

硅烯中受电场调控的体能隙和朗道能级

计青山 郝鸿雁 张存喜 王瑞

Electric field controlled energy gap and Landau levels in silicene

Ji Qing-Shan Hao Hong-Yan Zhang Cun-Xi Wang Rui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 087302 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.087302

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.087302>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I8>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一维石墨烯超晶格上的氢吸附

Hydrogen adsorption on one-dimensional graphene superlattices

物理学报.2014, 63(19): 197301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.197301>

单层与双层石墨烯的光学吸收性质研究

Optical absorptions in monolayer and bilayer graphene

物理学报.2013, 62(18): 187301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.187301>

旋转双层石墨烯的电子结构

Electronic structure of twisted bilayer graphene

物理学报.2013, 62(15): 157302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.157302>

二维 Li+BC<sub>3</sub> 结构高储氢容量的研究

Study of the high hydrogen storage capacity on 2D Li+BC<sub>3</sub> complex

物理学报.2013, 62(13): 137301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.137301>

羟基饱和锯齿型石墨烯纳米带的电子结构

Electronic structure of zigzag graphene nanoribbon terminated by hydroxyl

物理学报.2011, 60(9): 097301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.097301>

# 硅烯中受电场调控的体能隙和朗道能级\*

计青山<sup>1)</sup> 郝鸿雁<sup>1)</sup> 张存喜<sup>2)</sup> 王瑞<sup>2)†</sup>

1) (浙江海洋学院东海科学与技术学院, 舟山 316000)

2) (浙江海洋学院电子信息科学与工程系, 舟山 316022)

(2014年7月31日收到; 2014年11月20日收到修改稿)

近年来, 硅烯(单层硅)由于其独特的结构和电子性质以及在量子霍尔效应等领域的潜在应用而成为理论和实验研究的一个热点. 借助于四带次近邻紧束缚模型, 详细计算和研究了硅烯中受电场调制的体能隙和电子能级. 结果表明: 硅烯原胞中的两个子格处于不同的平面上, 可以通过外电场区分和控制这两个子格, 这将破坏在纯石墨烯中无法被破坏的  $K-K'$  对称性, 并消除由这一对称性导致的电子能级的二重简并; 外加电场还会引起硅烯中次近邻格点之间的 Rashba 自旋轨道耦合, 这一作用会在不同狄拉克点有选择地消除电子能级在部分电场点的简并, 相邻能级从交叉状态变为反交叉状态; 电子能级中除一些孤立的交叉点外, 每个能级都具有确定的自旋取向, 石墨烯中电子能级的四重简并在硅烯中被完全消除, 从而导致填充因子  $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  的量子霍尔平台.

**关键词:** 硅烯, 朗道能级, 简并, 自旋轨道耦合

**PACS:** 73.22.Pr, 71.70.Di, 71.70.Ej

**DOI:** 10.7498/aps.64.087302

## 1 引言

近年来, 硅烯由于其独特的结构和电子性质以及在量子霍尔效应等领域的潜在应用而成为理论和实验研究的一个热点<sup>[1-3]</sup>. 硅烯也称为单层硅<sup>[4,5]</sup>, 是由硅原子结合而成的一种二维晶体, 原胞中包含  $A, B$  两个子格, 它们各自形成一个三角形结构, 叠加成为类似于石墨烯的六角结构<sup>[6-8]</sup>. 结构上的类似使得硅烯几乎具有石墨烯的所有性质, 如量子霍尔效应、量子自旋霍尔效应<sup>[9-12]</sup>和量子反常霍尔效应<sup>[13-16]</sup>等. 除此之外, 由于硅原子和碳原子在结构和尺寸上的区别, 硅烯还具有一些自身特有的结构和性质.

首先, 硅烯原胞中的两个子格位于不同的平面, 可以通过外电场来区分和控制它们; 同时, 外电场还将引起次近邻格点之间的 Rashba 自旋轨道耦合作用. 其次, 硅烯具有比石墨烯更大的块状结构和自旋轨道耦合强度<sup>[4,5]</sup>. 早在 2005 年, Kane 和

Mele<sup>[17]</sup>就指出, 在时间反演对称保持不变的情况下, 自旋轨道耦合作用可以在石墨烯中诱导出量子自旋霍尔效应. 然而石墨烯中的自旋轨道耦合强度非常小, 量子自旋霍尔效应只有在极低的温度下才可能实现<sup>[18]</sup>. 硅烯由于具有较大的耦合强度, 从而有望在相对较高的温度上实现量子自旋霍尔效应<sup>[19-21]</sup>. 最后, 硅烯也更容易和目前的硅基半导体和以硅基半导体为基础的电子技术相结合<sup>[22]</sup>.

已发现石墨烯中许多物理现象和性质都源于其独特的电子能级结构<sup>[23-25]</sup>, 其电子能级中著名的四重简并分别来自于  $K-K'$  对称性和自旋对称性. 磁场或交换场的引入可以破坏自旋对称性, 从而消除由其引发的二重简并; 但  $K-K'$  对称性是无法破坏的, 由其导致的二重简并也无法消除, 从而形成填充因子  $\nu = \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots$  的量子霍尔平台. 与石墨烯不同, 硅烯中外电场的引入可以破坏体系的  $K-K'$  对称性, 再加上外磁场对自旋对称性的破坏, 电子能级的四重简并可以被完全消除,

\* 国家自然科学基金(批准号: 11304281)和浙江省自然科学基金(批准号: LY13D060002)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangrui@zjou.edu.cn

除一些孤立的能级交叉点外, 每个能级都具有固定的自旋取向, 从而导致填充因子  $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  的量子霍尔效应平台.

本文首先给出了紧束缚近似下硅烯的哈密顿量, 分别计算了两个狄拉克点处的能隙, 分析了其随外电场和外磁场的变化; 其次, 在不考虑自旋和考虑自旋两种情况下, 详细计算了硅烯的朗道能级, 分析了外电场及自旋轨道耦合等作用对电子能级的影响, 对相应的波函数特别是基态和第一激发态波函数也做了讨论; 最后是一个简短的总结.

## 2 单层硅的哈密顿和能隙

实空间中硅烯的四带次近邻紧束缚哈密顿量可以写为<sup>[4,5,26]</sup>

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} C_{i,\alpha}^\dagger C_{j,\alpha} + i \frac{V_{\text{so}}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha\beta} C_{i,\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{d}_{kj} \times \mathbf{d}_{ik}) C_{j,\beta} + iV_{\text{R1}} \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha\beta} C_{i,\alpha}^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{d}_{ij})_{\alpha\beta}^z C_{j,\beta} - i \frac{2}{3} V_{\text{R2}} \times \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha\beta} \mu_i C_{i,\alpha}^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{d}_{ij})_{\alpha\beta}^z C_{j,\beta}$$

$$-lE \sum_{i,\alpha} \mu_i C_{i,\alpha}^\dagger C_{i,\alpha} + g \sum_{i,\alpha} C_{i,\alpha}^\dagger \sigma_z C_{i,\alpha}, \quad (1)$$

式中的第一项为最近邻格点之间的跃迁,  $C_{i,\alpha}^\dagger$  为格点  $i$  处的电子产生算符,  $\alpha$  代表自旋, 尖括号  $\langle i, j \rangle$  表示对  $i$  的全部最近邻求和; 第二项是次近邻格点之间强度为  $V_{\text{so}}$  的内禀自旋轨道耦合, 格点  $k$  是它们的公共最近邻, 矢量  $\mathbf{d}_{ik}$  的方向从  $k$  指向  $i$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  为泡利矩阵,  $\beta$  表示自旋; 第三项和第四项是强度分别为  $V_{\text{R1}}$  和  $V_{\text{R2}}$  的 Rashba 自旋轨道耦合, 不同之处在于第三项定义在最近邻格点之间, 而第四项定义在次近邻格点之间, 在后面的讨论中, 我们分别称之为第一和第二 Rashba 自旋轨道耦合, 需要指出的是, 当第二 Rashba 自旋轨道耦合发生在  $A$  子格之间时  $\mu_i = +1$ , 发生在  $B$  子格之间时  $\mu_i = -1$ ; 第五项为垂直电场引起的  $A, B$  子格之间的交错势,  $2l$  为  $A, B$  子格所在平面的间距, 当把坐标原点选为这两个平面之间垂线的中点时,  $A, B$  子格具有相反的势能; 最后一项为磁场作用项.

对哈密顿量(1)式做傅里叶变换, 并选择  $[C_{A,\uparrow}, C_{A,\downarrow}, C_{B,\uparrow}, C_{B,\downarrow}]^T$  作为展开基矢, 可以得到哈密顿量在动量空间的形式

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} V_{\text{so}}A + g - lE & PV_{\text{R2}} & -Bt & DV_{\text{R1}} \\ P^*V_{\text{R2}} & -V_{\text{so}}A - g - lE & \Delta V_{\text{R1}} & -Bt \\ -B^*t & \Delta^*V_{\text{R1}} & -V_{\text{so}}A + g + lE & -PV_{\text{R2}} \\ \Delta^*V_{\text{R1}} & -B^*t & -P^*V_{\text{R2}} & V_{\text{so}}A - g + lE_z \end{pmatrix}. \quad (2)$$

式中各系数的定义如下:

$$A = \frac{1}{3\sqrt{3}} \left( 2 \sin(\sqrt{3}k_x a) - 4 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \times \cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right) \right),$$

$$B = 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) e^{-\frac{1}{2}k_y a} + e^{ik_y a},$$

$$D = i \left[ -e^{ik_y a} + \left( \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) + \sqrt{3} \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \right) e^{-\frac{1}{2}k_y a} \right],$$

$$\Delta = i \left[ -e^{ik_y a} + \left( \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) - \sqrt{3} \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \right) e^{-\frac{1}{2}k_y a} \right],$$

$$P = -\frac{4}{\sqrt{3}} \left( \sqrt{3} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \sin\left(\frac{3}{2}k_y a\right) + i \sin(\sqrt{3}k_x a) + i \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \times \cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right) \right). \quad (3)$$

这里  $a$  为  $A, B$  子格之间的距离, 在后面的计算和讨论中, 我们把它作为长度单元. 分别在狄拉克  $K$  点和  $K'$  点对角化矩阵(2)式, 可以得到价带和导带之间的能隙  $\Delta$  为

$$\Delta = |\sqrt{(lE + \eta g)^2 + 9V_{\text{R1}}^2 - \eta lE + g - 2V_{\text{so}}}|, \quad (4)$$

其中  $\eta$  在  $K$  点时取  $+1$ ,  $K'$  点时取  $-1$ . 令  $\Delta = 0$  可以得到使能隙关闭的电场值为

$$E_{\Delta=0} = \eta \frac{4V_{\text{so}}^2 - 9V_{\text{R1}}^2 - 4gV_{\text{so}}}{4l(g - V_{\text{so}})}. \quad (5)$$

特别地, 当交换场  $g = 0$  时, (5) 式具有更简洁的形式:

$$E_{\Delta=0} = \eta \frac{9V_{R1}^2 - 4V_{so}^2}{4V_{so}}. \quad (6)$$

可以看出, 外电场的引入使得不同狄拉克点的能隙具有不同的闭合条件. 除了电场, 我们也可以通过磁场来控制能隙的闭合和打开,

$$g_{\Delta=0} = \frac{4lEV_{so} + \eta(4V_{so}^2 - 9V_{R1}^2)}{4(lE + \eta V_{so})}. \quad (7)$$

此时若关闭外电场, 两个狄拉克点的能隙将具有共同的关闭条件,

$$g_{\Delta=0} = \frac{4V_{so}^2 - 9V_{R1}^2}{4V_{so}}, \quad (8)$$

这与石墨烯中的能隙闭合条件是一致的<sup>[16]</sup>.

图 1(a) 给出了体能隙随电场的变化. 我们把电子在最近邻格点之间的跃迁强度  $t$  作为能量单元, 相关参数为  $V_{so} = 0.2$ ,  $9V_{R1}^2 = 0.1$  和  $g = 0.05$ , 其内插图图为  $g = 0$  的情形. 在有外电场的情况下, 不论是否存在磁场, 不同狄拉克点的能隙都具有不

同的关闭条件. 这破坏了在石墨烯中无法被破坏的  $K$ - $K'$  对称性, 为单独操控每个狄拉克点提供了前提和条件. 图 1(b) 给出了在  $lE = 0.2$  的情况下能隙随磁场的变化. 此时, 狄拉克  $K'$  点的能隙始终保持打开而  $K$  点能隙则会随着磁场的增大而闭合再打开. 图 1(b) 的内插图图为电场为零时能隙随磁场的变化, 此时两个狄拉克点的能隙完全相同. 随着磁场的增大, 能隙将逐渐减小到零, 然后再重新打开, 系统从经历一个拓扑相变<sup>[15,16]</sup>.

石墨烯中许多新奇的现象如量子自旋霍尔效应和量子反常霍尔效应等都源于其独特的电子能级,  $K$ - $K'$  对称性和自旋对称性使得石墨烯中的电子能级存在着著名的四重简并. 磁场或交换场可以破坏自旋对称性, 从而消除由该对称性导致的二重简并. 但  $K$ - $K'$  对称性在纯石墨烯中是无法破坏的, 由其引发的二重简并也无法消除. 硅烯中的外加垂直电场破坏了它的  $K$ - $K'$  对称性, 从而可以完全消除电子能级的四重简并, 进而导致填充因子  $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  的量子霍尔平台.

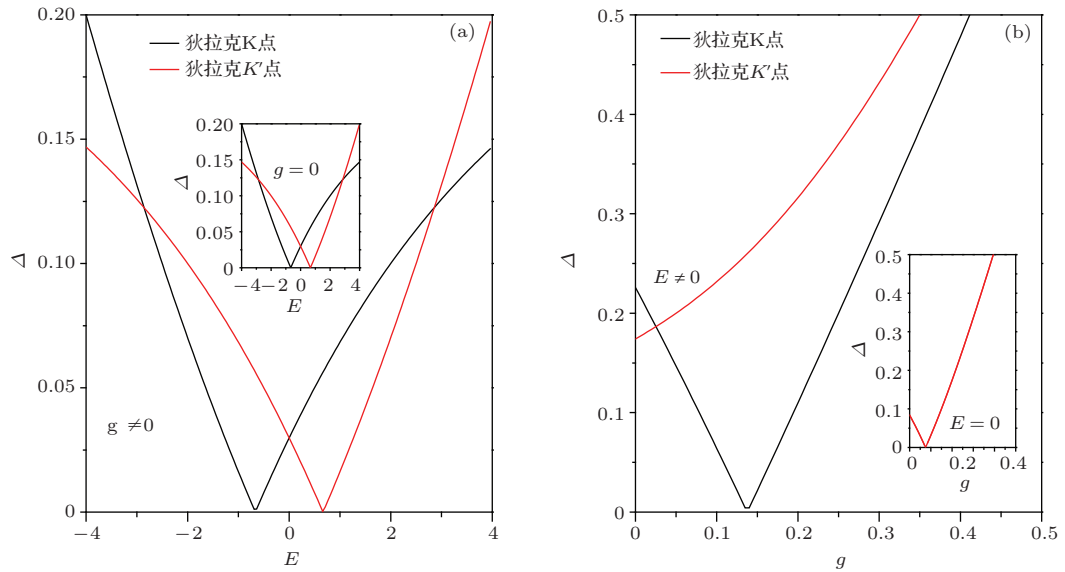


图 1 (网刊彩色) 硅烯体能隙随 (a) 外电场和 (b) 磁场的变化

Fig. 1. (color online) Silicene bulk energy gap as a function of (a) the electric field and (b) the magnetic field.

## 2.1 不考虑自旋时的朗道能级

首先计算不考虑自旋时的朗道能级. 有多种方法可以得到体系的朗道能级, 如格点方法、 $KP$ 方法等<sup>[27]</sup>, 二者在弱场情况下是等效的. 本文用  $KP$ 方法来计算硅烯的朗道能级, 采用朗道规范  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ , 用  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}$  代替哈密顿量(2)式中的动量  $\mathbf{p}$ , 可以得到长波极限下狄拉克

$K$  点的哈密顿量为

$$\mathbf{H}(K) = \begin{pmatrix} -lE & \frac{3at}{2\hbar}(p_{0x} - ip_{0y}) \\ \frac{3at}{2\hbar}(p_{0x} + ip_{0y}) & lE \end{pmatrix}. \quad (9)$$

为得到本征能量, 需要求解矩阵方程  $\mathbf{H}(K)[\Psi_{K,A}, \Psi_{K,B}]^T = \varepsilon_K[\Psi_{K,A}, \Psi_{K,B}]^T$ , 其中

$\Psi_{K,A}$ ,  $\Psi_{K,B}$  分别为  $K$  点  $A$  谷和  $B$  谷的波函数. 定义费米速度  $v_F = 3at/(2\hbar)$ , 采用代入消去法对 (9) 式解耦可得到两个分立的方程:

$$\begin{aligned} & v_F^2(p_{0x} + ip_{0y})(p_{0x} - ip_{0y})\Psi_{K,B} \\ & = (\varepsilon_{K,B}^2 - l^2 E^2)\Psi_{K,B}, \\ & v_F^2(p_{0x} - ip_{0y})(p_{0x} + ip_{0y})\Psi_{K,A} \\ & = (\varepsilon_{K,A}^2 - l^2 E^2)\Psi_{K,A}. \end{aligned} \quad (10)$$

先求解  $B$  谷的能级  $\varepsilon_{K,B}$ , 利用对易关系  $[p_x + \frac{q}{c}By, p_y] = i\frac{q}{c}B\hbar$  可以得到

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\varepsilon_{K,B}^2 - l^2 E^2}{v_F^2} + \frac{\hbar e B}{c} \right) \Psi_{K,B} \\ & = \left[ \left( p_x - \frac{e}{c}By \right)^2 + p_y^2 \right] \Psi_{K,B}. \end{aligned} \quad (11)$$

做变量代换  $\tilde{k} = \frac{1}{m} \left[ \frac{eB}{c} \right]^2$  和  $y_0 = \frac{p_x c}{e_0 B}$ , 则方程 (11) 可以写为下面的形式:

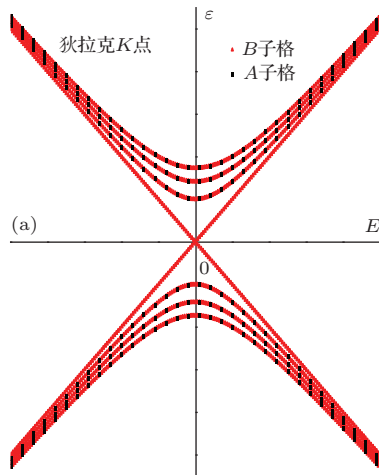
$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} \left( \frac{\varepsilon_{K,B}^2 - l^2 E^2}{v_F^2} + \frac{\hbar e_0 B}{c} \right) \Psi_{K,B} \\ & = \left[ \frac{\tilde{k}}{2} (y - y_0)^2 + \frac{1}{2m} p_y^2 \right] \Psi_{K,B}, \end{aligned} \quad (12)$$

(12) 式右侧是一个中心位于  $y_0$  且频率  $\omega = \sqrt{\tilde{k}/m} = e_0 B/(mc)$  的谐振子哈密顿量, 其能级为  $\varepsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega$  ( $n \geq 0$ ). 于是可以得到能级  $\varepsilon_{K,B}$  为

$$\varepsilon_{K,B}^2 = 2n\hbar v_F^2 \frac{e_0 B}{c} + l^2 E^2. \quad (13)$$

同理可以得到  $A$  谷的能级为

$$\varepsilon_{K,A}^2 = 2(n+1)\hbar v_F^2 \frac{eB}{c} + l^2 E^2. \quad (14)$$



把 (13) 和 (14) 式中  $n$  的取值范围从非负整数推广到整个整数, 可以把电子能级写为更简洁的形式:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{K,A} &= \text{sgn}(n) \sqrt{(|n|+1)\hbar^2 \omega_{\text{Dirac}}^2 + l^2 E^2}, \\ \varepsilon_{K,B} &= \text{sgn}(n) \sqrt{|n|\hbar^2 \omega_{\text{Dirac}}^2 + l^2 E^2}, \end{aligned} \quad (15)$$

这里定义  $\omega_{\text{Dirac}} = v_F \sqrt{\frac{2Be}{\hbar c}}$ ,  $\text{sgn}(n)$  为符号函数. 当  $n > 0$  时, (15) 式给出电子的能级 (导带); 当  $n < 0$  时则对应空穴的能级 (价带).

对狄拉克  $K'$  点做相同的处理和计算, 可以得到其电子能级为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{K',A} &= \text{sgn}(n) \sqrt{|n|\hbar^2 \omega_{\text{Dirac}}^2 + l^2 E^2}, \\ \varepsilon_{K',B} &= \text{sgn}(n) \sqrt{(|n|+1)\hbar^2 \omega_{\text{Dirac}}^2 + l^2 E^2}. \end{aligned} \quad (16)$$

值得指出的是, 当外电场为零时, 硅烯具有和石墨烯完全相同的电子能级. 在狄拉克  $K$  点为

$$\varepsilon_{K,A} = \text{sgn}(n) \sqrt{(|n|+1)\hbar\omega_{\text{Dirac}}}$$

和

$$\varepsilon_{K,B} = \text{sgn}(n) \sqrt{|n|\hbar\omega_{\text{Dirac}}};$$

$K'$  点则为

$$\varepsilon_{K',A} = \text{sgn}(n) \sqrt{|n|\hbar\omega_{\text{Dirac}}}$$

和

$$\varepsilon_{K',B} = \text{sgn}(n) \sqrt{(|n|+1)\hbar\omega_{\text{Dirac}}}.$$

这与文献 [28, 29] 的结果相同.

图 2 所示为在不考虑自旋情况下硅烯的电子能级, 横轴为外电场  $E$ , 纵轴为电子的能量  $\varepsilon$ . 图 2 (a) 是狄拉克  $K$  点的电子能级, 图 2 (b) 是  $K'$  点

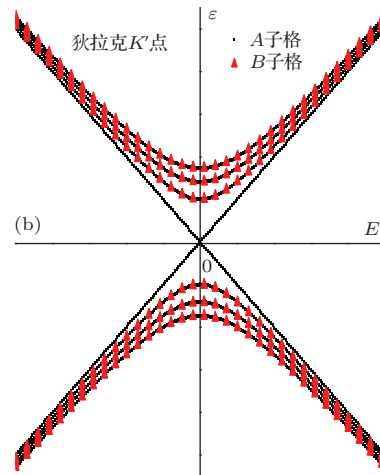


图 2 (网刊彩色) 不考虑自旋时硅烯的电子能级 (a) 狄拉克  $K$  点; (b) 狄拉克  $K'$  点

Fig. 2. (color online) Electronic energy levels for spinless silicene: (a)  $K$  point; (b)  $K'$  point.

的电子能级. 图中的线性直线来自于使表达式 (15) 和 (16) 中  $\omega_{\text{Dirac}}$  系数为零的结果. 当我们关注电子的能级时, 狄拉克  $K$  点的能级中来自  $A$  子格的电子缺少了最低能级  $lE$ , 在  $K'$  点中则是位于  $B$  子格的电子缺少了最低能级. 由于我们没有考虑自旋, 所以图中的每个能级都是二重简并的, 这一简并将在引入自旋轨道耦合作用后得到消除. 一般情况下, 一个非零  $n$  所对应的态在  $A$  子格和  $B$  子格都有非零的波函数, 但  $n = 0$  时情况会有所不同. 当系统处于基态时, 在某个狄拉克点, 其只在一个子格具

有非零的波函数, 对狄拉克  $K$  点, 基态时的电子全部位于  $B$  子格,  $K'$  点则全部位于  $A$  子格.  $A, B$  子格之间的这种不对称性源于最近邻原子之间的不对称性. 硅烯中电子能级的这种性质使得基态成为一个非常特殊的态, 这种情况在引入磁场和自旋后会有更加明显的体现.

## 2.2 考虑自旋情况时的朗道能级

当体系存在自旋时, 利用  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ , 可以写出哈密顿量 (2) 式在狄拉克  $K$  和  $K'$  点的形式为

$$\mathbf{H}(K) = \begin{pmatrix} -V_{\text{so}} + g - lE & 3aV_{\text{R}2}ik_- & \frac{3}{2}atk_- & 0 \\ -3aV_{\text{R}2}ik_+ & V_{\text{so}} - g - lE & -3iV_{\text{R}1} & \frac{3}{2}atk_- \\ \frac{3}{2}atk_+ & 3iV_{\text{R}1} & V_{\text{so}} + g + lE & -3aV_{\text{R}2}ik_- \\ 0 & \frac{3}{2}atk_+ & 3aV_{\text{R}2}ik_+ & -V_{\text{so}} - g + lE \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$\mathbf{H}(K') = \begin{pmatrix} V_{\text{so}} + g - lE & 3aV_{\text{R}2}ik_- & -\frac{3}{2}atk_+ & -3iV_{\text{R}1} \\ -3aV_{\text{R}2}ik_+ & -V_{\text{so}} - g - lE & 0 & -\frac{3}{2}atk_+ \\ -\frac{3}{2}atk_- & 0 & -V_{\text{so}} + g + lE & -3aV_{\text{R}2}ik_- \\ 3iV_{\text{R}1} & -\frac{3}{2}atk_- & 3aV_{\text{R}2}ik_+ & V_{\text{so}} - g + lE \end{pmatrix}. \quad (18)$$

做变换  $ik_y \rightarrow \partial_y$  并标记  $l_B = \sqrt{\hbar c / (Be)}$ , 可以得到如下的关系式:

$$\begin{aligned} k_x - \frac{eBy}{\hbar c} - ik_y &= k_x - \frac{eBy}{\hbar c} - \partial_y = -\frac{1}{l_B}(y' + \partial_{y'}), \\ k_x - \frac{eBy}{\hbar c} + ik_y &= -\frac{1}{l_B}(y' - \partial_{y'}), \end{aligned} \quad (19)$$

式中  $y' = \frac{1}{l_B}y - l_B k_x$ ,  $\partial_{y'} = l_B \partial_y$ . 则可以定义湮灭算符  $\hat{a}$  和产生算符  $\hat{a}^\dagger$  为

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(y' - \partial_{y'}), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(y' + \partial_{y'}). \quad (20)$$

于是可以把哈密顿量 (17) 和 (18) 式写为算符的形式:

$$\mathbf{H}(K) = \begin{pmatrix} -V_{\text{so}} + g - lE & -i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} \hat{a}^\dagger & -\omega_c \hat{a}^\dagger & 0 \\ i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} \hat{a} & V_{\text{so}} - g - lE & -3iV_{\text{R}1} & -\omega_c \hat{a}^\dagger \\ -\omega_c \hat{a} & 3iV_{\text{R}1} & V_{\text{so}} + g + lE & i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} V_{\text{R}2} \hat{a}^\dagger \\ 0 & -\omega_c \hat{a} & -i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} \hat{a} & -V_{\text{so}} - g + lE \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$\mathbf{H}(K') = \begin{pmatrix} V_{\text{so}} + g - lE & -i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} \hat{a}^\dagger & \omega_c \hat{a} & -3iV_{\text{R}1} \\ i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} \hat{a} & -V_{\text{so}} - g - lE & 0 & \omega_c \hat{a} \\ \omega_c \hat{a}^\dagger & 0 & -V_{\text{so}} + g + lE & i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} V_{\text{R}2} \hat{a}^\dagger \\ 3iV_{\text{R}1} & \omega_c \hat{a}^\dagger & -i\omega_c \frac{2V_{\text{R}2}}{t} \hat{a} & V_{\text{so}} - g + lE \end{pmatrix}, \quad (22)$$

式中  $\omega_c = \sqrt{2}\hbar v_F/l_B$  为频率常数.

我们利用下面的定态方程求解狄拉克  $K$  点的能级,

$$\begin{aligned} & H(K)\Psi(K) \\ &= H(K) \begin{pmatrix} \Psi_{A,\uparrow} \\ \Psi_{A,\downarrow} \\ \Psi_{B,\uparrow} \\ \Psi_{B,\downarrow} \end{pmatrix} = H(K) \begin{pmatrix} |n\rangle \\ \alpha|m\rangle \\ \beta|l\rangle \\ \gamma|k\rangle \end{pmatrix} \\ &= \lambda \begin{pmatrix} |n\rangle \\ \alpha|m\rangle \\ \beta|l\rangle \\ \gamma|k\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (23)$$

首先可以得到其波函数形式为

$$\Psi_{n \geq 2}(K) = [|n\rangle, \alpha|n-1\rangle, \beta|n-1\rangle, \gamma|n-2\rangle]^T, \quad (24)$$

其中  $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{a}^{\dagger N} |0\rangle$  是第  $n$  能级所对应的本征态. 一般地, 对于  $n \geq 2$  的能级, 其波函数为  $n, n-1$  和  $n-2$  三个能级所对应本征态的线性叠加. 但对  $n=0$  和  $n=1$ , 我们需要单独求出其对应波函数,

$$\begin{aligned} \Psi_0(K) &= [|0\rangle, 0, 0, 0]^T, \\ \Psi_1(K) &= [|1\rangle, \alpha|0\rangle, \beta|0\rangle, 0]^T. \end{aligned} \quad (25)$$

(24) 和 (25) 式就组成了狄拉克  $K$  点的所有本征态.

在  $K$  点, 当系统处于基态时, 只有  $A$  谷自旋向上分量的波函数不为零, 意味着此时所有电子以自旋向上的形式聚集于  $A$  谷; 当处于第一激发态时,  $A$  谷将同时具有自旋向上和向下分量的波函数, 但  $B$  谷上的波函数将只有自旋向上的组分. 把哈密顿量 (21) 式作用到这些本征态上, 就可以得到相应的能级.

对狄拉克  $K'$  点重复上面的计算, 可以得到该点的波函数为

$$\begin{aligned} \Psi_{n \geq 2}(K') &= [\alpha'|n-1\rangle, \beta'|n-2\rangle, |n\rangle, \gamma'|n-1\rangle]^T, \\ \Psi_{n=0}(K') &= [0, 0, |0\rangle, 0]^T, \\ \Psi_{n=1}(K') &= [\alpha'|0\rangle, 0, |1\rangle, \gamma'|0\rangle]^T. \end{aligned} \quad (26)$$

在  $K'$  点, 当系统处于基态时, 电子全部以自旋向上的形式聚集于  $B$  谷, 当其处于第一激发态时,  $B$  谷将同时具有自旋向上和向下的组分, 而  $A$  谷则只具有自旋向上的分量. 把这些波函数应用到  $K'$  点的哈密顿量即可得到该点的电子能级.

鉴于内禀自旋轨道耦合在量子自旋霍尔效应中的重要作用<sup>[17]</sup>, 我们首先考察这一作用对硅烯电子能级的影响. 图 3 给出了在只有内禀自旋轨道耦合的情况下电子能级随外电场的变化, 相关参数为  $V_{so} = 0.2, V_{R1} = V_{R2} = 0$ . 图中的线性能级对应于  $K$  和  $K'$  点的基态和第一激发态. 可以看出, 在狄拉克  $K$  点(图 3(a)), 自旋向上电子能级(见图中蓝色曲线)的右侧向上抬升, 而自旋向下能级(图中

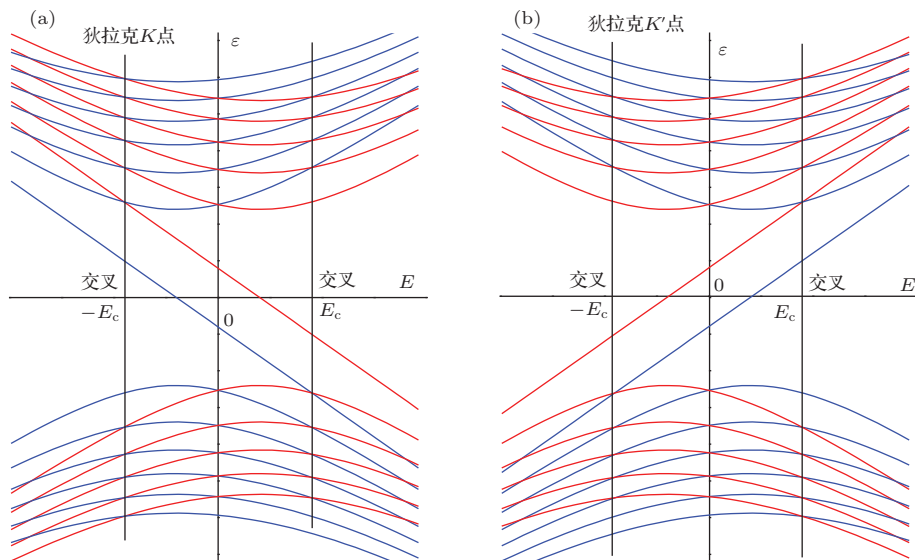


图 3 (网刊彩色) 内禀自旋轨道耦合对电子能级的影响 (a) 狄拉克  $K$  点; (b) 狄拉克  $K'$  点

Fig. 3. (color online) Landau levels in silicene as a function of the electric field in the absence of Rashba spin-orbit-coupling: (a)  $K$  point; (b)  $K'$  point.

红色曲线) 的左侧向上抬升,  $K'$  点的情况则正好相反(图3(b)). 内禀自旋轨道耦合能导致相邻能级的交叉从而形成简并, 这些简并点位于  $E = 0, \pm E_c$  等一系列相互平行且垂直于横轴的直线上(见图中的灰色竖线).

不同于哈密顿量中的其他相互作用, 作用在次近邻格点之间的第二 Rashba 自旋轨道耦合  $V_{R2}$  是硅烯所特有的一个作用. 图4给出了在忽略第一 Rashba 自旋轨道耦合的情况下第二 Rashba 自旋轨道耦合对电子能级的影响, 相关参数为  $V_{R2} = 0.02$  和  $V_{so} = 0.2$ . 在图3中, 我们已经说明内禀自旋轨道耦合能引起相邻能级在一些孤立特定电场值点的简并. 在此基础上, 一个较小的

第二 Rashba 自旋轨道耦合将给能级带来一个微小的修正, 并在不同狄拉克点解除不同电场点的简并. 图4(a)为狄拉克  $K$  点的电子能级, 可以看出  $E = -E_c$  处的简并将消除, 在该点各能级由原来的交叉变为反交叉, 而  $E = 0$  及  $E = E_c$  处还将继续保持原来的简并状态. 图4(b)为狄拉克  $K'$  的电子能级, 在该点, 能级在  $E = E_c$  处的简并消除, 相邻能级从交叉变为反交叉状态, 而  $E = -E_c$  及  $E = 0$  处的简并将保持不变.

最后, 我们讨论第一 Rashba 自旋轨道耦合对硅烯电子能级的影响. 这一相互作用被认为不利于量子自旋霍尔效应的实现, 而有利于反常量子霍尔效应的实现, Rashba 自旋轨道耦合与交换场的共同

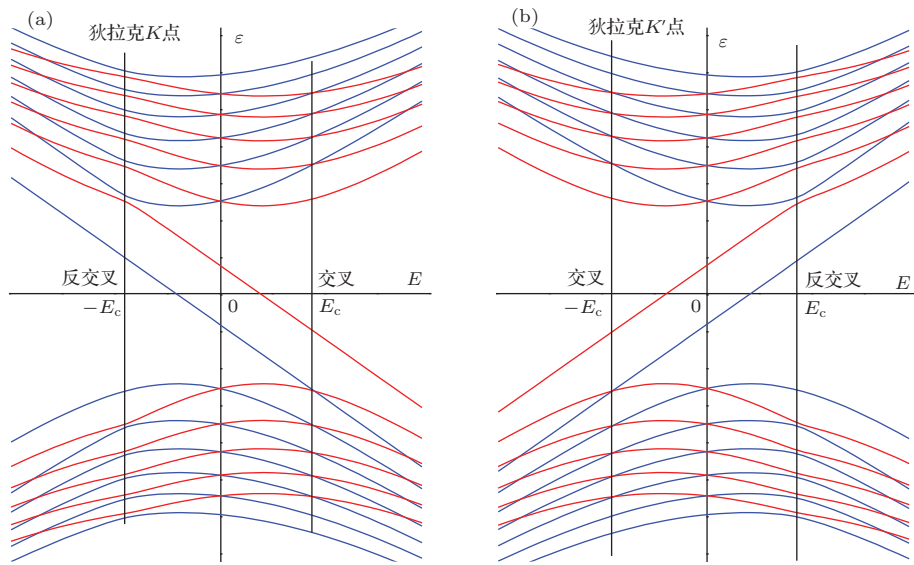


图4 (网刊彩色) 第二 Rashba 自旋轨道耦合对电子能级的影响 (a) 狄拉克  $K$  点; (b) 狄拉克  $K'$  点

Fig. 4. (color online) Effect of the second Rashba spin-orbit-coupling on the Landau levels: (a)  $K$  point; (b)  $K'$  point.

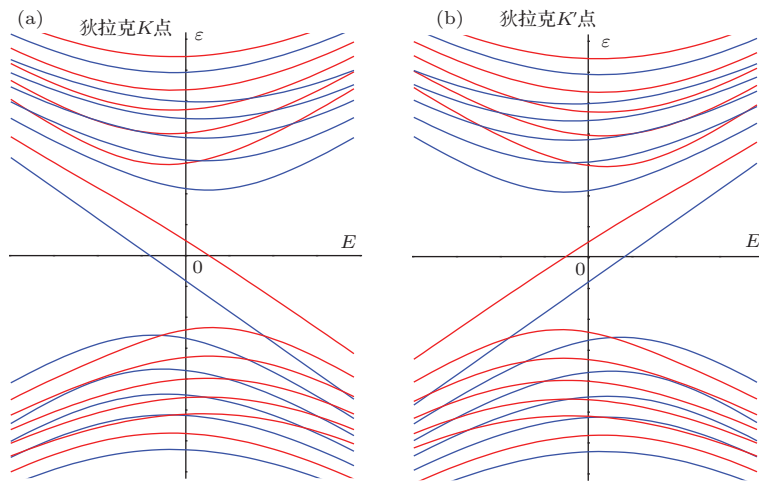


图5 (网刊彩色) 第一 Rashba 自旋轨道耦合对电子能级的影响 (a) 狄拉克  $K$  点; (b) 狄拉克  $K'$  点

Fig. 5. (color online) Effect of the first Rashba spin-orbit-coupling on the Landau levels: (a)  $K$  point; (b)  $K'$  point.



作用是在石墨烯中实现反常量子霍尔效应的关键所在<sup>[30]</sup>. 当 $V_{R1}$ 足够大时, 可以忽略第二 Rashba 自旋轨道耦合( $V_{R2} = 0$ ), 而只考虑 $V_{R1}$ 对电子能级的影响. 图5给出了相应的数值计算结果, 其中图5(a)为狄拉克 $K$ 点的电子能级, 图5(b)为狄拉克 $K'$ 点的能级, 相关参数分别为 $V_{R1} = 0.1$ 和 $V_{so} = 0.2$ . 可以看出, 第一 Rashba 自旋轨道耦合将破坏 $E = 0$ 处的简并, 能级交叉或简并点的连线也不再像图3和图4所示(有较清晰的规律)形成一系列垂直于横轴的直线, 而是分散在更多的、分立的电场点. 除了这些个别的简并点外, 每个能级都具有确定的自旋极化方向, 四重简并得到了完全的消除, 由此将形成填充因子 $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 的量子霍尔平台.

### 3 结 论

本文借助于四带次近邻紧束缚模型, 在外加电场和磁场的情况下, 详细讨论了硅烯中受电场调制的体能隙和朗道能级. 硅烯原胞中 $A, B$ 两个子格处于不同的平面上, 可以通过外电场来控制 and 区分这两个子格. 这使得不同狄拉克点的能隙具有不同的关闭和再打开条件. 我们可以关闭一个狄拉克点的能隙而同时保持另一个点的能隙始终为打开状态, 这会破坏在石墨烯中无法被破坏的 $K-K'$ 对称性并同时消除由这一对称性导致的电子能级的二重简并. 硅烯的另一个特点则与自旋轨道耦合相互作用有关, 除最近邻之间的 Rashba 自旋轨道耦合和次近邻之间的内禀自旋轨道耦合等在石墨烯中得到广泛研究和讨论的自旋轨道耦合外, 外电场还会引起硅烯中次近邻格点之间的 Rashba 自旋轨道耦合. 这一作用会在不同狄拉克点有选择地消除一些特点电场点的简并, 使相邻能级从原来的交叉变为反交叉状态. 受电场调制的电子能级中除一些孤立的交叉点外, 每个能级都具有确定的自旋取向, 石墨烯中著名的四重简并在硅烯中将完全消除, 从而形成填充因子 $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 的量子霍尔平台.

本文中, 我们在垂直于硅烯平面的 $z$ 方向施加以均匀电场 $E$ , 详细求解了硅烯的体能隙和朗道能级. 相关结论有助于我们更好地理解硅烯中的量子霍尔效应、量子自旋霍尔效应、反常量子霍尔效应等. 这些效应以具有完全打开的体能隙和受到拓扑保护的边缘态著称. 最近, 日本物理学家 Ezawa<sup>[31]</sup>

的研究表明, 当对硅烯施加以空间不均匀电场时, 可以在硅烯中的任意区域实现螺旋状的零模, 使得同一硅烯中的不同区域可以在同一时间处于拓扑绝缘体、金属等不同的量子相. 这些研究有望在自旋电子学的研究和应用中发挥作用.

### 参考文献

- [1] Meyer J C, Geim A K, Katsnelson M I, Novoselov K S, Booth T J, Roth S 2007 *Nature* **446** 60
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Grigorieva M I K I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [3] Rowlands D A, Zhang Y Z 2014 *Chin. Phys. B* **23** 037101
- [4] Liu C C, Feng W, Yao Y 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 076802
- [5] Liu C C, Jiang H, Yao Y 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195430
- [6] Wang S K, Tian H Y, Yang Y H, Wang J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 017203
- [7] Vogt P, De Padova P, Quaresima C, Avila J, Frantzeskakis E, Asensio M C, Resta A, Ealet B, Lay G L 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 155501
- [8] Lin C L, Arafune R, Kawahara K, Tsukahara N, Minamitani E, Kim Y, Takagi N, Kawai M 2012 *Appl. Phys. Express* **5** 045802
- [9] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [10] Hasan M Z, Kane C 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [11] Onoda M, Nagaosa N 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 206601
- [12] Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 146802
- [13] Qiao Z, Jiang H, Li X, Yao Y, Niu Q 2012 *Phys. Rev. B* **85** 115439
- [14] Prodan E 2009 *Phys. Rev. B* **80** 125327
- [15] Sheng D N, Weng Z Y, Sheng L, Haldane F D M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 036808
- [16] Yang Y, Xu Z, Sheng L, Wang B, Xing D Y, Sheng D N 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 066602
- [17] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [18] Novoselov K S, Jiang Z, Zhang Y, Morozov S V, Stormer H L, Zeitler U, Maan J C, Boebinger G S, Kim P, Geim A K 2007 *Science* **315** 1379
- [19] Ezawa M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 055502
- [20] Ezawa M 2013 *Phys. Rev. B* **87** 155415
- [21] Li Z J, Li Q, Cheng Z G, Li H B, Fang Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 028102
- [22] Fleurence A, Friedlein R, Ozaki T, Wang Y, Yamada-Takamura Y 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 245501
- [23] Deacon R S, Chuang K C, Nicholas R J, Novoselov K S, Geim A K 2007 *Phys. Rev. B* **76** 081406(R)
- [24] Li G, Andrei E Y 2007 *Nat. Phys.* **3** 623
- [25] Matsui T, Kambara H, Niimi Y, Tagami K, Tsukada M, Fukuyama H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 226403
- [26] Pan H, Li Z S, Liu C C, Zhu G B, Qiao Z H, Yao Y G 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 106802
- [27] Zhang Z Z, Chang K, Peeters F M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235411
- [28] Zheng Y, Ando T 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245420

[29] Krstajić P M, Vasilopoulos P 2012 *Phys. Rev. B* **86** 115432

Wang J, Niu Q 2010 *Phys. Rev. B* **82** 161414(R)

[31] Ezawa M 2012 *New J. Phys.* **14** 033003

[30] Qiao Z, Yang S A, Feng W, Tse W K, Ding J, Yao Y,

# Electric field controlled energy gap and Landau levels in silicene\*

Ji Qing-Shan<sup>1)</sup> Hao Hong-Yan<sup>1)</sup> Zhang Cun-Xi<sup>2)</sup> Wang Rui<sup>2)†</sup>

1) (*Department of Donghai Science and Engineering, Zhejiang Ocean University, Zhoushan 316000, China*)

2) (*Department of Electronic Information Science and Engineering, Zhejiang Ocean University, Zhoushan 316022, China*)

( Received 31 July 2014; revised manuscript received 20 November 2014 )

## Abstract

We investigate the electric field controlled energy gap and the Landau levels in silicene in detail. The energy gap at different Dirac points has different closing and reopening conditions and the 2-fold degeneracy induced by the  $K$ - $K'$  symmetry is resolved. An externally applied electric field gives rise to two Rashba spin-orbit-couplings between the nearest neighbour and the next nearest neighbour in silicene. Both these couplings can resolve the spin degeneracy at some isolated values of the electric field, where the crossover of the successive Landau levels become anti-crossover. Except some special values of the electric field, the 4-fold degeneracy of energy levels associated with the  $K$ - $K'$  symmetry and spin symmetry is completely resolved in silicene, each level has a definite spin polarization, which correspond to the quantum Hall plateaux with filling factor  $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .

**Keywords:** silicene, Landau levels, degeneracy, spin-orbit-couplings

**PACS:** 73.22.Pr, 71.70.Di, 71.70.Ej

**DOI:** 10.7498/aps.64.087302

\* Project supported by National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11304281) and the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. LY13D060002).

† Corresponding author. E-mail: wangrui@zjou.edu.cn