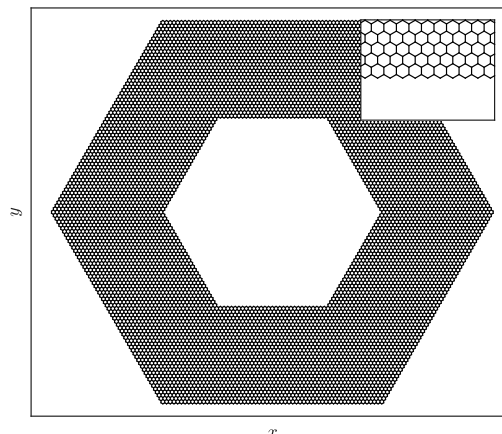


# Šestougaooni silicenski nanoprsten sa cik-cak ivicama u normalnom magnetskom polju

Dušan Jakovljević, Marko Grujić, Milan Tadić

**Apstrakt**—Silicen je blago neplanarni sačasti monosloj atoma silicijuma, koji je topološki izolator zbog sopstvene spin-orbitne interakcije (SOI). Na ivicama silicenskih nanotraka javlja se kvantni spinski Holov (KSH) efekat, tj. javljaju se spiralna ivična stanja. Koristeći Kejn-Melijev model računali smo elektronsku strukturu šestougaoonog silicenskog nanoprstena sa cik-cak ivicama koji se nalazi u normalnom magnetskom polju. Rezultati uključuju zavisnost energijskog spektra od magnetskog polja, raspodele svojstvenih stanja elektrona spina gore i spina dole i gustinu struje verovatnoće (GSV) tih stanja. Pokazali smo da na spoljašnjoj i unutrašnjoj ivici nanoprstena postoji KSH stanje. Spiralna ivična stanja se mogu kvalitativno objasniti klasičnim modelom magnetskog dipola u magnetskom polju.

**Ključne reči**— silicen; spin-orbitna interakcija; nanoprstenovi; kvantni spinski Holov efekat; spiralna ivična stanja.



Sl. 1. Šestougaooni silicenski nanoprsten sa cik-cak ivicama. Detalj unutrašnje cik-cak ivice prikazan je u gornjem desnom uglu.

## I. UVOD

Silicen je dvodimenzionalni monosloj atoma silicijuma, sličan grafenu [1]. Sačasta rešetka silicena nije planarna, već slabo neplanarna (engl. *low-buckled*) zbog čega silicen poseduje značajnu sopstvenu spin-orbitnu interakciju (SOI). Zbog SOI silicen je kvantni spinski Holov (KSH) izolator [2], ili drugačije, dvodimenzionalni vremenski invarijantni topološki izolator [3, 4]. Elektronska struktura beskonačnog monosloja poseduje energijski procep, ali se u elektronskoj strukturi nanotraka u procepu javljaju provodna stanja sa linearnom disperzijom, koja su prostorno lokalizovana na ivicama nanotrake. Dva kontrapropagirajuća moda na svakoj od ivica pripadaju suprotnim spinovima, pa se ovakva stanja nazivaju spiralna ivična stanja (engl. *helical edge states*) i karakterišu se  $\mathbb{Z}_2$  topološkom invarijantom [5, 6].

Koristeći formalizam topološke teorije, nemoguće je izračunati topološku invarijantu za nulto-dimenzionu nanostrukturu, pošto struktura nema definisanu Brillouinovu zonu [7]. Međutim, ukoliko su dimenzije nanodiska ili nanoprstena dovoljno velike, struktura sa zatvorenim ivicama mora da poseduje stanja karakteristična za topološki netrivialnu fazu [7, 8, 9].

Dušan Jakovljević – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: [jakovljevic@etf.bg.ac.rs](mailto:jakovljevic@etf.bg.ac.rs)).

Marko Grujić – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: [marko.grujic@etf.bg.ac.rs](mailto:marko.grujic@etf.bg.ac.rs)).

Milan Tadić – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: [tadic@etf.bg.ac.rs](mailto:tadic@etf.bg.ac.rs)).

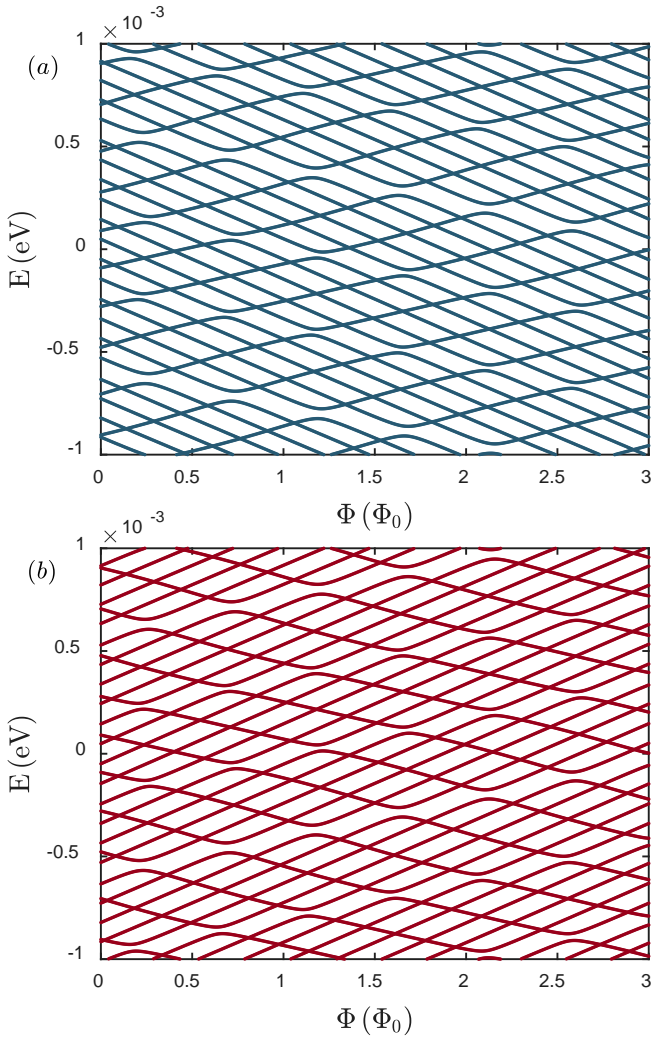
U ovom radu, primenom Kejn-Melijevog modela [5, 6] računali smo elektronsku strukturu šestougaoonog silicenskog nanoprstena sa cik-cak ivicama prikazanog na Sl. 1, koji se nalazi u normalnom magnetskom polju. Dužina stranica spoljašnjeg šestougaoonika nanoprstena izražena u broju sačastih ćelija duž stranice je 60, a dužina stranica šestougaoonog otvora prstena je 30. Koristeći klasičan model magnetskih dipola, na osnovu raspodela stanja i gustine struje verovatnoće (GSV), pokazali smo da stanja elektrona spina gore i spina dole kontrapropagiraju oko spoljašnje i unutrašnje ivice nanoprstena, tj. da se u strukturi javlja KSH efekat.

## II. MODEL

Za računanje elektronske strukture nanoprstena koristili smo Kejn-Melijev model. Hamiltonijan modela zapisan u formi druge kvantizacije dat je izrazom [9]:

$$H = -t \sum_{\langle n,m \rangle} e^{i\varphi_{nm}} c_n^\dagger c_m + i \frac{s \Delta_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle n,m \rangle\rangle} v_{nm} e^{i\varphi_{nm}} c_n^\dagger c_m. \quad (1)$$

Prvi član hamiltonijana predstavlja skakanje elektrona između  $p_z$  orbitala najbližih suseda, a ujedno je to i hamiltonijan metoda jake veze za grafen. Drugi član predstavlja sopstvenu spin-orbitnu interakciju, modelovanu skokovima između drugih najbližih suseda. Spinski kvantni broj ima vrednosti  $s = 1$ , za elektrone spina gore i  $s = -1$  za elektrone spina dole, dok se parametar  $v_{nm}$  odnosi na smer skoka elektrona i ima



Sl. 2. Zavisnost energijskih nivoa silicenskog nanoprstena sa cik-cak ivicama od magnetskog fluksa za: (a) elektrone spina gore i (b) elektrone spina dole.

vrednosti  $+1$  i  $-1$ , ako elektron skreće desno ili levo pri skoku sa atomskog mesta  $m$  na mesto  $n$ . Pajerlsova faza [9]

$$\varphi_{nm} = -\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_m}^{\mathbf{r}_n} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}, \quad (2)$$

je dodatna faza elektrona pri skokovima u magnetskom polju  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ , čiji je magnetski vektor potencijal  $\mathbf{A} = Bx\mathbf{e}_y$ . Numeričkom dijagonalizacijom hamiltonijana (1) za svaku vrednost magnetskog polja dobijaju se svojstvene vrednosti energije i svojstveni vektori. Parametri skokova korišćeni u proračunima su  $t = 1.6$  eV i  $\Delta_{SO} = 3.9$  meV, a konstanta rešetke silicena je  $a = 0.386$  nm [10].

Za računanje GSV  $j$  koristili smo model adaptiran iz [11] i [12]. GSV je definisana u skladu sa jednačinom kontinuiteta i njena  $x$  i  $y$  komponenta na atomskom mestu  $m$  date su kao

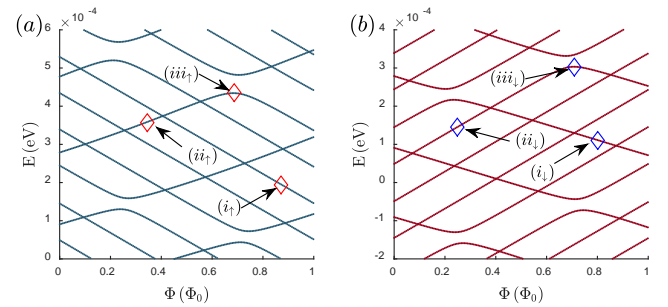
$$j_{x(y)}(m) = \sum_m \frac{2d_{x(y)}}{\hbar} \text{Im}[C_n^* C_m H_{nm}], \quad (3)$$

gde je  $C_{n(m)}$  koeficijent svojstvenog vektora povezan sa atomskim mestom  $n(m)$  čije su koordinate  $(x_{n(m)}, y_{n(m)})$ ,  $n$  prolazi kroz sve najbliže (tri) i druge najbliže susede (šest), a  $d_x = x_n - x_m$  i  $d_y = y_n - y_m$  su rastojanja između atomskih mesta  $n$  i  $m$  duž  $x$  i  $y$  pravaca.

### III. SPEKTAR ZA ELEKTRONE SPINA GORE I SPINA DOLE

Zavisnost energijskih nivoa elektrona spina gore i elektrona spina dole od magnetskog fluksa kroz otvor u nanoprstenu prikazana je na Sl. 2. Vrednost fluksa izražena je u kvantima magnetskog fluksa,  $\Phi_0 = h/e$ . Prikazani su energijski nivoi unutar spin-orbitnog procepa ( $-\Delta_{SO} \leq E \leq \Delta_{SO}$ ) oko Fermijeve energije  $E_F = 0$  eV. Spinska degeneracija je uklonjena, i zbog SOI spin gore i spin dole drugačije interaguju sa magnetskim poljem. Poredeći ove spektre sa rezultatima dobijenim za grafenske nanoprsteneve, čija je elektronska struktura modelovana samo prvim članom hamiltonijana (1), možemo da uočimo da se sada unutar spin-orbitnog procepa javlja veliki broj energijskih nivoa. Izvan spin-orbitnog procepa,  $|E| > \Delta_{SO}$ , energijski nivoi izgledaju kao dvostruko degenerisani nivoi grafenskog šestougaoanog nanoprstena (videti [12] i [13]), odnosno grupisani su u podzone od šest nivoa usled šestostroke rotacione simetrije strukture. Ta stanja ovde nećemo razmatrati. Nivoi od interesa su oni unutar procepa, koji su takođe grupisani u podzone od šest nivoa, definisane tačkama neukrštanja dva nivoa (engl. *anticrossing*).

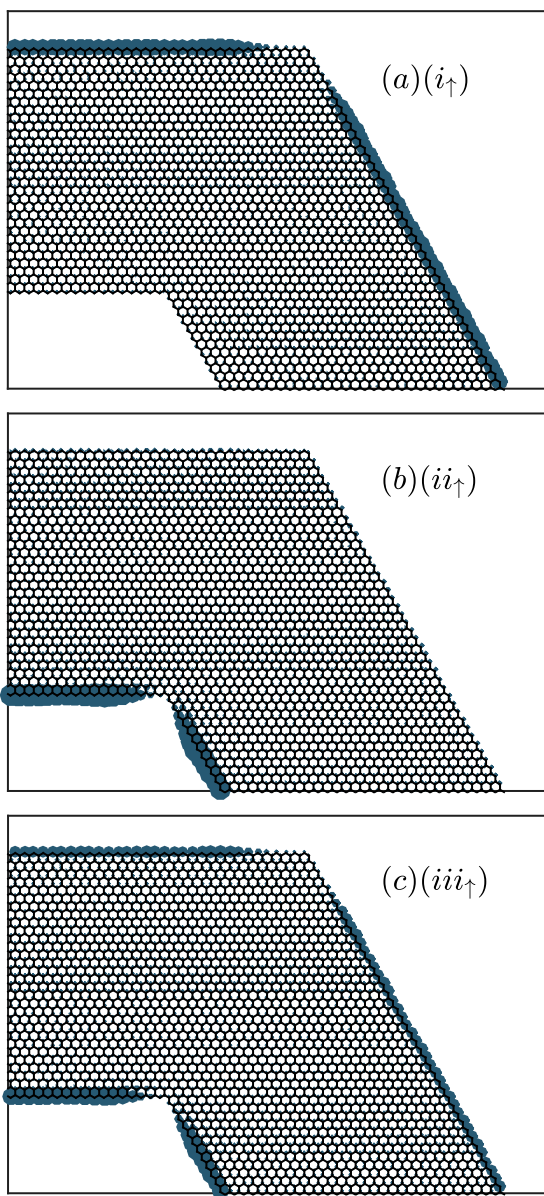
### IV. RASPODELA SVOJSTVENIH STANJA SPINA GORE I SPINA DOLE



Sl. 3. (a) Deo spektra sa Sl. 2(a), strelicama i simbolima su označena odabrana karakteristična stanja elektrona spina gore. (b) Isto, za deo spektra sa Sl. 2(b) i elektrone spina dole.

Referenca [13] pokazuje da su stanja grafenskih nanoprstena čija energija opada sa magnetskim poljem lokalizovana na spoljašnjoj ivici nanoprstena, dok su stanja čija energija raste sa magnetskim poljem lokalizovana na unutrašnjoj ivici. Stanje u tački neukrštanja dva nivoa odgovara sprezanju spoljašnje i unutrašnje ivice nanoprstena i ima raspodelu na obe ivice. Mapiranjem prostorne raspodele u ravni prstena odabranih karakterističnih svojstvenih stanja, pokazali smo da isto važi za stanja spina gore u silicenskom nanoprstenu. Deo spektra sa Sl. 2(a) sa odabranim stanjima označenim sa  $(i_\uparrow)$ ,  $(ii_\uparrow)$  i  $(iii_\uparrow)$  prikazan je na Sl. 3(a). Ovde je  $(i_\uparrow)$  stanje čija energija opada zajedno sa fluksom, stanje  $(ii_\uparrow)$  ima energiju koja raste sa fluksom, a stanje  $(iii_\uparrow)$  je na neukrštanju dva nivoa.

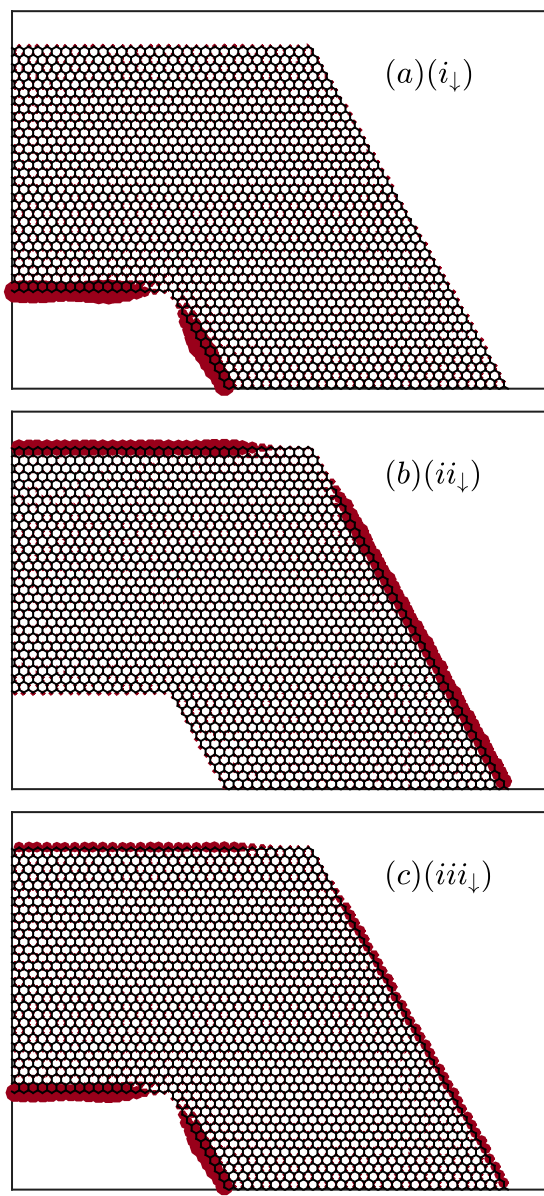
Raspodela stanja označenog sa  $(i_\uparrow)$  prikazana je na Sl. 4(a).



Sl. 4. (a) Raspodela stanja spina gore označenog sa  $(i_{\uparrow})$  na Sl. 3(a). Zbog jednostavnosti prikazan je samo deo raspodele u okolini ugla nanoprstena. (b) Isto kao pod (a), za stanje označeno sa  $(ii_{\uparrow})$  na Sl. 3(a). (c) Isto kao pod (a) i (b) za stanje označeno sa  $(iii_{\uparrow})$  na Sl. 3(a).

Radi jednostavnosti raspodela je prikazana samo na delu nanoprstena u okolini njegovog ugla. Veličina krugova na atomskim mestima proporcionalna je verovatnoći. Jasno se uočava da je stanje lokalizovano na spoljašnjoj ivici nanoprstena. Raspodela svojstvenog stanja označenog sa  $(ii_{\uparrow})$  prikazana je na Sl. 4(b) i ovo stanje lokalizovano je na unutrašnjoj ivici nanoprstena. Stanje označeno sa  $(iii_{\uparrow})$  koje odgovara neukrštanju, ima raspodelu prikazanu na Sl. 4(c), koja je lokalizovana i na spoljašnjoj i na unutrašnjoj ivici nanoprstena.

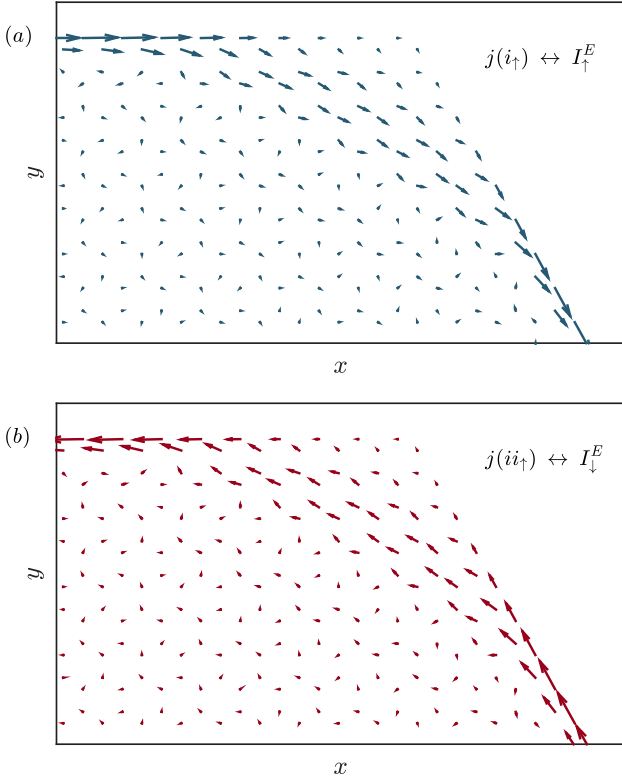
Raspodele prikazane na Sl. 4 mogu se interpretirati klasičnim modelom magnetskog dipola u magnetskom polju. Energija dipola data je kao  $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ , gde je  $\boldsymbol{\mu}$  magnetski moment dipola. Ako je  $\partial E / \partial B < 0$ , magnetski moment i magnetsko polje su istog smera, što znači da struja dipola



Sl. 5. (a) Raspodela stanja spina dole označenog sa  $(i_{\downarrow})$  na Sl. 3(b). Zbog jednostavnosti prikazan je samo deo raspodele u okolini ugla nanoprstena. (b) Isto kao pod (a), za stanje označeno sa  $(ii_{\downarrow})$  na Sl. 3(b). (c) Isto kao pod (a) i (b) za stanje označeno sa  $(iii_{\downarrow})$  na Sl. 3(b).

kruži suprotno smeru kazaljke na satu. Sa druge strane, ako je  $\partial E / \partial B > 0$ , magnetsko polje i dipol su suprotnih smerova, prema tome struja dipola kruži u smeru kazaljke. Na osnovu ovog razmatranja možemo da zaključimo da ako energija opada, elektroni spina gore formiraju struju  $I_{\uparrow}^E$  koja kruži po spoljašnjoj ivici nanoprstena suprotno smeru kazaljke na satu. Ako energija raste, struja  $I_{\uparrow}^I$  na unutrašnjoj ivici nanoprstena kruži u smeru kazaljke. Stanje  $(iii_{\uparrow})$  predstavlja hibridizaciju navedena dva slučaja, sa strujama suprotnih smerova na spoljašnjoj i unutrašnjoj ivici.

Odabrana stanja elektrona spina dole označena sa  $(i_{\downarrow})$ ,  $(ii_{\downarrow})$  i  $(iii_{\downarrow})$  prikazana su na Sl. 3(b), a njihove raspodele na Sl. 5. Raspodela stanja  $(i_{\downarrow})$  prikazana na Sl. 5(a) lokalizovana je na unutrašnjoj ivici nanoprstena, što znači da struja  $I_{\downarrow}^I$  kruži suprotno smeru kazaljke po unutrašnjoj ivici. Stanje  $(ii_{\downarrow})$



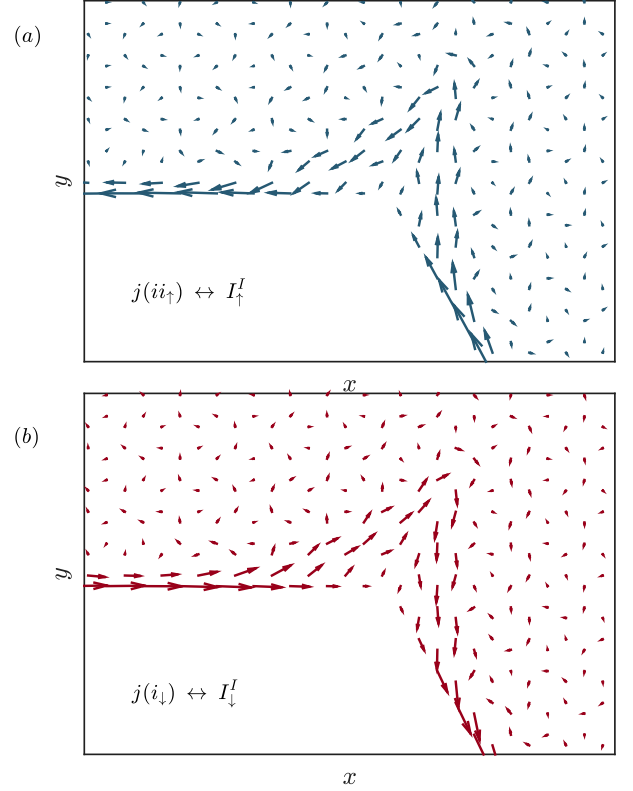
Sl. 6. GSV u okolini ugla nanoprstena koja odgovara (a) struji  $I_1^E$  (stanje  $(i_\uparrow)$  na Sl. 3(a)) i (b) struji  $I_1^E$  (stanje  $(ii_\uparrow)$  na Sl. 3(b)).

ima raspodelu lokalizovanu na spoljašnjoj ivici, pa elektroni spina dole formiraju struju dipola  $I_1^E$  koja kruži u smeru kazaljke, Sl. 5(b). Kao i u slučaju elektrona spina gore, stanje  $(iii_\uparrow)$  ima raspodelu sa provodnim kanalima na obe ivice, prikazanu na Sl. 5(c).

### V. GUSTINA STRUJE VEROVATNOĆE

U prethodnom poglavlju prikazane su verovatnoće raspodele svojstvenih stanja kojima su implicitno pridružene odgovarajuće struje magnetskog dipola, u zavisnosti od znaka  $\partial E/\partial B$ . Da bismo pokazali da stanja propagiraju i da nisu stojeći talasi, za izabrana stanja spina gore i spina dole izračunali smo GSV datu sa (3). Ono što treba istaći je da je smer takve GSV suprotan od smera struje.

GSV u okolini ugla nanoprstena za stanja spina gore i dole koja su lokalizovana na spoljašnjoj ivici,  $(i_\uparrow)$  i  $(ii_\uparrow)$ , prikazane su na Sl. 6(a) i Sl. 6(b). Izračunata GSV potvrđuje ranije zaključke o smeru struja  $I_1^E$  i  $I_1^E$ . GSV za stanja lokalizovana na unutrašnjoj ivici,  $(ii_\downarrow)$  i  $(i_\downarrow)$ , prikazane su na Sl. 7(a) i Sl. 7(b). GSV, a samim tim i struje  $I_1^I$  i  $I_1^I$  na unutrašnjoj ivici, su suprotnog smera. Zapažamo da struja ne teče kroz foteljaste segmente na spojevima susednih stranica prstena, već da ih zaobilazi kroz njegovu unutrašnjost, tako da je kontinuitet duž čitave spoljašnje i unutrašnje ivice očuvan, što se nije moglo zaključiti samo razmatranjem prostornih raspodela na Sl. 4 i Sl. 5.



Sl. 7. GSV u okolini ugla nanoprstena koja odgovara (a) struji  $I_1^I$  (stanje  $(ii_\uparrow)$  na Sl. 3(a)) i (b) struji  $I_1^I$  (stanje  $(i_\downarrow)$  na Sl. 3(b)).

### VI. ZAKLJUČAK

Teorijski smo razmatrali elektronsku strukturu šestougaoanog silicenskog nanoprstena sa cik-cak ivicama. Na osnovu raspodele svojstvenih stanja elektrona spina gore i stanja elektrona spina dole i njihovih GSV, pokazali smo da struje elektrona spina gore i spina dole imaju suprotne smerove na spoljašnjoj i unutrašnjoj ivici nanoprstena. Prema tome, spektri prikazani na Sl. 2 odgovaraju spiralnim ivičnim stanjima. Spiralna stanja u magnetskom polju su kvalitativno opisana klasičnim modelom magnetskog dipola. Iako je vremenska invarijantnost narušena spoljašnjim magnetskim poljem, KSH stanje ostaje očuvano za energije unutar spin-orbitnog procepa, što je u skladu sa rezultatima iz [14]. Često citirani model [15], u kome je SOI predstavljena efektivnim magnetskim poljem suprotnih smerova za spin gore i spin dole,  $\mathbf{B} = sB\mathbf{e}_z$ , ne može da se primeni u ovom slučaju, jer bi za neku kritičnu vrednost spoljašnjeg magnetskog polja stanja spina dole bila delokalizovana usled poništavanja spin-orbitnog i spoljašnjeg magnetskog polja. Iako se u slučaju nanoprstena ne može definisati topološka  $\mathbb{Z}_2$  invarijanta, topološko poreklo ivičnih stanja može se objasniti principom veze beskonačnog monosloja i ivice (engl. *bulk-edge correspondence*). Ivice nanoprstena razdvajaju topološki izolator od vakuma, trivijalnog izolatora beskonačno velikog energijskog procepa, pa se na njima javljaju spiralna stanja. Zanimljiva je i pojava da struja ne teče kroz foteljaste spojeve na cik-cak ivicama, što je posledica potpuno drugačije prirode topoloških ivičnih stanja na cik-cak i foteljastim ivicama nanotraka [16].

Važno je istaći da nismo koristili fenomenološke parametre za modelovanje SOI, već realnu vrednost  $\Delta_{SO}$  za silicen, izračunatu polazeći od prvih principa u [10].

#### ZAHVALNICA

Ovaj rad je podržalo Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije (Projekat III45003).

#### LITERATURA

- [1] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, S. Ciraci, "Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, no. 236804, Jun, 2009.
- [2] C.-C. Liu, W. Feng, Y. Yao, "Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, no. 076802, Aug, 2011.
- [3] M. Z. Hasan, C. L. Kane, "Colloquim: Topological Insulators", *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 3045-3067, Nov, 2010.
- [4] X. -L. Qi, S.-C. Zhang, "Topological Insulators and superconductors", *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 1057-1110, Oct, 2011.
- [5] C. L. Kane, E. J. Mele, " $Z_2$  Topological order and the Quantum Spin Hall Effect", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, no. 146802, Sep, 2005.
- [6] C. L. Kane, E. J. Mele, "Quantum Spin Hall Effect in Graphene", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, no. 226801, Nov, 2005.
- [7] K. Kikutake, M. Ezawa, N. Nagosa, "Edge states in silicene nanodisk", *Phys. Rev. B*, vol. 88, no. 115432, Sep, 2013.
- [8] P. Rakytka, M. Vigh, A. Csordás, J. Cserti, "Protected edge states in silicene dots and antidots in magnetic field", *Phys. Rev. B*, vol. 91, no. 125412, Mar, 2015.
- [9] M. Grujić, M. Tadić, F. M. Peeters, "Chiral properties of topological-state loops", *Phys. Rev. B*, vol. 91, no. 245432, Jun, 2015.
- [10] C.-C. Liu, H. Jiang, Y. Yao, "Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin", *Phys. Rev. B*, vol. 84, no. 195430, Nov, 2011.
- [11] D. R. da Costa, A. Chaves, G. A. Farias, L. Covaci, F. M. Peeters, "Wave-packet scattering on graphene edges in the presence of a pseudomagnetic field", *Phys. Rev. B*, vol. 86, no. 115434, Sep, 2012.
- [12] D. R. da Costa, A. Chaves, M. Zarenia, J. M. Pereira, G. A. Farias, F. M. Peeters, "Geometry and edge effects on the energy levels of graphene quantum rings: A comparison between tight-binding and simplified Dirac models", *Phys. Rev. B*, vol. 89, no. 075418, Feb, 2014.
- [13] D. A. Bahamon, A. L. C. Pereira, P. A. Schulz, "Inner and outer edge states in graphene rings: A numerical investigation", *Phys. Rev. B*, vol. 79, no. 125414, Mar, 2009.
- [14] O. Shevtsov, P. Carmier, C. Petitjean, C. Groth, D. Carpentier, X. Waintal, "Graphene-based Heterojunction between Two Topological Insulators", *Phys. Rev. X*, vol. 2, no. 031004, Jul, 2012.
- [15] G. Tkachov, "Introducing Topological Insulators: Mind the Time Reversal", in *Topological Insulators, The Physics of Spin Helicity in Quantum transport*, ch. 1, sec 1.3, pp. 6-9, Pan Stanford Publishing, 2015.
- [16] M. Ezawa, N. Nagosa, "Interference of topologically protected edge states in silicene nanoribbons", *Phys. Rev. B*, vol. 88, no. 121401(R), Sep, 2013.

#### ABSTRACT

Silicene is the low-buckled honeycomb monolayer of silicon atoms, which is topological insulator due its intrinsic spin-orbit interaction (SOI). The quantum spin Hall (QSH) effect emerges at the edges of silicene nanoribbons, i.e. helical edge states appear. Employing the Kane-Mele model, we calculated the electronic structure of hexagonal silicene nanoring with zigzag edges, subjected to a perpendicular magnetic field. The results include the magnetic field dependence of energy spectrum, distributions of the spin-up and the spin-down electron eigenstates, and probability current densities of these states. We show that QSH state exists at the outer and inner edges of the nanoring. The helical edge states can be qualitatively explained using classical model of the magnetic dipole in magnetic field.

#### Hexagonal silicene nanoring with zigzag edges in perpendicular magnetic field

Dušan Jakovljević, Marko Grujić, Milan Tadić