

ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН СИЛИЦЕНА В ПРИСУТСТВИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И МАГНИТНОГО ПОЛЕЙ

*А. В. Герт**, *М. О. Нестоклон*, *И. Н. Ясиевич*

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 19 октября 2015 г.

На основе симметричного анализа построен эффективный гамильтониан силицена в окрестности дираковских точек в присутствии электрического и магнитного полей, перпендикулярных плоскости пленки. Численные коэффициенты при различных слагаемых в гамильтониане найдены с помощью метода сильной связи в базисе $sp^3d^5s^*$ с учетом взаимодействия с одним ближайшим соседом. Этот метод развит в предыдущей работе [1] для случая смещения подрешеток 0.44 \AA , что соответствует теоретическому значению смещения, полученному из первых принципов для свободной пленки силицена. Проанализировано влияние смещения подрешеток на эффекты ориентации спина и псевдоспина в силицене. Полученный гамильтониан дает возможность рассмотрения спинового и электронного транспорта для носителей заряда с энергией меньше 0.5 эВ . Подробно изучено орбитальное движение электронов во внешнем магнитном поле, перпендикулярном пленке.

DOI: 10.7868/S004445101611016X

1. ВВЕДЕНИЕ

Силицен — квазидвумерный материал из атомов кремния с гексагональной кристаллической решеткой, состоящей из двух плоских подрешеток, перпендикулярно смещенных друг относительно друга. В отличие от графена, в силицене sp^2 -гибридизация является нестабильной [2], что приводит к вытеснению части атомов кремния из плоскости. При этом гибридизация атомных орбиталей становится смешанной: sp^2 – sp^3 . Также важным отличием от графена является наличие существенного спин-орбитального взаимодействия.

В настоящее время силицен, кремниевый аналог графена, привлекает все большее внимание в связи с совершенствованием технологии его получения и перспективами практического применения в кремниевой электронике и спинтронике [3–5]. Недавно была опубликована работа группы исследователей из Италии и США, которые изготовили на базе силицена полевой транзистор, работающий при комнатной температуре [6]. Прибор был создан на основе оригинальной технологии: силицен выращивался на тонком слое серебра, нанесенного на изолиру-

ющую подложку из слюды, и покрывался пленкой оксида алюминия. Полученная таким образом трехслойная структура была снята со слюды и помещена на подложку из сильнолегированного p^+ -кремния, покрытого тонким слоем SiO_2 . После химического травления центральной части верхнего серебряного слоя были сформированы два контакта, служащие в качестве стока и истока транзистора, а управляющее напряжение прикладывалось к сильнолегированному слою p -Si. Вольт-амперная характеристика этого транзистора, измеренная при комнатной температуре, соответствовала теоретической модели амбиполярного дираковского транспорта с подвижностью $100 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Недавно силицен также был выращен на ZrB_2 [7].

В данной работе в разд. 2 с помощью симметричного анализа построен эффективный гамильтониан силицена. На основе развитого в работе [1] метода сильной связи в базисе $sp^3d^5s^*$ определены численные коэффициенты слагаемых полученного гамильтониана. Обнаружено, что ряд слагаемых вносит пренебрежимо малый вклад. В разд. 3 детально рассмотрено влияние величины смещения подрешеток на ориентации спина и псевдоспина во внешних электрических и магнитных полях, направленных перпендикулярно пленке. Полученный гамильтониан дает возможность изучения транспортных явлений при энергиях менее 0.5 эВ . В разд. 4 проведено

* E-mail: anton.gert@mail.ioffe.ru

рассмотрение особенности орбитального движения в силиcene в магнитном поле, перпендикулярном поверхности. Детали теоретического анализа приведены в Приложениях к статье.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Кристаллическую структуру силицена можно получить из двумерного кристалла графена с точечной симметрией D_{6h} . Для этого необходимо сместить относительно друг друга две подрешетки, что приводит к понижению симметрии до C_{3v} .

Зона Бриллюэна силицена — шестиугольник. Аналогично графену, состояния вблизи уровня Ферми находятся в двух долинах, в окрестностях точек K и K' (рис. 1). В окрестности каждой из долин электронные состояния симметричны относительно группы C_3 (здесь и далее используются обозначения из [8]).

Считая смещение подрешеток в силиcene возмущением идеальной двумерной гексагональной структуры из атомов кремния с точечной симметрией D_{3h} в одной долине, будем искать гамильтониан, инвариантный относительно этой группы. Можно показать, что симметричный анализ с использованием реальной симметрии решетки силицена, соответствующей точечной группе C_{3v} (C_3 в одной долине), приводит к тому же результату, но не позволяет отличить слагаемые, линейные по смещению подрешеток, от слагаемых, которые разрешены в идеальной плоской графеноподобной решетке. При этом, в отличие от графена, важную роль играет величина смещения Δ_Z подрешеток в направлении, перпендикулярном плоскости подрешеток сили-

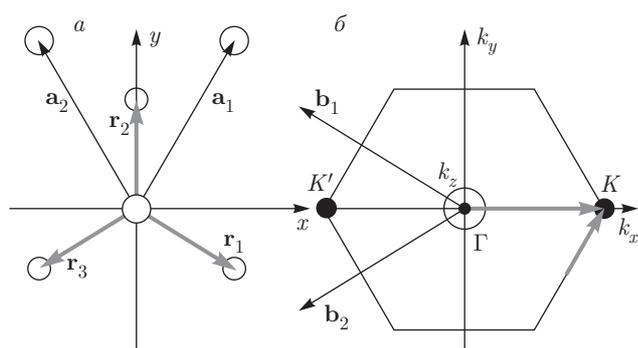


Рис. 1. Схемы атомной структуры (а) и зоны Бриллюэна (б) силицена: r_1, r_2, r_3 — векторы ближайших соседей, a_1 и a_2 — векторы элементарной ячейки в реальном пространстве, a_1^* и a_2^* — векторы, обратные к b_1 и b_2 . Ось z направлена перпендикулярно плоскости структуры

цена. В результате симметричного анализа был получен эффективный гамильтониан в линейном по волновому вектору \mathbf{k} приближении в окрестностях этих точек:

$$H(k) = \hbar v(\hat{\sigma}_x k_x \tau_z + \hat{\sigma}_y k_y \mathbf{1}_\tau) + \hbar v \Delta \frac{\Delta_Z}{\Delta_Z^i} \hat{\sigma}_z (k_x \hat{s}_y - k_y \hat{s}_x) \mathbf{1}_\tau + \Delta_{so} \hat{s}_z \hat{\sigma}_z \tau_z, \quad (1)$$

где \hat{s} и $\hat{\sigma}$ — операторы спина и псевдоспина, соответственно, Δ_{so} — энергия спин-орбитального расщепления, равная половине энергетической щели в дираковской точке, $\Delta_Z^i = a/2\sqrt{6} \approx 0.78$ — расстояние между атомными плоскостями (111) в объемном кремнии, v и v_Δ — скорость Ферми и поправка к ней, обусловленная смещением подрешеток и спин-орбитальным взаимодействием, матрицы $\mathbf{1}_\tau$ и $\tau_{x,y,z}$ — единичная матрица и матрицы Паули, действующие в пространстве долин.

При нулевом смещении подрешеток эффективный гамильтониан в окрестности точки K совпадает с аналогичным гамильтонианом для графена [9]. В противном случае возникает второе слагаемое в гамильтониане (1), линейно зависящее от величины смещения подрешеток. Это слагаемое быстро становится малым при отклонении от дираковской точки вследствие поляризации псевдоспина в плоскости xy , определяемой первым членом выражения (1). Коэффициенты при остальных слагаемых зависят от четных степеней Δ_Z и также существенно меняются при смещении подрешеток [1].

В окрестностях дираковской точки без учета спин-орбитального взаимодействия две дисперсионные кривые (\pm) сходятся в дираковских точках (точках K и K' зоны Бриллюэна, см. рис. 1). Вследствие спин-орбитального взаимодействия в этих точках образуется энергетическая щель (см. рис. 2), разделяющая два двукратно вырожденных состояния, для описания которых вводится оператор псевдоспина. Эти состояния преобразуются по неприводимому представлению Γ_5 группы D_{3h} как

$$|\rho_\mp\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |\tilde{x} \mp i\tilde{y}\rangle,$$

где $|\tilde{x}\rangle$ и $|\tilde{y}\rangle$ преобразуются так же, как координатные функции, но не меняют знака при инверсии координат. Блоховские функции соответствуют состояниям в подрешетках A, B для долины K и подрешеткам B, A в долине K' [9]. Выражение (1) предполагает выбор базисных функций псевдоспина AK, BK в долине K и AK', BK' в долине K' . Гамильтониан (1) описывает электронные состояния в линейной области до энергии 0.5 эВ.

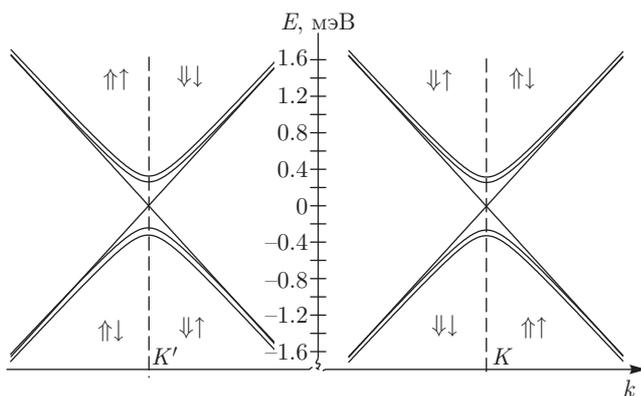


Рис. 2. Схемы энергетической дисперсии силицена в окрестностях дираковских точек. Прямые соответствуют электронным состояниям без учета спин-орбитального взаимодействия при нулевом сдвиге подрешеток; кривые линии демонстрируют дисперсию в долинах K и K' при учете спина и относительном смещении $\Delta_Z/\Delta_Z^{Si} = 0.51$. Направления спина ($\uparrow\downarrow$) и псевдospина ($\uparrow\uparrow$) показаны для дважды вырожденных состояний, которые расщепляются в присутствии внешнего электрического поля, направленного по оси z

Таблица 1. Численные коэффициенты слагаемых гамильтониана (1). Относительное смещение подрешеток при этом $\Delta_Z/\Delta_Z^{Si} = 0.51$

Коэффициент	$v, 10^5$ м/с	$v_\Delta, 10^5$ м/с	$\Delta_{so},$ мэВ
Сильная связь, $sp^3d^5s^*$	5.75	0.14	0.73

Выражение (1) было получено методом инвариантов с учетом того, что в выбранном базисе величины σ_x, σ_y преобразуются как x, y (по представлению Γ_6 так же, как k_x, k_y), а σ_z — по представлению Γ_2 . Матрицы Паули в спиновом базисе (\uparrow, \downarrow) преобразуются следующим образом: s_z по представлению Γ_2 , а s_x, s_y по представлению Γ_5 подобно $|\hat{x}\rangle, |\hat{y}\rangle$. Смещение подрешеток характеризуется параметром Δ_Z , который определяет сдвиг подрешеток A и B и меняется только при пространственной инверсии, что соответствует представлению Γ_3 группы D_{3h} . Подробности симметричного анализа представлены в Приложении А.

С помощью развитого в работе [1] метода сильной связи в базисе $sp^3d^5s^*$ с учетом одного ближайшего соседа были определены коэффициенты эффективного гамильтониана для случая смещения подрешеток $\Delta_Z = 0.44 \text{ \AA}$ ($\Delta_Z/\Delta_Z^{Si} = 0.51$), что соответствует теоретическому значению смещения,

полученному из первых принципов для свободной пленки силицена (табл. 1). Для этого было проведено сравнение энергетической дисперсии, получаемой из этого гамильтониана, и методом сильной связи исследованы средние проекции спина и псевдospина на оси координат в зависимости от угла между компонентами волнового вектора k и от модуля k [1]. Найденные значения качественно согласуются с величинами коэффициентов эффективного гамильтониана двуслойного графена из работы [10]. Таким же образом были найдены значения коэффициентов рассмотренных в следующих двух разделах слагаемых эффективного гамильтониана, возникающих при приложении электрического и магнитного полей (см. табл. 1). Подложка существенно влияет на смещение подрешеток в силицене. При увеличении смещения подрешеток фермиевская скорость v и величина запрещенной зоны в дираковской точке возрастают.

Отметим, что в работе [11] в эффективном гамильтониане приведено слагаемое (третье в выражении (1) цитируемой работы), не являющееся инвариантным по отношению к преобразованиям симметрии силицена и возникающее только при приложении электрического поля или при учете взаимодействия с подложкой. Эффективный гамильтониан, приведенный в работе [1] (где рассматривалась только одна долина в k -пространстве), кроме слагаемых из (1) содержал слагаемые, несимметричные относительно инверсии времени.

3. ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ, НАПРАВЛЕННОЕ ПЕРПЕНДИКУЛЯРНО ПЛОСКОСТИ СИЛИЦЕНА

Если силицен поместить во внешнее электрическое поле, направленное перпендикулярно плоскости силицена, то эффективный гамильтониан приобретает дополнительные слагаемые:

$$H_E = e\lambda_E E_z \Delta_Z s_z \tau_z + e\lambda'_E E_z \Delta_Z \sigma_z \mathbf{1}_\tau + e\lambda_R E_z (k_x s_y - k_y s_x) \mathbf{1}_\tau + e\lambda'_R E_z (\sigma_x s_y \tau_z - \sigma_y s_x \mathbf{1}_\tau), \quad (2)$$

где e — заряд электрона. В гамильтониане введены численные коэффициенты ($\lambda_E, \lambda'_E, \lambda_R, \lambda'_R$), значения которых приведены в табл. 2 для случая $\Delta_Z/\Delta_Z^{Si} = 0.51$.

Воздействие электрического поля определяется в основном вторым и четвертым слагаемыми в выражении (2) и заключается в поляризации псевдospина по оси z ; при этом спин «ложится» в плоскость

Таблица 2. Численные коэффициенты слагаемых гамильтониана, зависящих от электрического и магнитного полей. Относительное смещение подрешеток при этом $\Delta_Z/\Delta_Z^{\text{Si}} = 0.51$

Коэффициент	λ_E	λ'_E	$\lambda_R, \text{Å}^2$	$\lambda'_R, \text{Å}^2$	g^σ	g^s
Сильная связь, $sp^3d^5s^*$	$< 10^{-5}$	0.4	$< 10^{-4}$	$4.5 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	1

xy . Изменение направления спина происходит через взаимодействие с компонентами псевдospина (четвертое слагаемое в (2)), электрическое поле при этом одновременно поляризует псевдospин по оси z (второе слагаемое в (2)), уменьшая величину его компонент в плоскости xy и тем самым замедляя поворот спина при отдалении от точки K . В итоге при отклонении от дираковской точки, где спин определяется спин-орбитальным расщеплением и направлен строго по оси z , поляризация спина незначительно уменьшается и составляет около 99%, что соответствует расчетам из первых принципов [5].

4. МАГНИТНОЕ ПОЛЕ, НАПРАВЛЕННОЕ ПЕРПЕНДИКУЛЯРНО ПЛОСКОСТИ СИЛИЦЕНА

Если силицен поместить во внешнее магнитное поле B_z , перпендикулярное поверхности пленки, то в дополнение к чисто орбитальному действию магнитного поля, которое рассмотрено ниже, эффективный гамильтониан приобретает дополнительные слагаемые:

$$H_B = g^\sigma \mu_B B_z \sigma_z \tau_z + g^s \mu_B B_z s_z \mathbf{1}_\tau, \quad (3)$$

где μ_B — магнетон Бора, а коэффициенты гамильтониана g^σ и g^s приведены в табл. 2 для случая $\Delta_Z/\Delta_Z^{\text{Si}} = 0.51$. В выражении (3) в дираковской точке основную роль играет слагаемое, пропорциональное σ_z — компоненте псевдospина вдоль оси z . Однако влияние на спектр состояний этого слагаемого быстро становится малым при отклонении от дираковской точки из-за поляризации псевдospина в плоскости xy , так же как второго слагаемого в (1).

При рассмотрении орбитального движения в магнитном поле, перпендикулярном поверхности, будем использовать гамильтониан (1), в котором волновые векторы k_x и k_y заменены на дифференциальные операторы, действующие в плоскости xy . Зеемановскими слагаемыми (3) в меру малости магнетона Бора ($\mu_B \simeq 5.788 \cdot 10^{-5}$ эВ/Тл) в этом разделе пренебрегаем.

Для учета магнитного поля надо сделать замену волнового вектора с учетом векторного потенциала \mathbf{A} (заряд электрона e определяем как положительное число),

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}. \quad (4)$$

Решение без поправки v_Δ к скорости Ферми можно получить в явном виде в базисе волновых функций частицы с зарядом e в постоянном магнитном поле (см. Приложение В). Нетрудно показать, что для спина вверх(вниз) будет одно решение с энергией $-\Delta_{so}$ ($+\Delta_{so}$). Остальные решения будут двукратно вырождены по спину с энергией (здесь номер уровня $N > 0$)

$$E = \pm \sqrt{\hbar^2 \omega_c^2 N + \Delta_{so}^2}, \quad (5)$$

где $\hbar \omega_c$ — характерная энергия¹⁾,

$$\hbar \omega_c = \frac{\hbar v \sqrt{2}}{\ell_B} = v \sqrt{\frac{2\hbar e}{c} B}, \quad (6)$$

где ℓ_B — магнитная длина.

Поправки к гамильтониану, пропорциональные v_Δ , малы. Подробности анализа приведены в Приложении В.

Решения для второй долины, K' , аналогичны решениям для долины K . Схема уровней в квантующем магнитном поле и вид волновых функций приведены на рис. 3.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на основе симметричного анализа получен эффективный гамильтониан в присутствии внешних электрического и магнитного полей, направленных перпендикулярно плоскости силицена. На основе метода сильной связи с учетом одного ближайшего соседа и орбиталей $sp^3d^5s^*$, развитого в работе [1], определены константы в выражении для эффективного гамильтониана. Рассмотрены вопросы поляризации спина и псевдospина под действием внешних электрического и магнитных полей. Полученный из соображений симметрии гамильтониан

¹⁾ Если поле измеряется в теслах и скорость $v \simeq 5.23 \times 10^7$ см/с, то $\hbar \omega_c \simeq 19$ мэВ $\cdot \sqrt{B[\text{Тл}]}$.

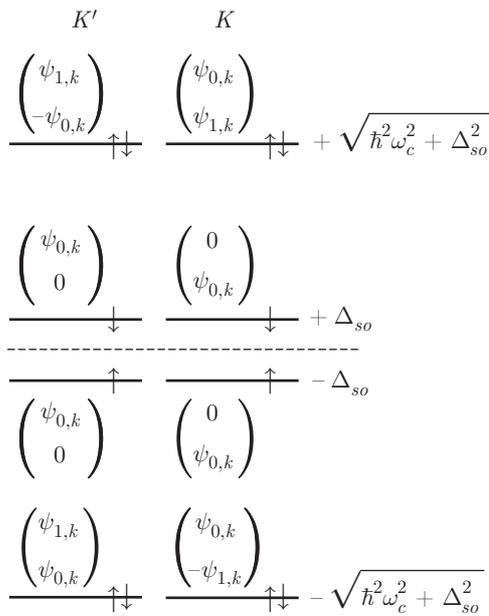


Рис. 3. Схема уровней в сильном магнитном поле с учетом квантования Ландау. Базисные функции определены в Приложении В. Волновые функции написаны без учета спин-орбитального расщепления Δ_{so} ; при учете Δ_{so} вид волновых функций более сложный, см. Приложение В

позволил проанализировать влияние смещения подрешеток на ориентации спина и псевдоспина в силицене.

Полученные результаты качественно согласуются с результатами работы [12], в которой эффективный гамильтониан в присутствии электрического и магнитного полей был получен на основе метода сильной связи с учетом только π -орбиталей и взаимодействия с двумя ближайшими соседями. Известно, что такой подход недостаточен для нахождения энергетической структуры объемного кремния, с другой стороны, он плохо согласуется с результатами расчетов из первых принципов для силицена [13]. Отметим, что роль смещения в работе [4] не была детально рассмотрена. В частности, величина λ_{R2} в формуле (1) цитируемой работы должна зависеть от смещения подрешеток силицена.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 16-02-00337, 15-02-09034).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Симметричный анализ

Смещением подрешеток Δ_Z будем называть вектор, направленный от одной подрешетки к другой перпендикулярно плоскости структуры и равный по модулю смещению подрешеток. Величина Δ_Z меняет знак при отражениях σ_v (относительно плоскости xz) и σ_h (относительно плоскости xy) и неизменен при поворотах C_3 , что соответствует представлению Γ_3 . Величину Δ_Z удобно рассматривать как дополнительный оператор, описывающий возмущение идеальной двумерной гексагональной структуры из атомов кремния с симметрией D_{3h} и преобразующийся по представлению Γ_3 группы D_{3h} (в статье используются обозначения из работы [8]).

Циклическому базису

$$|\pm\rangle = \left(-\frac{x+iy}{\sqrt{2}}, \frac{x-iy}{\sqrt{2}} \right)$$

(x, y — декартовы координаты) соответствует представлению Γ_6 группы D_{3h} :

$$\begin{aligned} D_{\Gamma_6}(C_3) &= \begin{pmatrix} e^{-2\pi i/3} & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/3} \end{pmatrix}, \\ D_{\Gamma_6}(\sigma_v) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ D_{\Gamma_6}(\sigma_h) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{7}$$

где C_3 — поворот против часовой стрелки относительно оси z .

Для описания двукратно вырожденных блоховских функций в точке Дирака K зоны Бриллюэна силицена необходимо дополнительно ввести операторы псевдоспина. В случае отсутствия смещения подрешеток эти состояния преобразуются по неприводимому представлению Γ_5 группы D_{3h} . Блоховские функции

$$|\tilde{\mp}\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |\tilde{x} \mp i\tilde{y}\rangle$$

(функции $|\tilde{x}\rangle$ и $|\tilde{y}\rangle$ преобразуются аналогично координатным функциям $|x\rangle$ и $|y\rangle$, но не меняют знака при инверсии координат) соответствуют состояниям в подрешетках A, B для долины K и в подрешетках B, A в долине K' [9] и преобразуются по представлению Γ_5 . Вслед за [9] мы выбираем базисные функции во второй долине так, чтобы матрица оператора отражения относительно плоскости yz , переводящего долину K в K' , была единичной матрицей. Это

соответствует последовательности базисных функций AK, BK, AK', BK' или $\rho_-K, \rho_+K, \rho_+K', \rho_-K'$. Комбинации матриц Паули

$$\sigma_+ = -\frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2}, \quad \sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2}$$

в пространстве псевдоспина с базисом $|\tilde{\uparrow}\rangle$ преобразуются так же, как с базисом $|\pm\rangle$.

Циклические комбинации матриц Паули в пространстве спина $\{\uparrow\downarrow\}$

$$s_+ = -(s_x + is_y), \quad s_- = s_x - is_y$$

преобразуются как $|\tilde{\pm}\rangle$:

$$\begin{aligned} D_{\Gamma_5}(C_3) &= D_{\Gamma_6}(C_3), \\ D_{\Gamma_5}(\sigma_v) &= -D_{\Gamma_6}(\sigma_v), \\ D_{\Gamma_5}(\sigma_h) &= -D_{\Gamma_6}(\sigma_h). \end{aligned} \quad (8)$$

А.1. Инварианты

Для вывода выражений нам удобнее использовать циклический базис, однако для итоговых выражений предпочтительнее декартов базис. Легко показать, что $A_x B_x + A_y B_y$ преобразуется по представлению Γ_1 (является инвариантом), а $A_x \tilde{B}_x + A_y \tilde{B}_y$ — по представлению Γ_3 . Здесь A_x, A_y, B_x, B_y — компоненты операторов в декартовом базисе $|x\rangle, |y\rangle$, \tilde{B}_x, \tilde{B}_y — компоненты оператора, преобразующиеся как $|\tilde{x}\rangle, |\tilde{y}\rangle$. Аналогично, можно достаточно тривиально показать, что $A_x B_y - A_y B_x$ преобразуется по представлению Γ_2 , а $A_x \tilde{B}_y - A_y \tilde{B}_x$ — по Γ_4 . Пара $\{-A_x B_x + A_y B_y, A_x B_y + A_y B_x\}$ преобразуется по представлению Γ_6 , так же как $\{x, y\}$.

Используя правила умножения неприводимых представлений для группы D_{3h} , можно показать, что инвариантными относительно точечной симметрии являются следующие комбинации, линейные по σ, k, s :

$$\begin{aligned} &\sigma_x k_x + \sigma_y k_y, \\ &s_z(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \\ &\sigma_x(k_x^2 - k_y^2) - 2k_x k_y \sigma_y, \\ &s_z \sigma_z, \\ &\Delta_Z(\sigma_x s_x + \sigma_y s_y), \\ &\Delta_Z(k_x s_x + k_y s_y), \\ &\Delta_Z \sigma_z(k_x s_y - k_y s_x). \end{aligned} \quad (9)$$

А.2. Симметрия относительно обращения времени

Пусть преобразование g — преобразование симметрии силицена из группы D_{3h} , переводящее волновую функцию в точке K в точку K' . Тогда

$$\psi_{K'}(r) = D(g)\psi_K(R^{-1}r), \quad (10)$$

где $D(g)$ — матричное представление g , R — отражение относительно плоскости yz .

Волновая функция и сопряженная ей функция линейно зависимы,

$$\psi_K^* = T\psi_{K'}, \quad (11)$$

где T — оператор, переводящий волновые функции из одной долины в другую. Из выражений (10) и (11) получаем

$$\psi_K^* = TD(g)\psi_K. \quad (12)$$

Из инвариантности гамильтониана относительно инверсии времени ($H^*(\kappa) = H^t(\kappa)$) и (9) следует, что

$$T^{-1}H(R^{-1}\kappa)T = H^t(-\kappa), \quad (13)$$

где $\kappa = (s_x, s_y, s_z, k_x, k_y)$. Если выбрать в качестве преобразования отражение R относительно плоскости yz , переводящее долины силицена друг в друга, то $D(R) = \mathbf{1}_\sigma$, следовательно $T = \mathbf{1}_\sigma$, и

$$\begin{aligned} R^{-1}\mathbf{k} &= R^{-1}(k_x, k_y) = (-k_x, k_y), \\ R^{-1}\hat{s} &= R^{-1}(s_x, s_y, s_z) = (s_x, -s_y, -s_z). \end{aligned} \quad (14)$$

При инверсии времени имеем $\kappa \rightarrow -\kappa$ и $\Delta_Z \rightarrow \rightarrow \Delta_Z$. При транспонировании оператора псевдоспина получаем $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \rightarrow (\sigma_x, -\sigma_y, \sigma_z)$. При отражении R относительно плоскости yz вектор смещения подрешеток также остается неизменным, $\Delta_Z \rightarrow \Delta_Z$. Таким образом, по правилу (10) можно отобразить инварианты, симметричные (отмечены знаком «+») и несимметричные (со знаком «-») по отношению к инверсии времени:

$$\begin{aligned} + : &\sigma_x k_x + \sigma_y k_y, \\ - : &s_z(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \\ + : &\sigma_x(k_x^2 - k_y^2) - 2k_x k_y \sigma_y, \\ + : &s_z \sigma_z, \\ - : &\Delta_Z(\sigma_x s_x + \sigma_y s_y), \\ - : &\Delta_Z(k_x s_x + k_y s_y), \\ + : &\Delta_Z \sigma_z(k_x s_y - k_y s_x). \end{aligned} \quad (15)$$

А.3. Магнитное и электрическое поля

Магнитное B_z и электрическое E_z поля, направленные по оси z , преобразуются соответственно по представлениям Γ_2 и Γ_4 . Ниже приведены инварианты, включающие в себя B_z и E_z (знаками «+»/«-» помечены элементы, симметричные/несимметричные относительно инверсии времени):

$$\begin{aligned}
 &+ : \sigma_z E_z \Delta_Z (\Gamma_2 \otimes \Gamma_3 \otimes \Gamma_4), \\
 &+ : s_z E_z \Delta_Z (\Gamma_2 \otimes \Gamma_3 \otimes \Gamma_4), \\
 &- : \sigma_z E_z (k_x s_x + k_y s_y) (\Gamma_2 \otimes \Gamma_4 \otimes \Gamma_3), \\
 &+ : E_z (k_x s_y - k_y s_x) (\Gamma_2 \otimes \Gamma_6 \otimes \Gamma_5), \\
 &+ : E_z (\sigma_x s_y - \sigma_y s_x) (\Gamma_2 \otimes \Gamma_6 \otimes \Gamma_5), \\
 &+ : B_z \sigma_z (\Gamma_2 \otimes \Gamma_2), \\
 &+ : B_z s_z (\Gamma_2 \otimes \Gamma_2), \\
 &- : B_z (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) (\Gamma_2 \otimes \Gamma_6 \otimes \Gamma_6).
 \end{aligned} \tag{16}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Движение в магнитом поле, направленном перпендикулярно плоскости силицена

Полученный результат аналогичен приведенному в работе [10] для графена.

Ниже будем пользоваться магнитной длиной²⁾

$$\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$$

и характерной энергией³⁾

$$\hbar\omega_c = \frac{\hbar v\sqrt{2}}{\ell_B}.$$

Проведем замену волнового вектора (4) и выберем векторный потенциал \mathbf{A} в калибровке Ландау:

$$\mathbf{A} = B(-y, 0).$$

В этой калибровке удобно выбрать базисные функции в виде

$$\begin{aligned}
 \psi_{N,k} = & \frac{1}{\sqrt{\ell_B} \sqrt{2^N N!} \sqrt{\pi}} \exp \left[ikx - \frac{(\ell_B^2 k - y)^2}{2\ell_B^2} \right] \times \\
 & \times H_N \left(\frac{\ell_B^2 k - y}{\ell_B} \right), \tag{17}
 \end{aligned}$$

²⁾ Если магнитное поле измеряется в теслах, то магнитная длина $\ell_B \simeq 26 \text{ нм} / \sqrt{B[\text{Тл}]}$.

³⁾ См. сноску 1.

где H_N — функции Эрмита. Тогда несложно проверить, что операторы рождения и уничтожения, определенные соответственно как

$$\begin{aligned}
 a_- &= \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} (k_x - ik_y) = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{\ell_B^2} y - \frac{\partial}{\partial y} \right), \\
 a_+ &= \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} (k_x + ik_y) = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{\ell_B^2} y + \frac{\partial}{\partial y} \right),
 \end{aligned} \tag{18}$$

действуют на функции (17), меняя на единицу номер функции:

$$\begin{aligned}
 a_- \psi_{N,k} &= \sqrt{N} \psi_{N-1,k}, \\
 a_+ \psi_{N-1,k} &= \sqrt{N} \psi_{N,k}.
 \end{aligned} \tag{19}$$

Для вывода соотношений (18), (19) необходимо использовать определение эрмитовых функций и их свойства:

$$\begin{aligned}
 H_N(\xi) &= (-1)^N e^{\xi^2} \frac{d^N}{d\xi^N} e^{-\xi^2}, \\
 H'_N(\xi) &= 2N H_{N-1}(\xi), \\
 H_{N+1}(\xi) &= 2\xi H_N(\xi) - 2N H_{N-1}(\xi).
 \end{aligned}$$

В.1. Одна долина в магнитном поле

Сначала решим задачу для спектра силицена в магнитном поле в одной долине. В долине K гамильтониан (1) выглядит как

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \hbar v \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + \Delta_{so} \sigma_z s_z + \mu_B s_z B + \\
 & + \hbar v \Delta \frac{\Delta_z}{\Delta s_i^2} \sigma_z (k_x s_y - k_y s_x). \tag{20}
 \end{aligned}$$

Зеемановскими поправками пренебрегаем, так как $\mu_B \simeq 5.788 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/Тл}$.

Решение без поправки $v\Delta$ к скорости Ферми можно получить в явном виде. Перепишем гамильтониан (20), выкинув слагаемые, пропорциональные $v\Delta$ и μ , используя ранее определенные операторы рождения и уничтожения (18) в базисе $\{\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow\}$, где мы для краткости обозначили ρ_- как \uparrow , ρ_+ как \downarrow , а \uparrow, \downarrow — базисные спиноры.

В таком базисе гамильтониан (20) принимает вид

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{v,\Delta_{so}} = & \hbar\omega_c \begin{pmatrix} 0 & a_- & 0 & 0 \\ a_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_- \\ 0 & 0 & a_+ & 0 \end{pmatrix} + \\
 & + \Delta_{so} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{21}
 \end{aligned}$$

Таблица 3

	0 ↑↑	0 ↓↑	0 ↑↓	0 ↓↓	1 ↑↑	1 ↓↑	1 ↑↓	1 ↓↓	2 ↑↑	2 ↓↑	2 ↑↓	2 ↓↓	...
0 ↑↑	Δ_{so}	0	0	0	0	$\hbar\omega_c$	$-i\hbar\omega_\Delta$	0	0	0	0	0	...
0 ↓↑	0	$-\Delta_{so}$	0	0	0	0	0	$i\hbar\omega_\Delta$	0	0	0	0	...
0 ↑↓	0	0	$-\Delta_{so}$	0	0	0	0	$\hbar\omega_c$	0	0	0	0	...
0 ↓↓	0	0	0	Δ_{so}	0	0	0	0	0	0	0	0	...
1 ↑↑	0	0	0	0	Δ_{so}	0	0	0	0	$\hbar\omega_c\sqrt{2}$	$-i\hbar\omega_\Delta\sqrt{2}$	0	...
1 ↓↑	$\hbar\omega_c$	0	0	0	0	$-\Delta_{so}$	0	0	0	0	0	$i\hbar\omega_\Delta\sqrt{2}$...
1 ↑↓	$i\hbar\omega_\Delta$	0	0	0	0	0	$-\Delta_{so}$	0	0	0	0	$\hbar\omega_c\sqrt{2}$...
1 ↓↓	0	$-i\hbar\omega_\Delta$	$\hbar\omega_c$	0	0	0	0	Δ_{so}	0	0	0	0	...
2 ↑↑	0	0	0	0	0	0	0	0	Δ_{so}	0	0	0	...
2 ↓↑	0	0	0	0	$\hbar\omega_c\sqrt{2}$	0	0	0	0	$-\Delta_{so}$	0	0	...
2 ↑↓	0	0	0	0	$i\hbar\omega_\Delta\sqrt{2}$	0	0	0	0	0	$-\Delta_{so}$	0	...
2 ↓↓	0	0	0	0	0	$-i\hbar\omega_\Delta\sqrt{2}$	$\hbar\omega_c\sqrt{2}$	0	0	0	0	Δ_{so}	...
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Очевидно, что блоки со спином вверх и ω спином вниз в гамильтониане не зацепляются. Решение можно искать в виде

$$\begin{pmatrix} \alpha\psi_{N-1,k} \\ \beta\psi_{N,k} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Отдельно надо добавить решение, соответствующее $N = 0$:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{0,k} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Нетрудно показать, что для спина вверх выражение (23) является решением с энергией $-\Delta_{so}$. Решения с $N > 0$ обладают энергией

$$E = \pm\sqrt{\hbar^2\omega_c^2N + \Delta_{so}^2}. \quad (24)$$

Для положительной энергии собственные векторы имеют вид (опускаем нормировочный множитель)

$$\begin{pmatrix} \left(\sqrt{1 + \frac{\Delta_{so}^2}{\hbar^2\omega_c^2N}} - \frac{\Delta_{so}}{\hbar\omega_c\sqrt{N}} \right) \psi_{N-1,k} \\ \psi_{N,k} \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Для отрицательной энергии (приближенное выражение получено в предположении $\Delta_{so} \ll \hbar\omega_c$) имеем

$$\begin{pmatrix} \psi_{N-1,k} \\ - \left(\sqrt{1 + \frac{\Delta_{so}^2}{\hbar^2\omega_c^2N}} - \frac{\Delta_{so}}{\hbar\omega_c\sqrt{N}} \right) \psi_{N,k} \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Решения для состояний со спином вниз (\downarrow) аналогичны, только энергия нулевого уровня равна $+\Delta_{so}$ и в выражениях (25), (26) для собственных векторов нужно поменять знак перед Δ_{so} .

Если добавить слагаемое, пропорциональное v_Δ , решение усложняется. Остановимся на выписывании бесконечной матрицы, собственные векторы которой дают решение задачи об уровнях в магнитном поле. Выражение

$$\hbar v_\Delta \sigma_z (k_x s_y - k_y s_x)$$

надо переписать через операторы рождения и уничтожения:

$$\mathcal{H}_{v_\Delta} = \hbar\omega_\Delta \begin{pmatrix} 0 & 0 & -ia_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ia_- \\ ia_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -ia_+ & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

где мы обозначили $\hbar\omega_\Delta = \hbar v_\Delta \sqrt{2}/\ell_B$.

Поскольку слагаемое (27) смешивает между собой как разные спины, так и состояния, которые без него обладают положительной и отрицательной энергией, переписывать его в базисе решения гамильтониана (21) бессмысленно. Выпишем его в базисе $\{\psi_N\} \otimes \{\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow\}$. Для краткости обозначим $\psi_{N,k} \uparrow\uparrow \equiv N \uparrow\uparrow$ и т.п. В таком базисе матрица гамильтониана приведена в табл. 3. Нетрудно заметить, что энергия нулевых уровней не меняется, но к спину вверх (вниз) примешивается спин вниз

(вверх), а уровни, начиная с первого, немного сдвигаются без расщепления.

В.2. Долина K'

Гамильтониан во второй долине

$$\mathcal{H}_{v,\Delta_{so}}^{K'}(\mathbf{k}) = \hbar v(-\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) - \Delta_{so}\sigma_z s_z$$

перепишем через операторы рождения и уничтожения (18):

$$\mathcal{H}_{v,\Delta_{so}}^{K'} = \hbar\omega_c \begin{pmatrix} 0 & -a_+ & 0 & 0 \\ -a_- & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -a_+ \\ 0 & 0 & -a_- & 0 \end{pmatrix} + \Delta_{so} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Схема решения такая же, как для долины K , но 1) из-за выбора базиса в пространстве псевдоспина надо поменять первую и вторую компоненту в решении и 2) из-за общего знака надо поменять местами решения из валентной зоны с решениями из зоны проводимости.

Поправка от слагаемого, пропорционального v_Δ , не изменится.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. В. Герт, М. О. Нестоклон, И. Н. Ясиевич, ЖЭТФ **148**, 133 (2015).
2. U. Röthlisberger, W. Andreoni, and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **72**, 665 (1994).
3. A. Kara, H. Enriquez, and A. P. Seitsonen et al., Surf. Sci. Rep. **67**, 1 (2012).
4. M. Ezawa, J. Phys. Soc. Jpn **81**, 104713 (2012).
5. W.-F. Tsai, C.-Y. Huang, T.-R. Chang et al., Nature Comm. **4**, 1500 (2013).
6. Li Tao, E. Cinquanta, and D. Chiappe et al., Nature Nanotechn. **10**, 227 (2015).
7. Rainer Friedlein and Yukiko Yamada-Takamura, J. Phys.: Condens. Matter **27**, 203201 (2015).
8. G. F. Koster, *Properties of the Thirty-two Point Groups*, MIT Press, Cambridge (1963).
9. R. Winkler and U. Zülicke, Phys. Rev. B **82**, 245313 (2010).
10. R. Winkler and U. Zülicke, Phys. Rev. B **91**, 205312 (2015).
11. L. Wang and G.-B. Zhu, Chinese Phys. B **23**, 098503 (2014).
12. M. Ezawa, Phys. Rev. Lett. **109**, 055502 (2012).
13. C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, Phys. Rev. Lett. **107**, 076802 (2011).