旋轨道耦合项, 其中 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是自旋泡利矩阵, ν_{ij} 定义为 $\nu_{ij} = (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j) / |\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j| = \pm 1$, 而 \mathbf{d}_i 和 \mathbf{d}_j 是连接次近邻 \mathbf{d}_{ij} 的两个键; 第三项表示本征的 Rashba 自旋轨道耦合, 其中 $\mu_{ij} = \pm 1$, 正负号对应于不同的子晶格, 而 $\mathbf{d}_{ij}^0 = \mathbf{d}_{ij} / |\mathbf{d}_{ij}|$; 第四项则表示门电压产生的交错势项, $\eta_i = \pm 1$, 正负号对应于不同的子晶格, V_i 代表门电压的强度. 正是这一项破坏了系统的反转对称性, 从而影响系统的输运性质.

假设温度为零, 将两个不加门电压的纯的半无限长硅烯纳米带作为左右电极. 系统的两端电导

可以利用非平衡格林函数 [17] 和 Landauer-Büttiker 公式 [18] 给出:

$$G(E) = \frac{e^2}{h} \text{Tr}[\boldsymbol{\Gamma}^L(E) \mathbf{G}^r(E) \boldsymbol{\Gamma}^R(E) \mathbf{G}^a(E)], \quad (2)$$

其中 $\boldsymbol{\Gamma}^p(E) = i[\boldsymbol{\Sigma}_p^r(E) - \boldsymbol{\Sigma}_p^a(E)]$ 是线宽函数, 而

$$\mathbf{G}^r(E) = [\mathbf{G}^r(E)]^\dagger = 1/[\mathbf{E} - \mathbf{H}_{\text{QW}} - \boldsymbol{\Sigma}_L^r - \boldsymbol{\Sigma}_R^r]$$

是中间量子线哈密顿 \mathbf{H}_{QW} 对应的推迟格林函数, 半无限长导线 p 的自能 $\boldsymbol{\Sigma}_p^r$ 可以利用传递矩阵方法数值求解 [19].

3 结果与讨论

在下面的数值计算中, 我们将跃迁能 t 作为能量单位, 取器件的宽度 $N = 40$, 量子线的长度为 50 个原胞, 有效自旋轨道耦合强度为 $\lambda_{\text{so}} = 0.3t$, 本征的 Rashba 自旋轨道耦合 $\lambda_{\text{R}} = 0.07t$. 在这样的参数下能够保证器件属于量子自旋霍尔系统, 如果不存在门电压, 器件边界处存在无能隙的边缘态.

图 2 给出了不同量子线宽度 M 和门电压强度 V_i 下, 系统的电导随能量 E 的变化. 由于门电压的存在使导线和硅烯量子线的能带失配, 因此原来不加门电压时完美的量子台阶遭到破坏, 在每个台阶上形成一系列的共振隧穿峰. 从图 2 中可以发现, 当硅烯量子线的宽度 M 比较小时, 无论门电压强弱, 系统都存在零电导平台. 这是因为硅烯量子线的宽度比较窄时, 量子线中的边缘态会发生相互作用, 从而打开能隙, 当能量处于此能隙中时, 电子无法通过量子线, 因此在此能量下系统电导为零. 从图 2(a) 和 (c) 中可以看到, 当硅烯量子线的宽度 $M = 4m + 2(m = 1, 2, 3, \dots)$ 时, 即使量子线的宽度非常宽时, 系统中也不会出现 $2e^2/h$ 的电导平台, 说明此时硅烯量子线中不存在无能隙的边缘态. 这是因为在此宽度下, 中间的硅烯量子线边界是非对称的锯齿形边界, 正是这种边界条件导致这样的门电压形成硅烯量子线中不存在无能隙的边缘态. 从图 2(b) 和 (d) 中可以看到, 当硅烯量子线的宽度 $M = 4m$ 时, 门电压比较弱时 [图 2(b)], 随着硅烯量子线宽度变宽, 零电导平台消失, 逐渐地向 $2e^2/h$ 电导平台演化, 但是即使硅烯量子线宽度变得很宽, 也无法得到完美的 $2e^2/h$ 电导平台. 值得注意的是, 当门电压比较强时 [图 2(d)], 在硅烯量子线宽度 $M = 20$ 情况下, 系统出现了完整的 $2e^2/h$ 电导平台, 说明此时硅烯量子线在与门电压接触的边界处出现了无能隙的边缘态. 在硅烯量子线宽度

比较窄时, 比如 $M = 4$ 和 $M = 8$ 时 [图 2(d)], 虽然门电压比较强, 也无法得到完整的 $2e^2/h$ 电导平台. 这是因为硅烯量子线足够窄, 使得上下边缘态发生了相互作用, 从而使体系中出现能隙. 通过上面的分析可知, 如果要在门电压控制的硅烯量子线中得到无能隙的边缘态必须满足两个条件: 一是硅烯量子线边界应该是锯齿形或扶手椅形的, 边界处不存在额外原子; 二是门电压要足够强.

为了进一步理解门电压对输运性质的影响, 我们计算了不同硅烯量子线宽度下电导随门电压强度 V_i 的变化, 如图 3 所示. 当门电压强度很弱时 ($V_i < \lambda_{SO}$), 因为硅烯纳米带边缘态对弱的非

磁散射是不敏感的, 所以电导能够保持非常好的 $2e^2/h$ 电导平台. 当门电压强度 $V_i > \lambda_{SO}$ 时, 电导随着门电压的增大急剧下降. 在硅烯量子线宽度为 $M = 4m + 2$ 时, 如图 3(a) 所示, 即使门电压变得很强, 电导也不能恢复 $2e^2/h$ 电导平台. 在硅烯量子线宽度为 $M = 4m$ 时, 如图 3(b) 所示, 硅烯量子线宽度比较窄时, 由于量子限制而出现能隙, 因此电导值很低, 但是当硅烯量子线宽度比较宽时, 电导随着门电压增强而升高, 最终会重新演变为 $2e^2/h$ 电导平台, 比如在 $M = 20$ 情况下, $V_i > 4t$ 时, 电导变为 $2e^2/h$. 这与我们前面的分析结论是一致的.

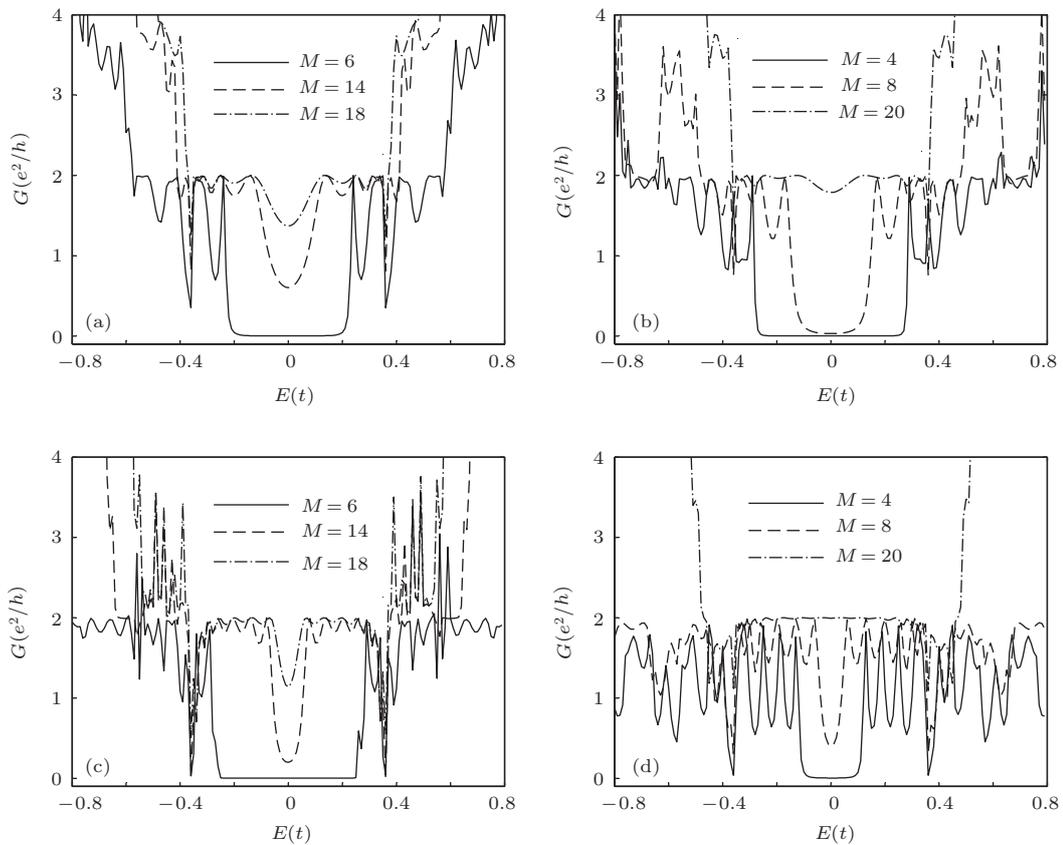


图 2 量子线宽度 m 和门电压强度 V_i 不同时电导随能量 E 的变化 (a), (b) $V_i = 1t$; (c), (d) $V_i = 5t$

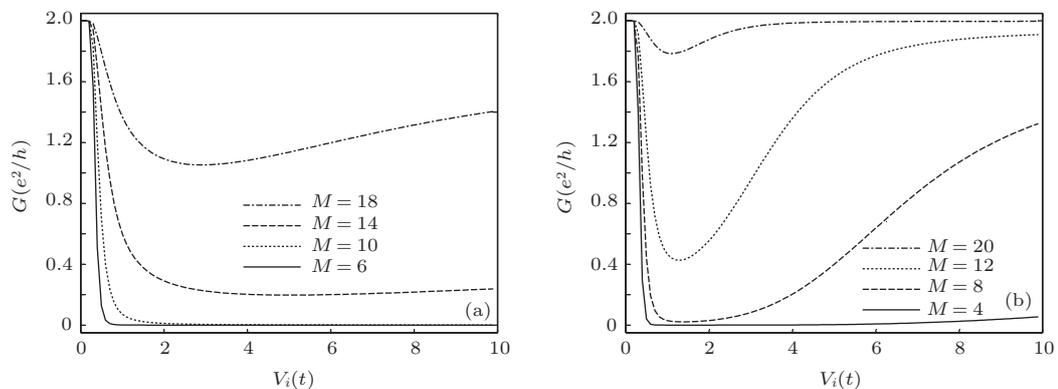


图 3 不同硅烯量子线宽度下电导随门电压强度 V_i 的变化 (取费米能级 $E = 0$) (a) $M = 4n + 2$; (b) $M = 4n$

假设门电压控制的锯齿形硅烯量子线是无限长的, 图4中给出了不同门电压下锯齿形硅烯量子线的能带结构. 在硅烯量子线宽度为 $M = 4m + 2$ 时, 如图4(a)和(b) ($M = 14$), 硅烯量子线中出现了明显的能隙. 而在硅烯量子线宽度为 $M = 4m$ 时, 如图4(c)和(d) ($M = 20$), 在比较小的门电压下(图4(c), $V_i = 1t$)系统仍然存在一个小的能隙, 但是门电压比较强时, 如图4(d)所示, 出现了非常明显的无能隙的边缘态. 这种硅烯/绝缘体界面的边缘态与硅烯/真空界面的边缘态的区别是: 在不存在交错势的硅烯纳米带与真空边界处边缘态在动量空间中是简并的, 而利用门电压形成的边缘态在动量空间中是分离的, 如图4(d)所示. 此外我们还计算了与动量相关的边缘态的自旋期望值 $\langle \sigma_z \rangle = \langle \varphi_{c,v} | \sigma_z | \varphi_{c,v} \rangle$, $|\varphi_c\rangle$ 和 $|\varphi_v\rangle$ 分别代表导带底和价带顶的边缘态, 如图5所示. 通过图4(d)与图5对照, 发现门电压控制的边缘态是自旋谷极化的, 也就是边缘态在不同的能谷中自旋是相反的, 如图5中所示, 左能谷 $\langle \sigma_z \rangle = 1$, 而右能谷 $\langle \sigma_z \rangle = -1$, 对导带和价带都是如此. 这种门电压控制的硅烯量子线边缘态自旋谷极化性质在硅烯纳米带与真空界面边缘态中是不存在的.

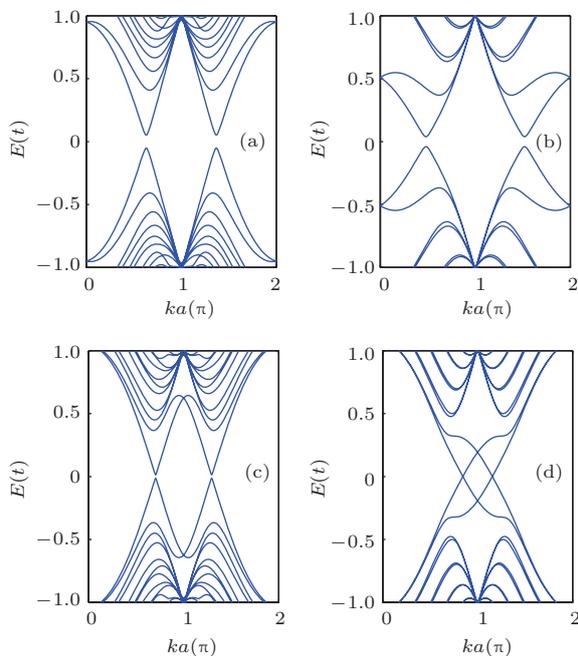


图4 无限长门电压控制锯齿形硅烯量子线的能带结构 (a) $M = 14$; $V_i = 1t$; (b) $M = 14$; $V_i = 5t$; (c) $M = 20$; $V_i = 1t$; (d) $M = 20$; $V_i = 5t$

对于扶手椅形边界的硅烯纳米带, 利用门电压同样也可以形成硅烯量子线. 假设门电压控制的扶

手椅形硅烯量子线是无限长的, 图6给出了不同门电压和不同宽度下扶手椅形硅烯量子线的能带结构. 由于扶手椅形边界不会出现非对称情况, 因此只要量子线足够宽并且门电压足够强, 量子线中就存在非常好的边缘态, 如图6(d)所示, 这与锯齿形硅烯量子线是不同的. 在图6(b)中可以看到, 虽然门电压非常强, 但是仍然存在一个比较小的能隙, 需要指出的是, 这个能隙并不是像锯齿形量子线中由非对称边界产生, 它的产生是因为量子线宽度不够宽, 这使得上下边缘态发生了相互作用. 随着量子线宽度的增大, 这个能隙会逐渐消失, 从而形成非常好的边缘态.

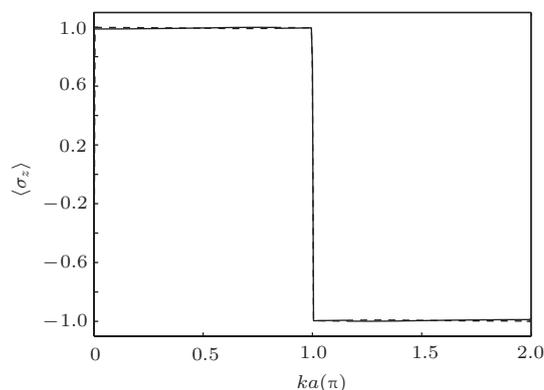


图5 价带顶(实线)和导带底(虚线)边缘态对应的自旋期望值 ($M = 20$; $V_i = 5t$)

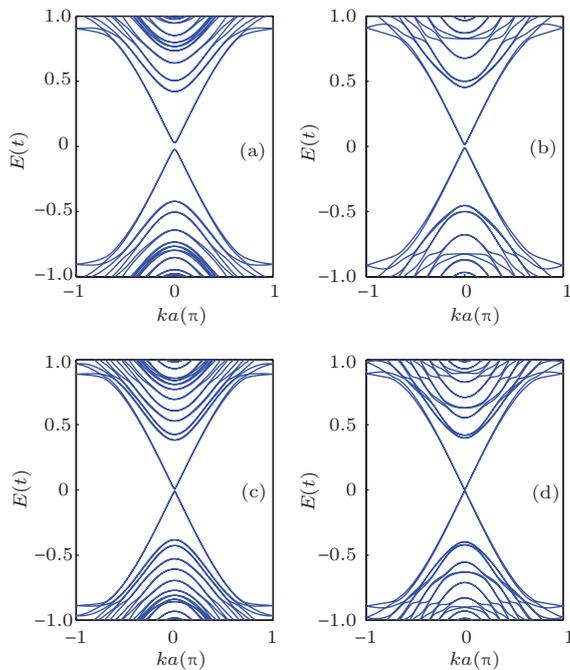


图6 无限长门电压控制扶手椅形硅烯量子线的能带结构 (a) $M = 14$, $V_i = 1t$; (b) $M = 14$, $V_i = 5t$; (c) $M = 20$, $V_i = 1t$; (d) $M = 20$, $V_i = 5t$

4 结 论

利用非平衡格林函数的方法研究了门电压控制的硅烯量子线中的电子输运性质. 计算结果表明, 只有当硅烯量子线具有非常好的锯齿形或扶手椅形边界, 而边界不存在额外硅原子且外加门电压非常强时, 硅烯量子线中才会出现无能隙的自旋极化边缘态, 从而系统的电导出现非常好的 $2e^2/h$ 的电导平台. 另外, 我们还发现这种门电压控制的边缘态与硅烯/真空界面的边缘态不同, 门电压控制的边缘态在每个能谷中自旋是极化的. 这些计算结果将为利用硅烯制造自旋相关的电子学纳米器件提供一定的理论基础.

参考文献

- [1] Chen L, Wu K H 2013 *Physics* **42** 604 (in Chinese) [陈岚, 吴克辉 2013 物理 **42** 604]
- [2] Liu C C, Feng C W, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 076802
- [3] Ezawa M 2012 *New J. Phys.* **14** 033003
- [4] Ezawa M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 055502
- [5] An X T, Zhang Y Y, Liu J J, Li S S 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 043113
- [6] Tsai W F, Huang C Y, Chang T R, Lin H, Jeng H T, Bansil A 2013 *Nat. Comms.* **4** 1500
- [7] An X T, Zhang Y Y, Liu J J, Li S S 2012 *New J. Phys.* **14** 083039
- [8] An X T, Zhang Y Y, Liu J J, Li S S 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 213115
- [9] Kang J, Wu F M, Li J B 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 233122
- [10] Xu C, Luo G, Liu Q, Zheng J, Zhang Z, Nagase S, Gao Z, Lu J 2012 *Nanoscale* **4** 3111
- [11] Yang K, Cahangirov S, Cantarero A, Rubio A, Agosta R D 2014 *Phys. Rev. B* **89** 125403
- [12] Li X, Mullen J T, Jin Z, Borysenko K M, Nardelli M B, Kim K W 2013 *Phys. Rev. B* **87** 115418
- [13] Liu C C, Jiang H, Yao Y 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195430
- [14] Cheng G, Liu P F, Li Z T 2013 *Chin. Phys. B* **22** 046201
- [15] Wang S K, Tian H Y, Yang Y H, Wang J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 017203
- [16] Rowlands D A, Zhang Y Z 2014 *Chin. Phys. B* **23** 037101
- [17] Ren W, Qiao Z, Wang J, Sun Q F, Guo H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 066603
- [18] Büttiker M, Imry Y, Landauer R, Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207
- [19] Lee D H, Joannopoulos J D 1981 *Phys. Rev. B* **23** 4988

Transport properties in a gate controlled silicene quantum wire*

An Xing-Tao[†] Diao Shu-Meng

(School of Sciences, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang 050018, China)

(Received 2 April 2014; revised manuscript received 6 May 2014)

Abstract

Silicene is a two-dimensional honeycomb lattice formed by a monolayer of silicon atoms, which has similar electrical properties to those of graphene. Silicene attracts much attention due to its relatively large spin-orbit coupling. The transport properties through a silicene quantum wire controlled by a gate are studied by using the non-equilibrium Green function formalism. A pair of gapless and spin-polarized edge states appears only when the gate voltage is strong and the silicene quantum wire has perfect zigzag or armchair boundaries in which additional silicon atoms are absent. Moreover, the edge states controlled by gate are spin valley-polarized, that is, the directions of spins are opposite in different valleys, which is different from that of the edge state at the interface between the silicene and vacuum. These results can be helpful to design and fabricate the practical silicene nanostructure.

Keywords: silicene, quantum wire, non-equilibrium Green function

PACS: 73.63.Nm, 73.21.Hb, 73.20.At

DOI: [10.7498/aps.63.187304](https://doi.org/10.7498/aps.63.187304)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11104059, 61176089).

[†] Corresponding author. E-mail: anxt2005@163.com