



AGH

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Praca doktorska

Bartłomiej Rzeszotarski

Transport ładunku i spinu w nanoukładach na bazie silicenu

Promotor: **prof. dr hab. inż. Bartłomiej Szafran**

Promotor: **prof. dr hab. inż. Andrzej Koleżyński**

Promotor pomocniczy: **dr inż. Alina Mreńca-Kolasińska**

Kraków, Maj 2021

Oświadczenie autora rozprawy:

Oświadczam, świadomy(-a) odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę doktorską wykonałem(-am) osobiście i samodzielnie i że nie korzystałem(-am) ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

data, podpis autora

Oświadczenie promotorów rozprawy:

Niniejsza rozprawa jest gotowa do oceny przez recenzentów.

data, podpis pierwszego promotora rozprawy

data, podpis drugiego promotora rozprawy

Badania opisane w rozprawie były finansowane z budżetu Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego na lata 2017-2021 w ramach projektu Diamentowy Grant (0045/DIA/2017/46), ze środków Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój (POWR.03.02.00-00-I004/16) Europejskiego Funduszu Społecznego w ramach Interdyscyplinarnych Środowiskowych Studiów Doktoranckich „Fizyczne, Chemiczne i Biofizyczne Podstawy Nowoczesnych Technologii i Inżynierii Materiałowej” (FCB) oraz Narodowego Centrum Nauki w ramach stypendium ETIUDA (UMO-2019/32T/ST3/00044). Obliczenia były wykonywane z wykorzystaniem Infrastruktury PLGrid na klastrach Zeus i Prometheus Akademickiego Centrum Komputerowego Cyfronet AGH.

Podziękowania

Chciałbym w tym miejscu złożyć ogromne podziękowania dla moich Promotorów. Dla prof. Bartłomieja Szafrana za ogromną wiedzę i doświadczenie, którymi podzielił się ze mną w trakcie trwania studiów, za czas spędzony na analizach moich wyników, za ogromne zaangażowanie w moje badania i cierpliwość. Dla prof. Andrzeja Koleżyńskiego, za wszystkie wskazówki, wiedzę oraz dostęp do infrastruktury obliczeniowej w dziedzinie DFT. Dla dr Aliny Mreńcy-Kolasińskiej, za godziny rozmów o fizyce, za cierpliwość w tłumaczeniu i za zaangażowanie w moje badania.

Chciałbym również przekazać ogromne podziękowania dla profesora Mirosława Grzyła, który odkrył przede mną prawdziwe piękno fizyki, zainspirował ścieżką naukową i słuchał za każdym razem z zainteresowaniem o mojej pracy badawczej.

Dziękuję mojej żonie Ani, za wsparcie każdego dnia i wyrozumiałość, kiedy nauka zbyt-
nio mnie pochłaniała, moim Rodzicom za wiarę we mnie oraz wszystkim innym Kolegom i
Koleżankom: Krzysztofowi Kolasińskiemu, Dariuszowi Żebrowskiemu, Edycie Osice i Elżbiecie
Strzałce za pomoc, wskazówki i interesujące seminaria, Pawłowi Wójcikowi za podzielenie się
ogromnym doświadczeniem i wiedzą naukową, Wojciechowi Krupie za wspólne rozmowy na wy-
dziale, oraz przyjacielowi Łukaszowi Plecetemu, za ponad 23 lata wspólnych rozważań o fizyce
i wszechświecie.

Spis treści

1	Motywacja i cel pracy	9
2	Wprowadzenie	9
2.1	Struktura silicenu	9
2.2	Oddziaływania SO w silicenie	10
2.3	Hamiltonian	11
2.4	Metoda rozwiązywania problemu rozproszeniowego	12
2.5	Kwantowy spinowy efekt Halla	16
2.6	Efekt Aharonova-Bohma	17
2.7	Silicen na podłożu InSe	19
2.7.1	Obliczenia <i>ab initio</i>	19
2.7.2	Przybliżenie pierwsze	21
2.7.3	Przybliżenie drugie	23
3	Streszczenia artykułów	25
4	Podsumowanie i wnioski	30

Streszczenie

Rozprawa dotyczy badań właściwości transportowych ładunku i spinu w nanoukładach na bazie silicenu, w szczególności wpływu oddziaływań spin-orbita typu Rashby i Kane-Mele, oraz zewnętrznych pól magnetycznych i elektrycznych na strukturę elektronową, a także na obserwowane efekty kwantowe (m.in kwantowy spinowy efekt Halla i efekt Aharonova-Bohma). Do tego celu wykorzystano model ciasnego wiązania, gdzie kwantowomechaniczny problem rozpraszania rozwiązywano z rozdzielczością atomową metodą kwantowej granicy przewodzącej.

W ramach pracy przedstawiono projekt inwertera spinowego, mogącego służyć jako tranzystor spinowy, kontrolowanego przez napięcie bramki sterującej. Wykorzystano w nim możliwość uzyskania stanu topologicznego izolatora celem związania prądów spinowych na krawędzi wstęgi, co jednocześnie umożliwia dobór prędkości precesji poprzez jej liniową zależność z różnicą wartości wektora falowego między modem wchodzącym i wychodzącym dla stanów krawędziowych. Pokazano, że dostrajając odpowiednio parametry długości i napięcia bramki, szerokości wstęgi oraz poziom Fermiego, można uzyskać pełny obrót spinu na odległościach rzędu kilku nanometrów.

Rozprawa zawiera także projekt detektora fazy topologicznego izolatora oraz fazy trywialnego transportu dla silicenu w układzie interferometru Younga oraz Aharonova-Bohma (systemie dwuszczelinowym i pierścieniowym), gdzie badając konduktancję w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego możemy wykryć, w którym stanie ów układ się znajduje.

Kolejne części rozprawy pokrywają badania kwantowego spinowego efektu Halla indukowanego lokalnie przez niejednorodne pole elektryczne, gdzie pod obszarami bramkowania następuje przejście stanu silicenu z izolatora pasmowego do izolatora topologicznego, co skutkuje związaniem prądów chiralnych wzdłuż linii granicznych (zmian znaku pola elektrycznego). W oparciu o ten efekt, przedstawiono badanie geometrycznego rozłożenia gęstości rozproszeniowej w pierścieniu kwantowym z dwoma kontaktami, wpływ zaburzenia punktowego na współczynnik odbicia, a także projekt pomiaru rezystancji, dla którego oscylacje w funkcji pola magnetycznego odpowiadają interferencjom Aharonova-Bohma.

Skupiono się również na efektach magnetycznych dla kwantowego kontaktu punktowego zdefiniowanego elektrostatycznie w silicenie. Zmierzono wartości efektywnego czynnika Landégo przy pomocy pomiaru transkonduktancji i wykazano związek wyników z oddziaływaniem spin-orbita typu Kane-Mele.

Abstract

The dissertation focuses on the charge and spin transport properties in nanodevices based on silicene, with special attention to the Rashba and the Kane-Mele spin-orbit interactions, the influence of external magnetic and electric field on the structure and observed quantum effects (i.a. quantum spin Hall effect and Aharonov-Bohm effect). We use tight-binding model along with the quantum transmitting boundary method to solve the stationary quantum scattering problem in atomic resolution for each considered system.

We propose a spin inverter controlled by a gate voltage, that can be considered as a spin transistor. We make use of the topological insulator state to confine currents at the edges that allows us to control the precession rate due to its linear dependence on the difference between the wave vectors of the incoming and outgoing modes at the edge states. We show that by tuning the length/voltage of the gate, the width of the ribbon and the Fermi level, the full spin flip occurs at the lengths of the nanometers.

The dissertation also includes the proposal for the detector of topological insulator and trivial state in silicene, that is based on the Young and Aharonov-Bohm interferometers (two slits and quantum ring configurations). Defining the state of the device is concluded from the conductance measurement in presence of the external magnetic field.

Further parts of this dissertation cover studies of the quantum spin Hall effect induced locally by inhomogeneous electric field, where the silicene between gated areas changes from band insulator to topological insulator with confinement of the chiral currents along the critical electric field lines. Exploiting this effect we study as follows: the geometric distribution of the scattering density in the crossed quantum ring with two transmitting leads, reflection probability dependence on sharp electric perturbation as well as the proposal of the experimental implementation of the four-terminal resistance measurement in which the resistance oscillates in external magnetic field with agreement to the Aharonov-Bohm interference.

We also focus on the magnetic effects for an electrostatically defined quantum point contact in silicene. We calculate effective Landé factors from the transconductance of the system and show strict relationship of the obtained results to the spin-orbit coupling in Kane-Mele form.

Układ pracy

Rozprawę doktorską tworzy zbiór czterech artykułów opisujących właściwości transportu ładunku i spinu w nanourządzeniach na bazie silicenu. Suplementem do rozprawy jest manuskrypt dotyczący badania efektywnego czynnika Landégo w silicenie, który w chwili złożenia rozprawy jest recenzowany.

- A1 **Bartłomiej Rzeszotarski**, Bartłomiej Szafran, *Electron spin inversion in gated silicene nanoribbons*, Phys. Rev. B **98**, 075417 (2018)
- A2 **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Electron interferometry and quantum spin Hall phase in silicene*, Phys. Rev. B **99**, 165426 (2019)
- A3 Bartłomiej Szafran, **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, *Topologically protected wave packets and quantum rings in silicene*, Phys. Rev. B **100**, 085306 (2019)
- A4 **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Aharonov-Bohm oscillations of four-probe resistance in topological quantum rings in silicene and bilayer graphene*, Phys. Rev. B **101**, 115308 (2020)
- S1 **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Francois M. Peeters, Bartłomiej Szafran, *Effective Landé factors for an electrostatically defined quantum point contact in silicene* (<https://arxiv.org/abs/2105.02843>)

Rozprawa składa się z 4 rozdziałów. Pierwszy rozdział przedstawia główne cele i motywację pracy. W drugim rozdziale przedstawiono główne cechy silicenu i wynikające z nich zjawiska możliwe do obserwacji w tym materiale będące przedmiotem badań zawartych w publikacjach, oraz zaprezentowano model teoretyczny rozwiązania kwantowego problemu rozpraszania. Trzeci rozdział zawiera omówienia prac A1-A4 wraz ze streszczeniem manuskryptu S1. W ostatnim, czwartym rozdziale, zawarto podsumowanie całej rozprawy oraz wnioski zebrane podczas badań. Dalszą część stanowią załączniki artykułów i suplementów.

1 Motywacja i cel pracy

W 2015 roku pierwszy raz wytworzono działający w warunkach normalnych i temperaturze pokojowej tranzystor na bazie silicenu [1]. Atomy krzemu tworzące silicen nanoszono metodą epitaksjalną na podłożu z cienkiej warstwy srebra Ag (111) chroniąc je przed utlenianiem poprzez przykrycie tlenkiem krzemu Al_2O_3 . Charakterystyka prądowo-napięciowa urządzenia świadczy o istnieniu stożków Diraca - liniowej relacji dyspersji dla energii z poziomu Fermiego, należącego do okolic punktu K/K' sieci odwrotnej i charakterystycznej dla gazu elektronowego 2D. Pojawiający się stożek Diraca w relacji dyspersji świadczy o bliskiej zeru masie efektywnej nośników. Temat elektronów relatywistycznych był intensywnie badany w grafenie [2, 3].

Silicen, podobnie jak grafen, to kwazi-dwuwymiarowa struktura, której atomy sieci rozłożone są w układzie plastra miodu. Ze względu na symetrię wolnostojącego grafenu efekty samoistnego (*intrinsic*) oddziaływania typu spin-orbita są zanedbywalnie małe, a wprowadza się je do grafenu poprzez odpowiednią modyfikację sieci m.in. poprzez zwijanie w nanorurki [4], stosowanie efektów bliskości dla podłoży z TMDC [5, 6], adsorpcję powierzchniową atomów fluoru odkształcającą sieć [7]. W silicenie natomiast oddziaływanie typu spin-orbita występuje naturalnie [8], ponieważ tworzą go dwie rozróżnialne podsieci atomów krzemu, które są rozsunięte w pionie (Rys. 1), a to powoduje zniesienie symetrii układu blokującej oddziaływania SO.

Oddziaływania SO występujące w silicenie - typu Rashby, wynikające z pojawienia się efektywnego pola elektrycznego między podsieciami, oraz typu Kane-Mele [9], wynikające z anomalii parzystości w (2+1)-wymiarowej relatywistycznej teorii pola [10] wprowadzają do układu przerwę energetyczną dla przeciwnie zorientowanych spinów dla K i K' z osobna, co umożliwia zaobserwowanie i badanie efektów topologicznych w układach 2D.

Powyższe osiągnięcia w dziedzinie eksperymentalnej, nowatorskie metody uzyskiwania warstw silicenu umożliwiające jego pracę w warunkach normalnych i temperaturze pokojowej, szeroko zbadane efekty kwantowe relatywistycznych fermionów w grafenie, samoistnie występujące oddziaływanie typu spin-orbita oraz idące za nim możliwości obserwacji i badań efektów topologicznych, stanowią motywację do badań nad siliceniem od strony teoretycznej, zarówno pod kątem nowych zjawisk transportowych (np. w warunkach działania kwantowego spinowego efektu Halla [11, 12]) jak i w celach budowania urządzeń spinowo-aktywnych.

Celem poniższej pracy doktorskiej jest zbadanie właściwości transportowych ładunku i spinu w nanourządzeniach na bazie silicenu pod kątem stosowalności go w eksperymentalnych pomiarach ww. efektów oraz potencjału wykorzystania w urządzeniach opartych na manipulacji spinu.

2 Wprowadzenie

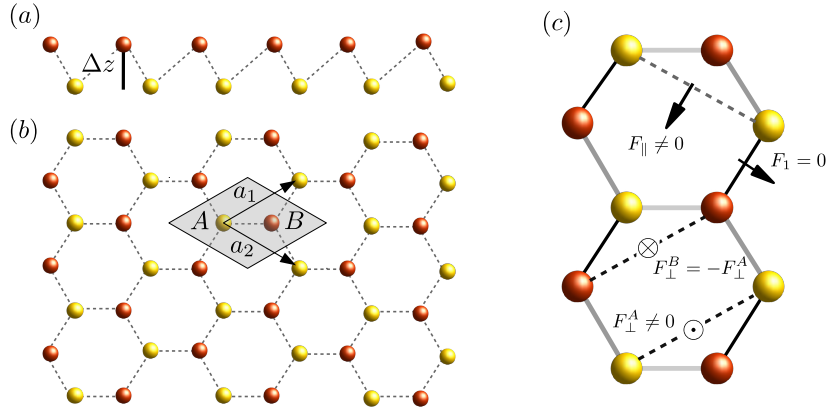
2.1 Struktura silicenu

Sieć krystaliczna silicenu składa się z atomów krzemu ułożonych na dwóch podsieciach A i B rozsuniętych o $\Delta z = 0.46 \text{ \AA}$ [13] znajdujących się w komórce elementarnej (Rys. 1(a,b)) o stałej sieci $a = 3.86 \text{ \AA}$, z wektorami bazowymi

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}, 1), \quad (1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}, -1). \quad (2)$$

Pionowe rozsuniecie atomów w zrelaksowanej strukturze zachodzi dla najniższej energii wiązania. Metodami *ab-initio* wyznaczono trzy minima [14, 15] przy użyciu przybliżenia lokalnej



Rysunek 1: Schemat sieci atomów krzemu w silicenie. Projekcja (a) równoległa do płaszczyzny warstwy oraz (b) prostopadła z zaznaczonymi wektorami bazowymi a_1 i a_2 . Zaciemnione pole obejmuje obszar komórki elementarnej. Kolorami żółtym (pomarańczowym) rozróżniono atomy podsieci A (B). (c) Wbudowane oddziaływanie spin-orbita wynikające z rozważaniami nad symetrią układu. Siła F_1 zanika z powodu symetrii lustrzanej, natomiast F_{\parallel} dla dalszych sąsiednich atomów jest niezerowe w płaszczyźnie horyzontalnej. W układzie prostopadłym do warstwy rozkład sił F_{\perp}^A oraz F_{\perp}^B jest niezerowy i przeciwny co do wartości. Wykonano na podstawie [8]

gęstości (LDA z ang. *local density approximation*). We wszystkich rachunkach rozproszonych wchodzących w skład niniejszej rozprawy korzystano z wartości niskiego wyboczenia (LB z ang. *low-buckled*) $\Delta z_{LB} = 0.46 \text{ \AA}$, która jest jedyną stabilną konfiguracją, wynikającą z dehydrydyzacji indukowanej fałdowaniem (*puckering induced dehydrydisation*), gdzie orbital p_z prostopadły do warstwy tworzy liniowe kombinacje z orbitalami typu s formując wiązanie π . Dwa pozostałe minima przypadają dla niestabilnych konfiguracji wysokiego wyboczenia (HB z ang. *high-buckled*) $\Delta z_{HB} = 2.13 \text{ \AA}$ oraz planarnej (PL) (Rys. 2).

2.2 Oddziaływania SO w silicenie

W tym rozdziale przybliżę sposób powstawania oddziaływań spin-orbita w idealnej strukturze czystego silicenu, dzięki którym możemy zaobserwować m.in. transport w zakresie pracy topologicznego izolatora (warunki kwantowego spinowego efektu Halla).

Energię oddziaływań typu spin-orbita w równaniu Pauliego można zapisać w ogólnej postaci jako

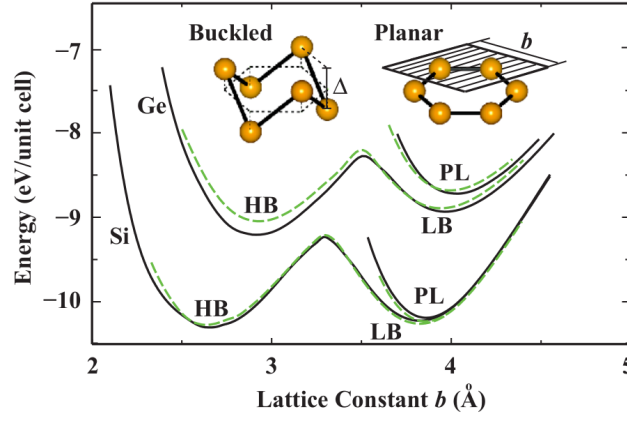
$$H_{SOC} = \frac{\hbar}{(2m_0c)^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} = -\frac{\hbar}{(2m_0c)^2} (\vec{F} \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad (3)$$

gdzie poprzez \vec{F} oznaczono siłę, V energię potencjalną, oraz pęd przez \vec{p} . Wektor macierzy Pauliego został oznaczony symbolem $\vec{\sigma}$ natomiast \hbar to stała Plancka, m_0 masa elektronu swobodnego, a c to prędkość światła w próżni.

Rozważając symetrię układu atomów sieci (Rys. 1(c)) można rozróżnić dwie płaszczyzny działania sił - prostopadłą i równoległą do płaszczyzny. W płaszczyźnie prostopadłej siła F_{\perp}^A wprowadza do układu oddziaływanie typu Rashby

$$H_R = i\gamma_R (\vec{\sigma} \times \vec{r}_{ij}^0) \cdot F_{\perp}^A \vec{e}_z \equiv it_R \mu_{ij} (\vec{\sigma} \times \vec{r}_{ij}^0)_z \quad (4)$$

gdzie $\vec{r}_{ij}^0 = \vec{r}_{ij}/|\vec{r}_{ij}|$ jest wektorem jednostkowym dla wektora przeskoku \vec{r}_{ij} od atomu j na



Rysunek 2: Wykres energii w funkcji stałej sieci układu heksagonalnego atomów krzemu i germanu wyznaczonych dla różnych konfiguracji położenia. Czarnymi liniami zaznaczono energie obliczone za pomocą LDA i potencjału PAW, natomiast zielonym, tą samą metodą LDA z ultragładkimi pseudopotencjałami. Schematy wewnętrzne prezentują układ wyboczony i planarny z zaznaczoną odległością wyboczenia Δ i stałą sieci b . Wykres pochodzi ze źródła [14]

atom i dla drugich sąsiadów zapisywanych w notacji $\langle\langle i, j \rangle\rangle$, natomiast $\mu_{ij} = \pm 1$ dla podsieci A (B) zgodnie z przeciwnym kierunkiem sił $F_{\perp}^A = -F_{\perp}^B$. Parametr t_R został wyznaczony w przybliżeniu niskich energii dla efektywnego Hamiltonianu w modelu ciasnego wiązania [8] i dla silicenu

$$t_R = \frac{2}{3}\lambda_R, \text{ gdzie } \lambda_R = 0.7 \text{ meV} \quad (5)$$

jest wartością własną Hamiltonianu odpowiadającą oddziaływaniom typu Rashby i jego wartość została obliczona w oparciu o wyniki uzyskane z zasad pierwszych [11]. Rozważając kierunek równoległy do płaszczyzny otrzymujemy wyrażenie postaci typu Kane-Mele [9]

$$H_{KM} = i\gamma_{KM} \left(\vec{F}_{\parallel} \times \vec{r}_{ij} \right) \cdot \vec{\sigma} \equiv it_{KM}\nu_{ij}\sigma_z \quad (6)$$

gdzie $\nu_{ij} = \frac{\vec{r}_i \times \vec{r}_j}{|\vec{r}_i \times \vec{r}_j|}$, natomiast \vec{r}_i i \vec{r}_j to wektory wodzące centrów geometrycznych atomów będących drugimi sąsiadami $\langle\langle i, j \rangle\rangle$. Używając poprawki drugiego rzędu do efektywnego Hamiltonianu w przybliżeniu niskich energii [8] wyznaczono

$$t_{KM} = \frac{\lambda_{KM}}{3\sqrt{3}}, \text{ gdzie } \lambda_{KM} = 3.973 \text{ meV} \quad (7)$$

dla silicenu.

2.3 Hamiltonian

Znając parametry oddziaływań spin-orbita w siliceniu możemy zapisać pełny Hamiltonian w cztero-pasmowym modelu ciasnego wiązania [8], uwzględniający także oddziaływania z ze-

wewnętrzny prostopadłym polem elektrycznym E_z i magnetycznym \mathbf{B} [13] jako

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle k,l \rangle \alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{l\alpha} \\
 & + it_{KM} \sum_{\langle \langle k,l \rangle \rangle \alpha, \beta} \nu_{kl} c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha, \beta}^z c_{l\beta} - it_R \sum_{\langle \langle k,l \rangle \rangle \alpha, \beta} \mu_{kl} c_{k\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \times \vec{r}_{kl})_{\alpha\beta}^z c_{l\beta} \\
 & + \sum_{k, \alpha} E_z \ell_k c_{k, \alpha}^\dagger c_{k, \alpha} + i \lambda_R^{ext.}(E_z) \sum_{\langle k,l \rangle \alpha, \beta} c_{k\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \times \vec{r}_{kl})_{\alpha\beta}^z c_{l\beta} \\
 & + \sum_{k, \alpha, \beta} c_{k, \alpha}^\dagger (\mathbf{B} \cdot \vec{\sigma})_{\alpha\beta} c_{k, \beta},
 \end{aligned} \tag{8}$$

gdzie $c_{k\alpha}^\dagger$ ($c_{k\alpha}$) to operator kreacji (anihilacji) elektronu o spinie α na jonie k . Sumowanie po indeksach $\langle k, l \rangle$ przebiega dla najbliższych sąsiadów. Pierwszy wyraz zawiera energię przeskoku pomiędzy $\langle k, l \rangle$ wynikającą z przekrywania się atomowych orbitali p_z , a jego wartość dla silicenu wynosi $t = 1.6$ eV [8, 11]. Dla większej czytelności kolejne elementy Hamiltonianu rozróżniono kolorami: (i) **niebieskim**, poprzednio wyprowadzone na podstawie rozważań symetrii oddziaływania spin-orbita, (ii) **czerwonym**, oddziaływanie zewnętrznego pola E_z oraz pochodzący od niego dodatkowy przyczynek w postaci SO typu Rashby, gdzie parametr $\lambda_R^{ext.}(E_z = 0) = 0$ i rośnie liniowo do wartości $10 \mu\text{eV}$ dla pola krytycznego $E_c = 17 \text{ meV}/\text{\AA}$ [16–18], natomiast $\ell_k = 0.23 \text{ \AA}$ jest połówkową długością rozsunęcia podsieci, (iii) **fioletowym**, oddziaływanie Zeemana z zewnętrznym polem magnetycznym o amplitudzie $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$.

Efekty orbitalne zewnętrznego pola magnetycznego wprowadzamy do układu poprzez fazę Peierlsa, modyfikując każdy parametr przeskoku dla uogólnionego Hamiltonianu (8)

$$H = \sum_{i,j,s,s'} h_{ijs's'} c_{is'}^\dagger c_{is'} \tag{9}$$

poprzez transformację $h_{ijs's'} \rightarrow h_{ijs's'} e^{\phi_{ij}}$, gdzie $\phi_{ij} = \frac{2\pi i}{\phi_0} \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_j} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$. Dla składowej prostopadłej B_z pola używaliśmy cechowania $\mathbf{A} = (-B_z y, 0, 0)$ spełniającego równanie $B = \nabla \times \mathbf{A}$, natomiast dla pól w płaszczyźnie o cechowaniu $\mathbf{A} = (B_y z, 0, B_x y)$ całka jest w kierunku prostopadłym do powierzchni po bardzo krótkim wektorze, a zatem faza Peierlsa od B_x, B_y jest zaniedbywalna ze względu na dwuwymiarowy charakter układu.

Dla dużych układów stosowaliśmy skalowanie s_f [19], które modyfikuje wartość stałej sieci $a_s = a \cdot s_f$ oraz całek przeskoku $t_s = \frac{t}{s_f}$ w Hamiltonianie. Przybliżenie to działa dla maksymalnej energii Fermiego E_{max} i wartości pola magnetycznego B_z spełniających warunki

$$s_f \ll \frac{3\pi t}{|E_{max}|}, \text{ oraz } s_f \ll \frac{\sqrt{\hbar/eB_z}}{a}. \tag{10}$$

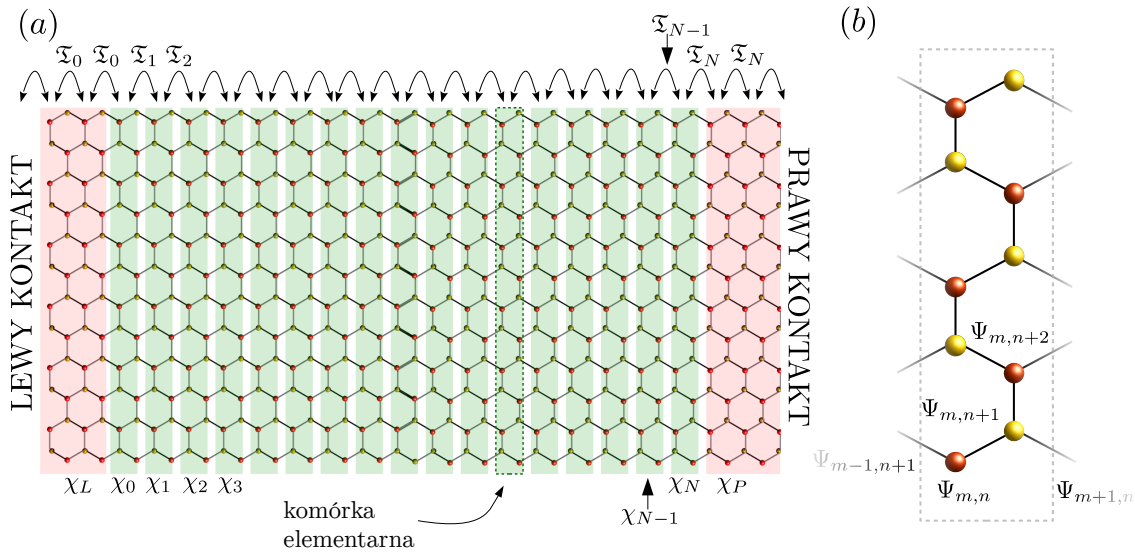
Jeżeli w rachunkach stosowaliśmy czynnik skalujący s_f , to nie był on większy niż 4, oraz mieścił się w powyższych warunkach z dużą rezerwą, co zapewniało zbieżność wyników ze strukturą bez modyfikacji, natomiast koszt i długość obliczeń znacząco się zmniejszały.

2.4 Metoda rozwiązywania problemu rozproszeniowego

Do rozwiązywania problemu rozproszeniowego wykorzystaliśmy metodę kwantowej granicy przewodzącej (QTB z ang. *quantum transmitting boundary*) [20, 21] dla równania Schrödingera całego układu

$$\mathfrak{T}_{i-1} \chi_{i-1} + \mathbf{H}_i \chi_i + \mathfrak{T}_i^\dagger \chi_{i+1} = E_F \chi_i \tag{11}$$

gdzie $\mathfrak{T}_{i\pm 1}$ jest macierzą oddziaływań pomiędzy komórką i a $i \pm 1$, $\chi_i = \begin{pmatrix} \chi_{i,\uparrow} \\ \chi_{i,\downarrow} \end{pmatrix}$ spinorową funkcją falową, natomiast \mathbf{H}_i jest Hamiltonianem z modelu ciasnego wiązania opisującym i -tą komórkę (rys. 3).



Rysunek 3: (a) Schemat sieci układu rozproszeniowego w modelu ciasnego wiązania. Na lewym i prawym kontakcie nałożono periodyczne warunki brzegowe (czerwony obszar). W obszarze rozpraszania (zielony) periodyczność nie musi być zachowana i dobór elementów macierzy zarówno oddziaływań między komórkami \mathfrak{T} jak i wewnątrz komórki χ_i jest dowolny np. poprzez wprowadzenie lokalnego zewnętrznego pola elektrycznego do Hamiltonianu. (b) Przykład numeracji węzłów w obszarze pojedynczej komórki.

Funkcja falowa w węźle (m, n) dla całego układu jest superpozycją funkcji wewnątrz każdej komórki układu

$$\Psi_S(m, n) = \sum_{l=1}^N \chi_l(n) \delta_{m,l}. \quad (12)$$

W celu rozwiązania problemu postąpiliśmy jak dla metody dopasowania funkcji falowej [22] szukając ogólnego rozwiązania dla jednorodnej kwazi-nieskończonej wstęgi, pełniącej rolę kontaktu. Z warunków periodyczności dla każdej komórki i w kontakcie otrzymujemy $\mathfrak{t}_i = \mathfrak{t}_0$, a zatem

$$\mathfrak{T}_0 \chi_{i-1} + \mathbf{H}_0 \chi_i + \mathfrak{T}_0^\dagger \chi_{i+1} = E_F \chi_i, \quad (13)$$

a następnie używając podstawienia Blocha $\chi_n = \lambda^n \chi$ i dzieląc powyższe równanie przez λ^{n-1} otrzymujemy

$$\mathfrak{T}_0 \chi + \mathbf{H}_0 \lambda \chi + \mathfrak{T}_0^\dagger \lambda^2 \chi = E_F \lambda \chi. \quad (14)$$

Wykorzystując nową zmienną $\xi = \lambda \chi$ otrzymujemy z powyższego równania uogólniony problem własny dla pary $(\chi, \xi)^T$ z wartością własną λ :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \mathfrak{T}_0 & \mathbf{H}_0 - \mathbf{I} E_F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \xi \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathfrak{T}_0^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \xi \end{pmatrix} \quad (15)$$

Rozwiązując powyższe równanie otrzymujemy wartości wektora falowego k_m dla wyznaczonych χ_m , gdzie dla poszczególnych wartości własnych λ_m rozpoznajemy: (i) falę propagującą gdy $|\lambda_m| = 1$, (ii) falę zanikającą (z ang. *evanescent*) odbitą gdy $|\lambda_m| > 1$ oraz (iii) falę zanikającą

przetransmitowaną $|\lambda_m| < 1$. Dla czytelności rozróżniamy także stany wchodzące $(\lambda_{j,+}, \chi_{j,+})$ i wychodzące $(\lambda_{j,-}, \chi_{j,-})$ zgodnie ze znakiem niesionego strumienia prądu Φ_j .

Ogólne równanie dla lewego kontaktu kwazi-nieskończonej wstęgi w węźle (m, n) dla posortowanych modów poprzecznych wygląda następująco

$$\Psi_L(m, n) = \sum_j^M \lambda_{j,+}^m \chi_{j,+} c_{j,+}^{in} + \sum_j^{M+M_e} \lambda_{j,-}^m \chi_{j,-} c_{j,-}^{out}, \quad (16)$$

gdzie liczba modów M_e zanikających jest skończona dla użytego Hamiltonianu ciasnego wiązania i całkowita liczba modów propagujących wynosi M , a stąd $M_e = N - M$ dla wielkości N wektora χ . Zakładamy również, że $\lambda_{j,-}^m \chi_{j,-}$ dla $j \geq M + 1$ odpowiadają amplitudom fal zanikających przetransmitowanych $c_{j,+}^{in}$ oraz zanikających odbitych $c_{j,-}^{out}$. Postępując analogicznie jak powyżej można zapisać równanie dla prawego kontaktu:

$$\Psi_P(m, n) = \sum_j^M \lambda_{j,-}^m \chi_{j,-} c_{j,-}^{in} + \sum_j^{M+M_e} \lambda_{j,+}^m \chi_{j,+} c_{j,+}^{out}. \quad (17)$$

Kolejnym krokiem w metodzie QTB jest dopasowanie funkcji falowej kontaktów z obszarem rozpraszania Ψ_S :

$$\Psi_L(m = 0, n) = \Psi_S(m = 0, n) = \chi_0 \quad (18)$$

$$\Psi_{m,n} = \Psi_S(m, n) \quad (19)$$

a stąd, z równania (16) otrzymujemy

$$\Psi_S(m = 0, n) = \chi_0(n) = \sum_j^M \chi_{j,+} c_{j,+}^{in} + \sum_j^{M+M_e} \chi_{j,-} c_{j,-}^{out} \quad (20)$$

Kolejnym krokiem w metodzie jest znalezienie zależności amplitudy $c_{j,-}^{out}$ od $\Psi_L(0, n)$ oraz $c_{j,-}^{in}$. Korzystając z definicji macierzy przekrywania $\mathbf{S}_{jp,-}^{-1} = \langle \chi_{j,-} | \chi_{p,-} \rangle$, $\mathbf{A}_{jp,-} = \langle \chi_{j,-} | \chi_{p,+} \rangle$ oraz iloczynu skalarnego $\langle \chi_{p,-} | \chi_0 \rangle = \Delta x \sum_{n=1}^N \chi_{p,-}^*(n) \chi_0(n)$ możemy zapisać

$$c_{j,-}^{out} = \sum_{p=1}^{M+M_e} \mathbf{S}_{jp,-} \langle \chi_{p,-} | \chi_0 \rangle - \sum_{p=1}^{M+M_e} \sum_{q=1}^M \mathbf{S}_{jp,-} \mathbf{A}_{pq,-} c_{q,+}^{in} \quad (21)$$

Zakładając ciągłość funkcji falowej i jej pierwszej pochodnej wewnątrz kontaktu

$$\Psi_L(+1, n) - \Psi_L(-1, n) = \Psi_{+1,n} - \Psi_{-1,n} = \chi_1(n) - \chi_{-1}(n) \quad (22)$$

oraz korzystając z równania (16) otrzymujemy

$$\Psi_L(+1, n) - \Psi_L(-1, n) = \sum_j^M \Delta_{j,+} \chi_{j,+} c_{j,+}^{in} + \sum_j^{M+M_e} \Delta_{j,-} \chi_{j,-} c_{j,-}^{out} \quad (23)$$

gdzie $\Delta_{j,d} = \lambda_{j,d} - \lambda_{j,d}^{-1}$ dla $d = (+, -)$. Wprowadzając wyrażenie (21) na $c_{j,-}^{out}$ do powyższego równania otrzymujemy

$$\chi_1(n) - \chi_{-1}(n) = \Gamma_n^+ + \sum_{i=1}^N \Lambda_{n,i}^- \chi_0(i) \quad (24)$$

gdzie

$$\Gamma_n^+ = \sum_j^M \Delta_{j,+} \chi_{j,+}(n) c_{j,+}^{in} - \sum_j^{M+M_e} \Delta_{j,-} \chi_{j,-}(n) \tilde{c}_{j,-}^{in} \quad (25)$$

$$\tilde{c}_{j,-}^{in} = \sum_{u=1}^{M+M_e} \sum_{v=1}^M \mathbf{S}_{ju,-} \mathbf{A}_{uv,-} c_{v,+}^{in} \quad (26)$$

$$\mathbf{A}_{n,i}^- = \Delta x \sum_{j=1}^{M+M_e} \sum_{u=1}^{M+M_e} \Delta_{j,-} \chi_{j,-}(n) \mathbf{S}_{ju,-} \chi_{u,-}^*(i) \quad (27)$$

Wykorzystując równanie (24) można wyznaczyć funkcję falową na zewnątrz obszaru rozpraszania χ_{-1} . W notacji wektorowej otrzymujemy następujące równanie

$$\chi_{-1} = \chi_1 - \Gamma^+ - \mathbf{A}^- \chi_0, \quad (28)$$

które następnie wstawiamy do równania (11) dla $i = 0$ by pozbyć się czynnika χ_{-1} znajdującego się poza obszarem rozpraszania, uzyskując

$$\mathfrak{T}_{-1}(\chi_1 - \Gamma^- \mathbf{A}^- \chi_0) + \mathbf{H}_0 \chi_0 + \mathfrak{T}_0^\dagger \chi_1 = E_F \chi_0. \quad (29)$$

W powyższym zapisie przyjęto założenie, że kontakty są daleko od środka obszaru rozpraszania co pozwala na uproszczenie $\mathfrak{T}_{-1} = \mathfrak{T}_0$ i zapisanie równania warunku brzegowego na lewym kontakcie

$$(\mathbf{H}_0 - \mathbf{I}E_F - \mathfrak{T}_0 \mathbf{A}^-) \chi_0 + (\mathfrak{T}_0 + \mathfrak{T}_0^\dagger) \chi_1 = \mathfrak{T}_0 \Gamma^+. \quad (30)$$

Analogicznie do równania (24) możemy wyprowadzić równanie dla warunku brzegowego na prawym kontakcie

$$\Psi_P(N+1, n) - \Psi_P(N-1, n) = \Gamma_n^- + \sum_{i=1}^N \mathbf{A}_{n,i}^+ \Psi_P(N, n), \quad (31)$$

gdzie

$$\Gamma_n^- = \sum_j^M \Delta_{j,-} \chi_{j,-}(n) c_{j,-}^{in} - \sum_j^{M+M_e} \Delta_{j,+} \chi_{j,+}(n) \tilde{c}_{j,+}^{in} \quad (32)$$

$$\tilde{c}_{j,+}^{in} = \sum_{u=1}^{M+M_e} \sum_{v=1}^M \mathbf{S}_{ju,+} \mathbf{A}_{uv,+} c_{v,-}^{in} \quad (33)$$

$$\mathbf{A}_{n,i}^+ = \Delta x \sum_{j=1}^{M+M_e} \sum_{u=1}^{M+M_e} \Delta_{j,+} \chi_{j,+}(n) \mathbf{S}_{ju,+} \chi_{u,+}^*(i). \quad (34)$$

Wybierając $i = N$ (ostania komórka z prawej strony) dla powyższych równań i postępując analogicznie do $i = 0$ możemy zapisać równanie na $N+1$ komórkę (poza układem) w notacji wektorowej

$$\chi_{N+1} = \chi_{N-1} + \Gamma^- + \mathbf{A}^+ \chi_N, \quad (35)$$

i ponownie wstawiając do początkowego równania (11) otrzymujemy

$$\mathfrak{T}_{N-1} \chi_{N-1} + \mathbf{H}_N \chi_N + \mathfrak{T}_N^\dagger (\chi_{N-1} + \Gamma^- + \mathbf{A}^+ \chi_N) = E_F \chi_N. \quad (36)$$

Przy założeniu, że \mathfrak{T}_{N-1} ostateczna postać warunku brzegowego na prawym kontakcie wygląda następująco:

$$(\mathfrak{T}_N + \mathfrak{T}_N^\dagger) \chi_{N-1} + (\mathbf{H}_N - \mathbf{I}E_F + \mathfrak{T}_N^\dagger \mathbf{A}^+) \chi_N = -\mathfrak{T}_N^\dagger \Gamma^- \quad (37)$$

Definiując

$$\mathbf{H}'_i = \mathbf{H}_i - \mathbf{I}E_F, \quad (38)$$

$$\chi = (\chi_0, \chi_1, \dots, \chi_{N-1}, \chi_N) \quad (39)$$

oraz

$$\mathbf{b} = (\mathfrak{T}_0\Gamma^+, 0, \dots, 0, \mathfrak{T}_N^\dagger\Gamma^-) \quad (40)$$

możemy zapisać problem własny całego układu w postaci równań liniowych $\mathbb{A}\chi = \mathbf{b}$, gdzie

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}'_0 - \mathfrak{T}_0\Lambda^- & \mathfrak{T}_0 + \mathfrak{T}_0^\dagger & \dots & 0 \\ \mathfrak{T}_0 & \mathbf{H}'_1 & \mathfrak{T}_1^\dagger & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \mathfrak{T}_{N-2} & \mathbf{H}'_{N-1} & \mathfrak{T}_{N-1}^\dagger \\ 0 & \dots & \mathfrak{T}_N + \mathfrak{T}_N^\dagger & \mathbf{H}'_N + \mathfrak{T}_N^\dagger\Lambda^+ \end{pmatrix} \quad (41)$$

Aby otrzymać z powyższego równania rozproseniową funkcję falową dla k -tego modu wchodzącego do układu z lewej strony, wystarczy w definicji Γ^+ przyjąć $c_{j,+}^{in} = \delta_{j,k}$ oraz dla każdego j w Γ^- wyzerować wartość $c_{j,-}^{in}$. Reguła ta działa symetrycznie dla prądu płynącego w przeciwnym kierunku (z prawej do lewej), gdzie $c_{j,-}^{in} = \delta_{j,k}$ w Γ^- , a $c_{j,+}^{in} = 0$ dla każdego j w Γ^+ . W celu rozwiązania układu równań liniowych posługiwaliśmy się biblioteką PARDISO [23].

Po rozwiązaniu układu równań można wyznaczyć współczynnik transmisji

$$t_j = c_{j,+}^{out} = \sum_{u=1}^{M+M_e} \mathbf{S}_{ju,+} \langle \chi_{u,+} | \Psi_{N,n}^j \rangle \quad (42)$$

i odbicia $r_j = c_{j,-}^{out}$ (zgodnie z równaniem 21), gdzie j numeruje mody rozproseniowe Ψ^j , $j = (1, 2, \dots, M)$. Na końcu wyznaczana jest całkowita wartość prawdopodobieństwa transmisji T_j dla j -tego modu wchodzącego z lewej strony

$$T_j = \sum_{l=1}^M |t_l|^2 \left| \frac{\phi_{P,l,+}}{\phi_{L,j,+}} \right| \quad (43)$$

poprzez rzutowanie wartości strumienia prądu $\phi_{P,l,+}$ skierowanego w prawo (+) niesionego przez prawy kontakt (P) dla l -tego modu. Wyznaczoną wartość T_j następnie wykorzystujemy do obliczenia konduktancji G układu z formuły Landauera $G = e^2/h \sum_j T_j$.

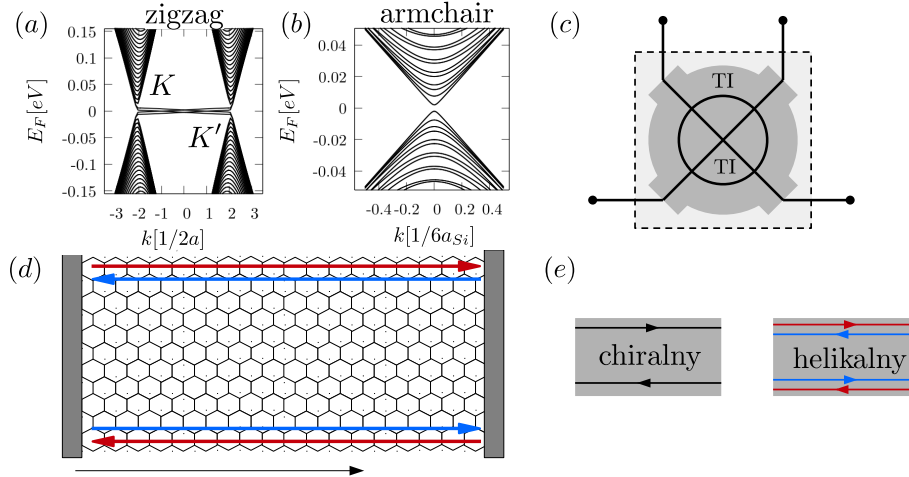
Ze względu na oddziaływanie spin-orbita w systemie, które uwzględnia przeskoki między drugimi sąsiadami $\langle\langle i, j \rangle\rangle$, do obliczeń przyjmowano dwukrotność szerokości podstawowej komórki elementarnej (a nie jedną, jak schematycznie przedstawiono na rys. 2(a)), co nie modyfikuje rozumowania i sposobu implementacji powyższej metody dla silicenu.

2.5 Kwantowy spinowy efekt Halla

Jak wykazali Kane i Mele [9] wprowadzenie czynnika oddziaływania typu spin-orbita opisywanego przez Haldane [10] powoduje powstanie przerwy energetycznej o różnym znaku dla K i K' (czynnik ν_{ij}) dla różnych spinów, o czym decyduje $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ zgodnie z równaniem (6), a stąd, przyłożone w płaszczyźnie wstęgi pole elektryczne wymuszające ruch nośników wyindukuje przepływ prądu spinowego o przeciwnych znakach

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2e} (\mathbf{J}_\uparrow - \mathbf{J}_\downarrow). \quad (44)$$

Przepływ prądu po krawędziach próbki, dla którego różne spiny podróżują w przeciwnych kierunkach nosi nazwę kwantowego spinowego efektu Halla [24]. Helikalne stany brzegowe wbudowane w przerwę energetyczną można zaobserwować w silicenie [11, 12] dla wstęgi typu zigzag, gdzie dla jednowymiarowej projekcji relacji dyspersji doliny K oraz K' są wyraźnie rozróżnialne (Rys. 4(a)). Tak zdefiniowane stany brzegowe nie są chiralne, ponieważ obie krawędzie wstęgi posiadają stany umożliwiające propagację nośników w obu kierunkach (Rys. 4(d)). Dla energii Fermiego z okolicy punktu neutralności ładunkowej transport zachodzi jedynie dla stanów brzegowych, dzięki czemu uzyskujemy w silicenie fazę kwantowego topologicznego izolatora.



Rysunek 4: Relacja dyspersji dla wstęgi typu (a) zigzag z rozróżnionymi dolinami K i K' , oraz (b) armchair, gdzie doliny są nierozróżnialne w $k = 0$. (c) Przykładowy układ formowania obszarów fazy topologicznego izolatora (TI) zewnętrznym polem elektrycznym z zaznaczonymi topologicznie chronionymi kanałami przewodzącymi. Warto zauważyć, że ewentualne defekty w obszarach TI nie mają wpływu na mierzoną konduktancję między kontaktami. (d) Kwantowy spinowy efekt Halla na przykładzie wstęgi silicenu typu zigzag, gdzie kolorem czerwonym (niebieskim) zaznaczono spin \downarrow (\uparrow). (e) rozróżnienie prądów chiralnych i helikalnych

W przypadku wstęgi typu armchair następuje pełne mieszanie dolin i obie doliny K/K' znajdują się w punkcie $k = 0$ (Rys. 4(b)). Powoduje to zanik efektywnego pola magnetycznego pochodzącego od oddziaływania spin-orbita H_{KM} , przez co we wstęgach tego typu nie obserwuje się polaryzacji spinowej prądów na krawędziach oraz efektów topologicznych. Jednakże możliwe jest wyindukowanie stanów helikalnych we wstędze typu armchair (oraz zigzag) poprzez aplikację zewnętrznego niejednorodnego pola elektrycznego [13, 25]. Przerwa energetyczna w silicenie może być kontrolowana przez zewnętrzne pole elektryczne [26–29]. Na granicy odwrócenia znaku zewnętrznych pól elektrycznych wartość E_z przekracza wartość pola krytycznego E_c , dla którego silicen przechodzi z fazy topologicznego izolatora (TI) do fazy pasmowego izolatora (PI). Manipulując polem E_z jesteśmy w stanie tworzyć dwuwymiarowe obszary TI na warstwie silicenu (styczne do obszarów PI), wewnątrz których prąd przepływa jedynie po krawędziach, tworząc chronione topologiczne druty lub kropki kwantowe (Rys. 4(c)).

2.6 Efekt Aharonova-Bohma

Zaproponowany przez Aharonova-Bohma eksperyment [30] przedstawiał wpływ potencjału skalarnego lub wektorowego na przemieszczające się elektrony, które odczuwały obecność pola elektrycznego bądź magnetycznego, nawet jeśli nie znajdowało się ono w obszarze, przez który ten elektron przechodził. Badanie efektu Aharonova-Bohma w aktualnie przeprowadzanych

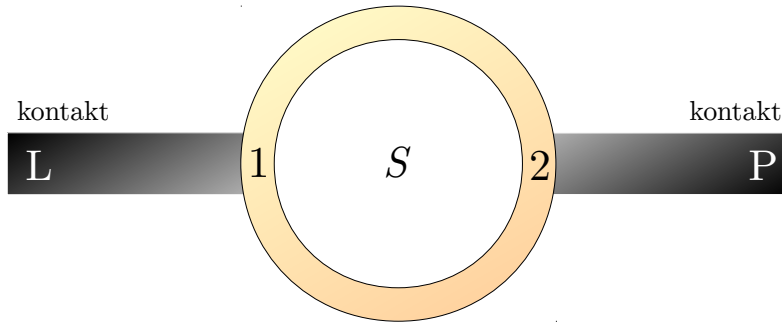
eksperymentach fizyki ciała stałego nieco różni się od tego przeprowadzonego pierwotnie, ze względu na obecne stosowanie głównie jednolitych pól magnetycznych celem wprowadzenia dodatkowej fazy do amplitud prawdopodobieństwa dla poszczególnych ścieżek i obserwację oscylacji konduktancji. W eksperymencie [31] wykonanym dla pierścienia 820 nm wyciętego ze złotej folii zaobserwowano oscylację konduktancji w funkcji strumienia pola magnetycznego

$$G = G_0 + \hat{G} \cos \left(\frac{|e|BS}{\hbar} + \bar{\varphi} \right) \quad (45)$$

dla której wyznaczono okres oscylacji B_p przyrównując różnicę faz do 2π

$$\frac{|e|BS}{\hbar} = 2\pi \Rightarrow B_p = \frac{h}{|e|S}, \quad (46)$$

gdzie S to pole obszaru zamkniętego wewnątrz pierścienia.



Rysunek 5: Poglądowy rysunek przykładowego przewodnika w kształcie pierścienia o polu wewnętrznym S , do którego doprowadzono dwa kontakty - lewy L i prawy P.

Zjawisko to można wytłumaczyć wykorzystując podejście Feynmana do opisu elektrodynamiki kwantowej sumując amplitudy prawdopodobieństwa dla każdej możliwej ścieżki elektronu [32]. Oscylacje pojawiają się dla interferencji dwóch fal przechodzących górną i dolną część pierścienia (rys. 5). Prawdopodobieństwo transmisji dla modu l w kontakcie L do modu p kontaktu P można wyrazić jako

$$T_{pl} = |t_{\nearrow} + t_{\searrow}|^2, \quad (47)$$

gdzie t_{\nearrow} oznacza całkowitą amplitudę wszystkich ścieżek Feynmana dla modu l w punkcie '1' przechodzącego przez górną część pierścienia do modu p w punkcie '2', natomiast t_{\searrow} dla dolnego ramienia pierścienia. Potencjał wektorowy \mathbf{A} wprowadza różnicę faz między t_{\nearrow} oraz t_{\searrow} , co skutkuje pojawieniem się oscylacji w konduktancji. Zmiana amplitudy związanej z przeskokiem między sąsiadującymi atomami $\langle i, j \rangle$

$$\alpha_{ij} = t \exp [ie\mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/\hbar] \quad (48)$$

modyfikuje odpowiednio fazy dla każdej ścieżki

$$t_{\nearrow}(B) \sim t_{\nearrow}(0) \exp [i\varphi_1], \quad (49)$$

$$t_{\searrow}(B) \sim t_{\searrow}(0) \exp [i\varphi_2], \quad (50)$$

gdzie

$$\varphi_1 = \frac{e}{\hbar} \int_{\nearrow} \mathbf{A} d\mathbf{l}, \text{ oraz } \varphi_2 = \frac{e}{\hbar} \int_{\searrow} \mathbf{A} d\mathbf{l}. \quad (51)$$

Różnica między fazami jest proporcjonalna do strumienia pola ograniczonego przez pierścien

$$\varphi_1 - \varphi_2 = \frac{|e|}{\hbar} \oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \frac{|e|}{\hbar} \int_S \mathbf{B} d\mathbf{S} = \frac{|e|BS}{\hbar}, \quad (52)$$

przy założeniu, że pierścien jest wystarczająco cienki i pole zamknięte przez zewnętrzną krawędź nie różni się znacząco od pola ograniczonego wewnętrzną krawędzią. Otrzymujemy zatem

$$T_{pl} = |t_{\rightarrow} + t_{\leftarrow}|^2 = T_{\rightarrow} + T_{\leftarrow} + 2\sqrt{T_{\rightarrow}T_{\leftarrow}} \cos\left(\frac{|e|BS}{\hbar} + \varphi\right), \quad (53)$$

gdzie $T_{\rightarrow} = t_{\rightarrow}^2$, $T_{\leftarrow} = t_{\leftarrow}^2$ natomiast $\varphi = \text{Faza}(t_{\rightarrow} \cdot t_{\leftarrow})$. Przyjmując $T_{\rightarrow} = T_{\leftarrow} \equiv T_0$,

$$T_{pl} = 2T_0 + 2T_0 \cos\left(\frac{|e|BS}{\hbar} + \varphi\right), \quad (54)$$

zatem transmisja dla modu z lewego kontaktu do modu z prawego kontaktu oscyluje wraz ze zmianą pola magnetycznego B .

2.7 Silicen na podłożu InSe

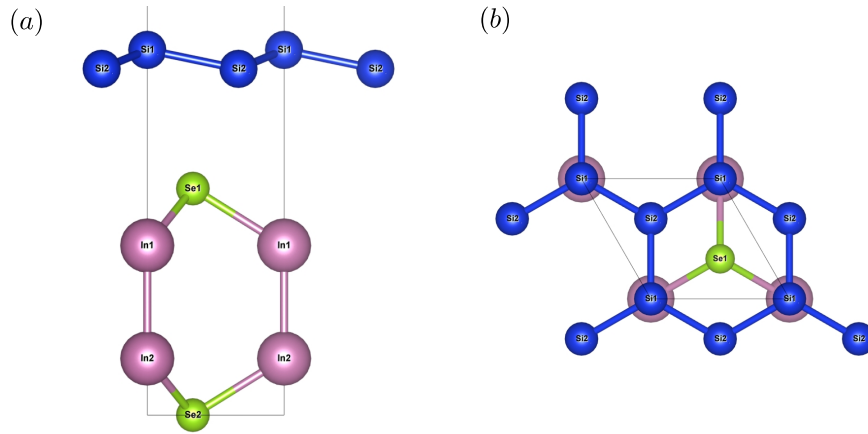
Jednym z elementów badań było wyznaczenie parametrów oddziaływań spin-orbita w sili-cenie stabilizowanym na podłożu selenku indu (InSe) stosując przybliżenie efektywnego Hamil-tonianu dla niskich energii w modelu ciasnego wiązania [8]. InSe powstaje w układzie warstw Se-In-In-Se związanych poprzez słabe oddziaływania van der Waalsa i udało się go zsyntetyzować eksperymentalnie [33, 34] metodami przetwarzania roztworu i wzrostu lameli na podstawniku szablonowym (LLTG z ang. *lamellar ligand templated growth*).

2.7.1 Obliczenia *ab initio*

Do tego celu wykorzystaliśmy komercyjny pakiet *Vienna ab initio simulation package* (VASP) [35] bazujący na teorii funkcjonału gęstości (DFT z ang. *density functional theory*) Kohna-Shama. Program ten wykorzystuje metodę fal uzupełnionych rzutnikami (PAW z ang. *projector-augmented wave*) oraz funkcjonały gradientowe (GGA z ang. *generalized gradient approximation*) w postaci Perdew, Burke, and Ernzerhof (PBE). Użyliśmy pseudopotencjałów PAW_PBE Si 05Jan2001, In 08Apr2002 oraz Se 06Sep2000 ze standardowej bazy należącej do pakietu VASP. Struktura Si/InSe została zaprojektowana w pakiecie VESTA (rys. 6) wzorując się na konfiguracji AB-In_I publikacji [36], która stanowiła referencję dla naszych obliczeń. Przyjęto warstwę 15 Å próżni ponad warstwą silicenu.

Pierwszym krokiem było wykonanie relaksacji struktury, do której użyliśmy siatki punktów k 21x21x1 z włączoną korekcją oddziaływań van der Waalsa (DFT-D2) dla funkcjonału PBE zaproponowanego przez Grimme'a [37] by uwzględnić oddziaływania między warstwami, oraz włączoną korekcją obliczania momentu dipolowego [38]. Energię odcięcia używaną dla rozwinięcia elektronowej funkcji falowej w postaci fal płaskich ustawiono na 500 eV. Precyzję wyznaczenia energii całkowitej ustawiono na wartość 10^{-5} eV. Wybrano metodę sprzężonych gradientów (CG z ang. *conjugate gradient*) do optymalizacji pozycji atomów i wektorów sieci. Pętla relaksacji została kończona gdy maksymalna siła działająca na atom nie przekraczała 0.01 eV/Å. W wyniku otrzymaliśmy komórkę elementarną z siliceniem o stałej sieci $a = 3.886483$ Å oraz kącie nachylenia $\theta = 101.7^\circ$ wyznaczonym między osią pionową a prostą łączącą sąsiadujące atomy krzemu $\langle i, j \rangle$.

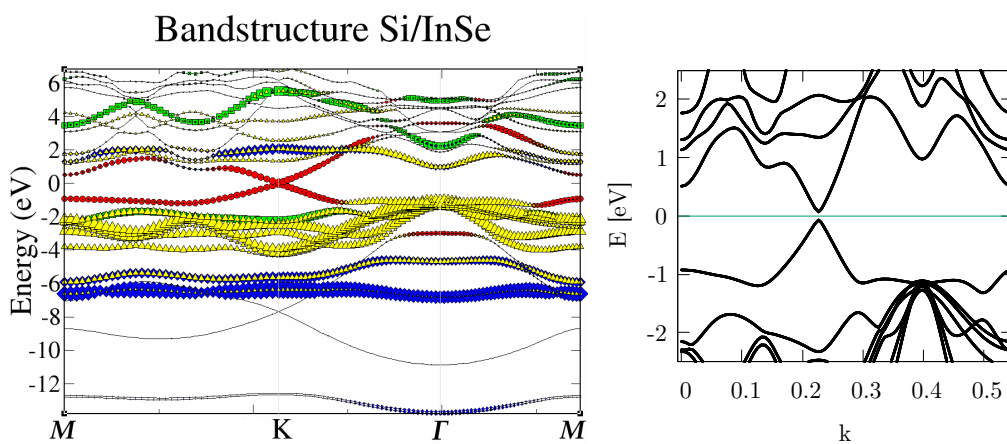
Kolejnym krokiem było uruchomienie pętli iteracyjnej dla metody Hartree-Focka (samo-uzgodnionego pola, SCF z ang. *self-consistent field*) w której zagęszczono sieć punktów k do



Rysunek 6: Schemat komórki elementarnej dla silicenu na podłożu InSe zaprojektowanej w pakiecie VESTA. Widok od boku (a) oraz od góry (b).

warości $37 \times 37 \times 1$ i zablokowano możliwość ruchu jonów. Wyliczone w tym etapie rozkłady ładunków dla konkretnych pozycji atomów posłużą nam w ostatnim kroku do wyznaczenia struktury pasmowej.

Obliczenia struktury pasmowej wykonaliśmy dla 37 punktów na sieci k w każdym segmencie między punktami M-K- Γ -M wyznaczającymi pełną ścieżkę w strefie Brillouina. W parametryzacji programu uwzględniliśmy rzutowanie orbitali dla poszczególnych podpas. Wykres relacji dyspersji uzyskanej z obliczeń przedstawiono na rys. 7. Kolorem czerwonym zaznaczono podpasmo orbitali p_z pochodzące od krzemu, kolorem żółtym p selenu, natomiast zielonym i niebieskim odpowiednio p_z oraz s dla indu. Dla relacji dyspersji wokół punktu K i poziomie Fermiego ($E = 0$) wykonano zbliżenie. Dla wartości $E = \pm 0.2 eV$ jedynie podpasmo p_z pochodzące od silicenu posiada stany przewodzące i wokół tej wartości postaramy się przybliżyć efektywny Hamiltonian ciasnego wiązania. Przerwa energetyczna w tym punkcie wynosi 138.3 meV.



Rysunek 7: Struktura pasmowa dla silicenu na selenku indu (z lewej) z rozróżnieniem podpas pochodzących od poszczególnych orbitali: czerwony Si(p_z), żółty Se(p), zielony In(p_z) oraz niebieski In(s). (z prawej) Przybliżenie na punkt K/K' wokół przerwy energetycznej równej 138.3 meV.

2.7.2 Przybliżenie pierwsze

Rozpatrywany powyżej silicen na podłożu InSe nieznacznie zmienił swoje parametry strukturalne ($a = 3.886483 \text{ \AA}$ wobec 3.86 \AA , oraz $\theta = 101.7^\circ$ jak wolnostojący), więc w pierwszym przybliżeniu możemy uznać, że wyprowadzenie oddziaływań SO wynikające z przedstawionych w rozdziale 2.2 rozważań geometrycznych jest nadal poprawne dla stanów o niskich energiach wokół stożka Diraca (punktu K/K'), gdzie jedynym podpasmem przewodzenia są stany orbitali p_z atomów krzemu, co pokrywa się z otrzymaną relacją dyspersji Si/InSe (rys. 7). Poszerzenie się przerwy energetycznej możemy argumentować pojawieniem się zewnętrznego pola elektrycznego od podłoża InSe, które wprowadzimy w Hamiltonianie (8) jako E_z tak, by efektywna przerwa energetyczna we wstęgach silicenu zrównała się z wartością otrzymaną z DFT.

Przyjmując powyższe założenie, możemy skorzystać z wyprowadzenia efektywnego Hamiltonianu niskich energii w modelu ciasnego wiązania [8] i obliczyć ponownie wartości SO:

$$\lambda_{SO}^{(1)} = \frac{2\xi_0}{18} \frac{\Delta^2 (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma})^2}{V_{sp\sigma}^4} \frac{\cot^2 \theta}{1 + \frac{\cos^2 \theta (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma})^2}{V_{sp\sigma}^2} \left(1 + \frac{2}{9} \frac{\Delta^2}{\sin^2 \theta V_{sp\sigma}^2}\right)} \quad (55)$$

oraz

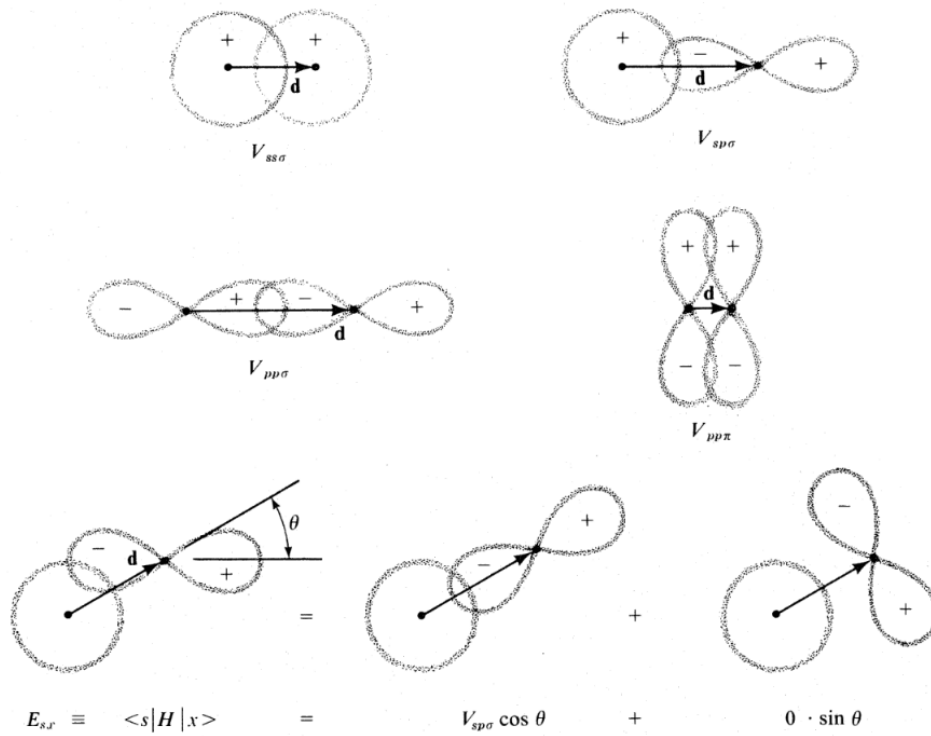
$$\lambda_{SO}^{(2)} = \frac{2\xi_0^2}{36} \frac{-\Delta}{\sin^2 \theta V_{sp\sigma}^2}, \quad (56)$$

gdzie $\xi_0 = 34 \text{ meV}$ to siła samoistnego atomowego oddziaływania spin-orbita, $\Delta = -7.03$ to różnica energii między orbitalami $3s$ a $3p$, natomiast $V_{pp\pi} = -1.93$, $V_{pp\pi} = 2.54$, $V_{pp\pi} = 4.47$, $V_{pp\pi} = -1.12$ to wyrażone w meV parametry wiązań σ oraz π uformowane przez orbitale $3s$ i $3p$ zaczerpnięte z tablic [39]. Schemat obliczania parametrów $V_{ll'm}$ przedstawiono na rysunku 8. Wartość czynnika typu Kane-Mele wynosi

$$\lambda'_{KM} = \lambda_{SO}^{(1)} + \lambda_{SO}^{(2)}. \quad (57)$$

Z faktu, że podłoże nie zmodyfikowało kąta $\theta = 101.7^\circ$ w silicenie, siła oddziaływań typu SO Kane-Mele $\lambda'_{KM} = \lambda_{KM} = 3.973 \text{ meV}$ pozostaje niezmienna. Natomiast posługując się tym samym modelem, oddziaływania typu Rashby można obliczyć ze wzoru

$$\begin{aligned} \lambda_R = & \frac{i\xi_0}{\sqrt{2}} \frac{u_{11}u_{32} - u_{31}u_{12}}{(\epsilon_2 - \epsilon_1)a} [(u_{12}u_{21} + u_{22}u_{11})v_5 + u_{22}u_{21}v_7 + u_{12}u_{11}v_4 - 2u_{32}u_{31}v_1] \\ & + \frac{i\xi_0}{\sqrt{2}} \frac{u_{11}u_{33} - u_{31}u_{13}}{(\epsilon_3 - \epsilon_1)a} [(u_{13}u_{21} + u_{23}u_{11})v_5 + u_{23}u_{21}v_7 + u_{13}u_{11}v_4 - 2u_{33}u_{31}v_1] \\ & + \xi_0 \frac{u_{11}(u_{11}v_3 - u_{21}v_6 - \frac{i}{\sqrt{2}}u_{31}v_2)}{2(V_1 + \epsilon_1)a} - \xi_0 \frac{u_{11}(-u_{11}v_3 + u_{21}v_6 - \frac{i}{\sqrt{2}}u_{31}v_2)}{2(V_1 - \epsilon_1)a}, \end{aligned} \quad (58)$$



Rysunek 8: Schemat przedstawiający cztery rodzaje elementów macierzy dla międzyatomowych oddziaływań orbitali s i p w dwuatomowych molekułach. Rysunek pochodzi z książki [39].

gdzie

$$v_1 \equiv \frac{\sqrt{3}}{8} \sin^2 \theta (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma}) a, \quad (59)$$

$$v_2 \equiv \frac{\sqrt{3}}{4} [\sin^2 \theta (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma}) - 2V_{pp\pi}] a, \quad (60)$$

$$v_3 \equiv \frac{\sqrt{3}}{8} \cos \theta \sin \theta (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma}) a, \quad (61)$$

$$v_4 \equiv \frac{\sqrt{3}}{2} (V_{pp\pi} \sin^2 \theta + V_{pp\sigma} \cos^2 \theta) a, \quad (62)$$

$$v_5 \equiv \frac{\sqrt{3}}{2} a V_{sp\sigma} \cos \theta, \quad (63)$$

$$v_6 \equiv \frac{\sqrt{3}}{4} a V_{sp\sigma} \sin \theta, \quad (64)$$

$$v_7 \equiv \frac{\sqrt{3}}{2} a V_{ss\sigma}, \quad (65)$$

$$(66)$$

natomiast u_{ij} to elementy macierzy

$$U_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha_1} & \frac{1}{\alpha_3} & \frac{1}{\alpha_3} \\ \frac{V_2 \epsilon_1}{\alpha_1 (\Delta - \epsilon_1) V_3} & \frac{V_2 \epsilon_2}{\alpha_2 (\Delta - \epsilon_2) V_3} & \frac{V_2 \epsilon_3}{\alpha_3 (\Delta - \epsilon_3) V_3} \\ \frac{i \epsilon_1}{\alpha_1 V_3} & \frac{i \epsilon_2}{\alpha_2 V_3} & \frac{i \epsilon_3}{\alpha_3 V_3} \end{pmatrix}, \quad (67)$$

przy czym

$$\alpha_i = \sqrt{1 + \left[\frac{V_2 \epsilon_i}{(\Delta - \epsilon_i) V_3} \right]^2 + \frac{\epsilon_i^2}{V_3^2}}, \quad (68)$$

gdzie

$$\epsilon_1 = \Delta \frac{V_3^2}{V_2^2}, \quad (69)$$

$$\epsilon_2 = \Delta \frac{\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4V_2^2}}{2}, \quad (70)$$

$$\epsilon_3 = \Delta \frac{\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4V_2^2}}{2}, \quad (71)$$

oraz

$$V_1 \equiv \frac{3}{2} \sin^2 \theta (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma}), \quad (72)$$

$$V_2 \equiv \frac{3\sqrt{2}}{2} \sin \theta V_{sp\sigma}, \quad (73)$$

$$V_3 \equiv \frac{3\sqrt{2}}{2} \sin \theta \cos \theta (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma}). \quad (74)$$

Podstawiając wartości dla silicenu na podłożu InSe, $a = 3.886483$, $\theta = 101.7^\circ$ i pozostałe wartości tablicowe do powyższych wzorów otrzymujemy wartość $\lambda_R = 0.6882977$ meV wobec poprzedniej wartości 0.7 meV. Zmiana wartości jest niewielka i dla niskich energii, gdzie dominującym czynnikiem jest SO typu Kane-Mele jest pomijalna. Dodatkowym czynnikiem do oddziaływania typu Rashby jest przyczynek wynikający z wprowadzenia zewnętrznego pola elektrycznego, który powyżej wartości krytycznej pola $F_c = 17$ meV/Å [16–18] wynosi $\lambda_R^{ext.} = 10$ μeV (patrz równanie (8)).

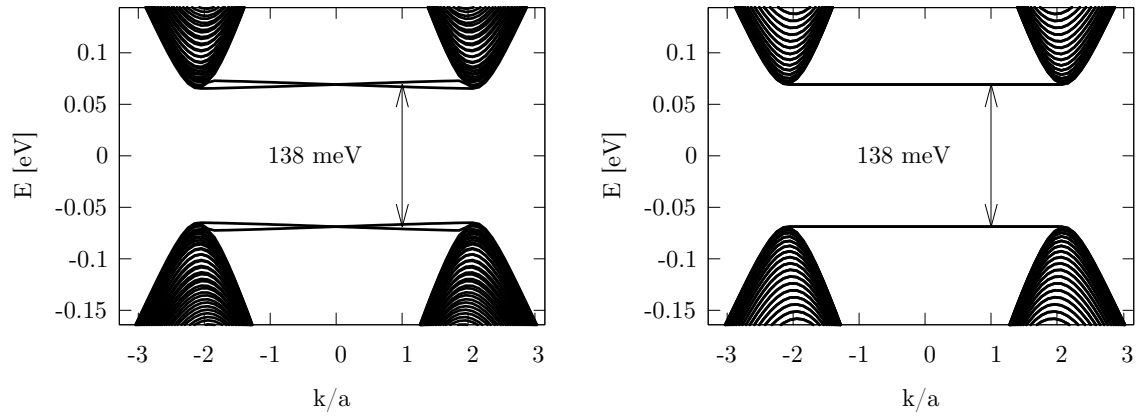
Ostatnim krokiem było dopasowanie pola E_z z równania (8) dla wstęgi silicenu, przy której szerokość przerwy w relacji dyspersji z modelu ciasnego wiązania pokrywa się z szerokością wynikającą z obliczeń DFT. Uzyskano wartość przerwy energetycznej 138 meV we wstędze silicenu typu ziczag dla wartości pola $E_z = 300$ meV/Å (rys. 9). Przyjmujemy więc, że w pierwszym przybliżeniu parametry strukturalne silicenu na podłożu selenku indu nie zmieniają się istotnie by modyfikować siłę oddziaływań spin-orbita, a należy jedynie uwzględnić silne pole elektryczne pochodzące od podłoża.

2.7.3 Przybliżenie drugie

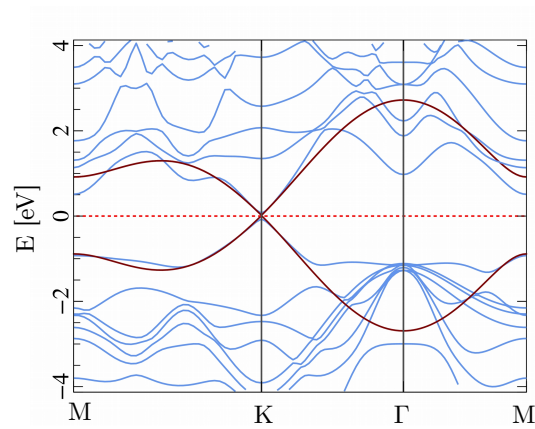
Drugą metodę, którą wykorzystaliśmy do dopasowania parametrów ciasnego wiązania była metoda Slater-Koster [40] zaimplementowana w pakiecie TBStudio [41]. Danymi wejściowymi była struktura pasmowa otrzymana z rachunków DFT oraz układ komórki elementarnej zapisany w pliku wynikowym po relaksacji struktury. Ze względu na interesujący nas obszar stanów ze stożka Diraca potrzebnych do badań transportu elektronowego w silicenie wykorzystaliśmy jedynie dopasowanie do orbitali p_z tworzące te stany. Wynikiem dopasowania jest macierz Hamiltonianu

$$H_{fit} = \begin{pmatrix} 0.01495100 & 0.90234193 & 0.00000000 & 0.00000000 \\ 0.90234193 & 0.01495100 & 0.00000000 & 0.00000000 \\ 0.00000000 & 0.90234130 & 0.00000000 & 0.90234191 \\ 0.00000000 & 0.00000000 & 0.00000000 & 0.00000000 \end{pmatrix} \quad (75)$$

Powyższy Hamiltonian (75) nie uwzględnia oddziaływań spin-orbita i opisuje jedynie proste przeskoki między sąsiednimi atomami $\langle i, j \rangle$ na sieci silicenu z rozróżnieniem spinu elektronu.



Rysunek 9: Relacja dyspersji dla wstęgi typu zigzag silicenu z dopasowanym polem E_z symulującym podłoże selenku indu uwzględniając oddziaływania typu SO (z lewej) oraz zaniedbując oba czynniki SO (z prawej).



Rysunek 10: Wynik dopasowania podpasma dla orbitala p_z w programie TBStudio (linia czerwona) do struktury pasmowej uzyskanej z obliczeń DFT dla silicenu na podłożu InSe (linia niebieska).

3 Streszczenia artykułów

Przedmiotem badań wszystkich opisywanych poniżej artykułów są jednoelektronowe właściwości transportowe ładunku i spinu w obecności oddziaływań spin-orbita typu Rashby i Kane-Mele w silicenie, wraz z próbą wykorzystania poszczególnych efektów kwantowych wynikających z tychże oddziaływań (np. spinowy kwantowy efekt Halla wywołujący stan topologicznego izolatora 2D) do tworzenia opartych na tym materiale urządzeń aktywnych spinowo - atrakcyjnego pola badań dla rozwijającej się dziedziny nowej elektroniki i obliczeń kwantowych. Zaproponowane urządzenia nadają się do eksperymentalnej implementacji i mogą służyć do pomiarów zjawisk charakterystycznych dla układów kwantowych, których liczbowe wartości dla silicenu przewidują nasze obliczenia, jednocześnie tłumacząc źródło ich pochodzenia w oparciu o model ciasnego wiązania.

A1: Electron spin inversion in gated silicene nanoribbons

Celem pracy [A1] było wykorzystanie możliwości modyfikowania szerokości przerwy energetycznej (poprzez lokalne wprowadzenie zewnętrznego pola elektrycznego w obszarze bramkowania) do kontrolowania prędkości precesji spinu w płaszczyźnie wstęgi wokół indukowanego przez oddziaływania spin-orbita efektywnego pola magnetycznego.

Dla wstęgi typu zigzag w obszarze bramkowania o potencjale efektywnym $E_z = 100 \text{ mV}/\text{\AA}$ pierwsze podpasma przewodzenia o niskiej energii Fermiego są silnie podatne na oddziaływanie spin-orbita typu Kane-Mele [9] i rzut średniej wartości spinu na oś z , $\langle S_z \rangle$ wynosi ± 1 w jednostkach $\frac{\hbar}{2}$. Dla wyższych podpasm efektywne pole magnetyczne staje się większe wzdłuż osi prostopadłej do ruchu nośników w płaszczyźnie wstęgi za sprawą oddziaływania typu Rashby, aż do poziomu Fermiego, ponad którym SO typu Rashby jest dominujący, a czynnik Kane-Mele jest zanedbywalnie mały i $\langle S_z \rangle = 0$. W przypadku brzegu typu armchair następuje pełne mieszanie dolin i wypadkowe efektywne pole magnetyczne pochodzące z czynnika Kane-Mele dla obu podsieci znosi się, a w systemie pozostaje aktywne jedynie pole z oddziaływania SO typu Rashby (rys. 11(a)).

Rozważono transport elektronu o spinie zorientowanym wzdłuż osi z dla wstęgi typu armchair, oraz wzdłuż dwóch osi, z i x dla brzegów typu zigzag, każdorazowo korzystając z pierwszego dostępnego pasma przewodzenia w obszarze bramkowania. Akumulacja kąta precesji spinu niezależnie od konfiguracji wynosi [32]

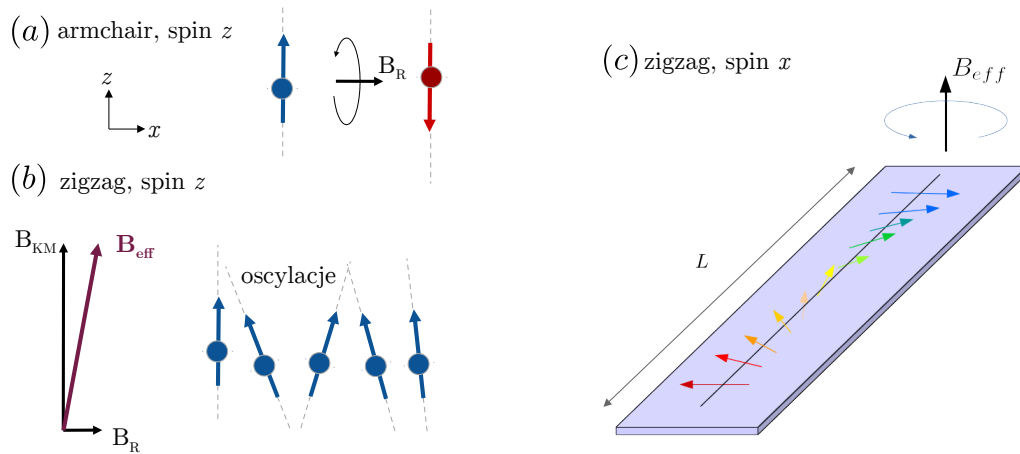
$$\Delta\varphi = \Delta k L, \quad (76)$$

gdzie Δk to szerokość rozszczepienia spinowo spolaryzowanych podpasm biorących udział w transporcie, natomiast L to długość bramki.

W przypadku wstęgi typu armchair wartość Δk jest rzędu $0.005 \frac{\sqrt{3}}{6a}$ nawet dla ekstremalnych stosowanych pól $E_z = 1 \text{ V}/\text{\AA}$ [26, 27], przez co długość bramki L potrzebna do inwersji spinu o kąt π wynosi ponad 800 nm, co jest to niekorzystne z punktu aplikacyjnego ze względu na bardzo duży rozmiar.

W przypadku brzegu typu zigzag wstrzyknięty elektron o spinie zorientowanym wzdłuż osi z dokonuje precesji wokół składowej B_x pochodzącej z czynnika Rashby, natomiast precesja jest blokowana przez silne efektywne pole o składowej B_z z czynnika Kane-Mele, więc przy tej konfiguracji inwersja spinu jest niemożliwa (rys. 11(b)). By tego uniknąć w warunkach początkowych uwzględniono elektron o spinie spolaryzowanym w płaszczyźnie wstęgi wzdłuż osi x (rys. 11(c)). Dla takiej parametryzacji istnieje możliwość doboru wartości Δk w stanach krawędziowych poprzez ustawienie odpowiedniej energii Fermiego E_F (Fig. 6 [A1]) lub zmianę szerokości przerwy energetycznej poprzez E_z . Dla pola rzędu $E_z = 100 \text{ mV}/\text{\AA}$ osiągnięto wartość $\Delta k \approx \frac{1}{2a}$ dzięki czemu długość bramki L może być bardzo mała (rzędu kilku nanometrów). Przedstawiony model takiego urządzenia może działać zatem jako tranzystor spinowy o długościach obrotu spinu

rzędu kilku nanometrów z wykorzystaniem stanu topologicznego izolatora, co jest atrakcyjne z punktu zastosowań w spintronice.



Rysunek 11: Schematyczny rozkład efektywnego pola magnetycznego pochodzącego od oddziaływań spin orbita i ich wpływ na precesję spinu w przypadkach: krawędzi typu armchair i spinu elektronu ustawionego na wejściu wzdłuż osi z (a), wstęgi typu zigzag dla spinu w osi z (b) oraz x (c).

W pracy przedstawiono także model eksperymentalnego układu pomiarowego dla pełnej inwersji spinu z wykorzystaniem efektu bliskości ferromagnetyka, który filtruje dla zadanej energii Fermiego E_F odpowiednie stany polaryzacji spinowej elektronu we wstędze silicenu względem własnego namagnesowania. Stosując na brzegach układu dwie przeciwnie namagnesowane w osi x bramki z ferromagnetyków uzyskamy konduktancję $G = 1$ wyrażoną w jednostkach $G_0 = e^2/h$ tylko dla transportu, w którym obszar L dopasowano do Δk tak, że $\Delta\varphi = \pi$, czyli zachodzi pełny obrót spinu.

Ostatnim etapem pracy było zbadanie wpływu niejednorodności pola elektrycznego E_z na transport elektronowy z inwersją spinu. Zaburzenia pola zostały zamodelowane poprzez potencjał w postaci dwuwymiarowego rozkładu Gaussa o amplitudzie rzędu 20 meV i wariancji równej stałej sieci a . Wykazano, że ich wpływ na transport jest nieistotny, o ile zaburzenie to nie znajduje się w obszarze krawędzi wstęgi, którymi przepływa prąd, co potwierdza, że układ pracuje w stanie topologicznego izolatora.

A2: *Electron interferometry and quantum spin Hall phase in silicene*

W artykule [A2] zaprojektowano układ detekcji stanu topologicznego izolatora w warunkach kwantowego spinowego efektu Halla (QSHE z ang. *quantum spin Hall effect*) oraz stanu trywialnego transportu w silicenie. Schemat urządzenia oparto na konfiguracji z dwoma ścieżkami otwartymi dla nośników prądu i spinu: interferometru Younga oraz interferometru Aharonova-Bohma.

W pierwszej konfiguracji, dla doświadczenia Younga, wstęga silicenu o grubości 6.5 nm z kontaktem wejściowym (kanałem doprowadzającym) rozdziela się na dwa osobne równoległe ramiona tej samej grubości i długości, oddalone od siebie o 7 nm, które następnie łączą się z półotwartym obszarem silicenu tworząc szczeliny prądowe (Fig. 1 [A2]). Do opisu kształtu rozgałęzienia ścieżek użyto odbitej w pionie funkcji $\arctan(x)$. Na krawędzie półotwartego obszaru narzucono kwazi-nieskończone warunki brzegowe umożliwiając swobodny odpływ prądu. Detektor o szerokości 6.5 nm został ustawiony w odległości 32 nm od granicy szczelin i zamodelowany został jako kontakt wyjściowy układu z periodycznymi warunkami brzegowymi. Do

każdego ramienia dołożono bramki wprowadzające zewnętrzne prostopadłe pole elektryczne, dzięki którym możemy regulować przerwę energetyczną w obszarach pod bramkami [26–29], a dla dostatecznie wysokiego potencjału, całkowicie uniemożliwić przepływ prądu przez górne i/lub dolne ramię (zamykać i otwierać szczelinę), gdyż dla rozpatrywanej energii Fermiego nie będzie stanów przewodzących (obszar przerwy energetycznej).

W drugiej konfiguracji, dla pierścienia kwantowego, zastosowano parametry jak powyżej, natomiast zamiast obszaru półotwartego (i detektora), cała struktura została symetrycznie odbita wzdłuż osi pionowej na poziomie szczelin, przez co ramiona łączą się w jedną wstęgę grubości 6.5 nm tworząc zamkniętą pętlę z dwoma kontaktami z lewej i prawej strony.

W warunkach kwantowego spinowego efektu Halla prąd spinowo spolaryzowany przepływa przez krawędź górnego (dolnego) ramienia układu dla spinu zorientowanego w górę (dół), natomiast dla transportu trywialnego gęstość rozproszeniowa obejmuje pełną szerokość ramienia i następuje mieszanie prądu spinowego. Badając konduktancję mierzoną na kontakcie wejściowym i detektorze (kontakcie wyjściowym) w konfiguracji dwuszczelinowej (pierścieniu kwantowym) w funkcji amplitudy zewnętrznego prostopadłego pola magnetycznego, jesteśmy w stanie rozpoznać w jakim stanie transportu znajduje się układ.

W pracy wykazano, że dla stanu topologicznego izolatora w pierwszej konfiguracji, charakterystyka konduktancji w funkcji pola magnetycznego $G(B_z)$ zawiera ostre piki spowodowane interferencją funkcji falowej jednego spinu na pętli (obszarze) między ramionami. Związanie prądu spinowego krążącego wokół wyciętego obszaru zwiększa szansę rozproszenia między szczelinami, a co za tym idzie, wzrasta prawdopodobieństwo transmisji do detektora widoczne w postaci pików na charakterystyce $G(B_z)$. Prąd dla spinu o przeciwnym znaku przepływa zewnętrzną krawędzią ramienia do obszaru półotwartego, a jego szansa na przetransmitowanie do detektora jest znikoma. Zwiększając napięcie na bramkach i odcinając przepływ prądu na górnym (dolnym) ramieniu, obserwujemy wzrost konduktancji dla prądu o spinie góra (dół) co spowodowane jest znalezieniem się danego prądu krawędziowego bliżej środka układu i detektora. W stanie topologicznego izolatora nie zachodzi interferencja Younga ponieważ do każdej szczeliny trafia prąd spolaryzowany spinowo w innym kierunku. Poza obszarem QSHE dla transportu trywialnego prąd przepływa pełną szerokością ramion, a w funkcji $G(B_z)$ widać gładkie oscylacje o okresie ΔB charakterystyczne dla interferencji Aharonova-Bohma dla powierzchni odpowiadającej wartości wyciętego obszaru między ramionami.

To samo badanie zostało przeprowadzone dla konfiguracji pierścienia kwantowego, gdzie w stanie topologicznego izolatora obserwuje się ostre wgłębienia (dipy z ang. *dips*) na wykresie konduktancji w funkcji B_z , stowarzyszone z rezonansem jednego prądu spinowego na wewnętrznym obszarze pierścienia, podczas gdy prąd przeciwnego spinu swobodnie przepływa do kontaktu wyjściowego. Wgłębienia dla spinu góra/dół występują naprzemiennie jako spadki konduktancji z $2 G_0$ do $1 G_0$. Dla transportu trywialnego, analogicznie do układu dwuszczelinowego, obserwuje się gładkie oscylacje Aharonova-Bohma o okresie ΔB odpowiadającemu powierzchni środka pierścienia.

Przedstawione w powyższej pracy wyniki mogą służyć do identyfikacji stanu topologicznego w eksperymencie pomiaru konduktancji dla struktury silicenu poprzez aplikację prostopadłego zewnętrznego pola magnetycznego.

A3: Topologically protected wave packets and quantum rings in silicene

W pracy [A3] zbadano dynamikę pakietów falowych dla dwukońcówkowego układu kwantowego pierścienia zdefiniowanego przez stany chiralne uformowane na przecięciu się zewnętrznych pól elektrycznych (dodatniego potencjału na podsieci A i ujemnego na podsieci B przechodzącego w ujemny na podsieci A i dodani na podsieci B (Fig. 4 [A3])). Wykazano, że ruch pakietów wzdłuż tych linii przecięć jest niezaburzony, a czas przebywania krótkiego pakietu falowego we-

wnątrz prawego i lewego ramienia pierścienia może być kontrolowany przez strumień zewnętrznego pola magnetycznego. Wchodzący w skład rozprawy rozdział III F przedstawia obliczenia dla stacjonarnego problemu kwantowego rozpraszania w tym układzie.

Do rozwiązania kwantowomechanicznego problemu rozpraszania posłużono się metodą kwantowej granicy przewodzącej w modelu ciasnego wiązania. Zbadano rozkład geometryczny gęstości rozproszeniowej i prądu w funkcji zewnętrznego prostopadłego pola magnetycznego B dla niezaburzonego układu. Obsadzenie ramion pierścienia przez gęstość rozproszeniową jest zmienna i oscyluje w zależności od pola B z okresem charakterystycznym dla oscylacji Aharonova-Bohma. Wyniki te zgadzają się z rozwiązaniem równania Diraca dla bardzo długich pakietów falowych, które można przybliżyć falami płaskimi wykorzystywanymi w naszej metodzie numerycznej.

Wprowadzając do układu zaburzenie w postaci silnie zlokalizowanego potencjału nad jednym z atomów w obszarze kanału przewodzącego dokonano obliczenia wartości rozpraszania wstecznego R (prawdopodobieństwa odbicia). W zewnętrznym polu B funkcja R również oscyluje z okresem typowym dla efektu Aharonova-Bohma, ale okres tych oscylacji jest dwukrotnie wyższy niż w przypadku rozwiązania równania Diraca ze względu na asymetrię transportu elektronu przez lewe i prawe ramię pierścienia dla bardzo długiego pakietu falowego.

A4: Aharonov-Bohm oscillations of four-probe resistance in topological quantum rings in silicene and bilayer graphene

Badania w pracy [A4] dotyczą propozycji eksperymentalnego pomiaru efektu Aharonova-Bohma bez rozpraszania w topologicznym pierścieniu kwantowym zdefiniowanym elektrostatycznie (Fig. 1 [A4]). Związanie prądów chiralnych na krawędziach zmiany znaku zewnętrznego pola elektrycznego jest wynikiem działania kwantowego spinowego efektu Halla przedstawionego w rozdziale 2.5.

Zaprojektowano układ czterokońcówkowy do pomiaru rezystancji w dwóch konfiguracjach: mierząc prąd i napięcie pomiędzy dwoma sąsiadującymi (dla R') oraz przeciwległymi (dla R) kontaktami (Fig. 3 [A4]), dla których wyprowadziliśmy równania na macierze rezystancji [32], oparte o wyliczenia konduktancji z formuły Landauera. Analizując strukturę pasmową każdego z czterech kontaktów można zidentyfikować stany dolin K i K' biorące udział w transporcie oraz określić ich kierunek przepływu prądu dla ustalonego poziomu Fermiego (Fig. 2 [A4]). Prawdopodobieństwo transmisji elektronu do przeciwległego kontaktu jest równe 0, ponieważ dla stanów krawędziowych dolina K' (K) w kontaktach typu armchair (zigzag) po obu stronach niesie prąd wpływający do pierścienia, a z faktu, iż nie zachodzi rozpraszanie międzypolnowe wynika, że nie może on odpłynąć inną drogą jak sąsiadującymi kontaktami typu zigzag (armchair), w których K' (K) może odprowadzić prąd elektronowy z układu. Pojawienie się dodatkowych stanów krawędziowych w paśmie walencyjnym (przewodnictwa) dla wstęgi zigzag ma ścisły związek z ujemnym (dodatnim) znakiem pola elektrycznego odłożonego na atomach tworzących brzeg wstęgi.

Wraz ze wzrostem zewnętrznego pola magnetycznego prostopadłego do układu pojawiają się oscylacje w mierzonej rezystancji dla obu konfiguracji. Wartość rezystancji R' oscyluje między 0 a $0.25 R_K$, gdzie $R_K = h/e^2$ to stała von Klitzinga, natomiast R (zdefiniowane dla przeciwległych kontaktów) ma wartości między -0.5 a $0.5 R_K$, którego znak odpowiada zgodnej/przeciwnej polaryzacji mierzonej przez napięcie między pobocznymi kontaktami. Obliczenia $R(B)$ oraz $R'(B)$ wykonano dla dwóch różnych energii Fermiego, $E_{F1} = 20$ meV oraz $E_{F2} = 6.43$ meV. W obu przypadkach dla pola $B_z = [0; 40]$ T obliczono transformatę Fouriera w celu wyznaczenia okresu oscylacji. Amplitudy pików dla argumentu częstotliwości f_B odpowiadają okresom charakterystycznym w interferencji Aharonova-Bohma, dla wielokrotności

pola powierzchni ćwiartek pierścienia kwantowego $\frac{n}{4}$, dla $n = 1, 2, 3, 4$. Wyniki otrzymane z transformaty Fouriera są zgodne z wyliczonymi mapami rozptyłu prądów dla kilku charakterystycznych wartości pola B_z , gdzie następuje związanie prądów chiralnych wokół n -krotności $1/4$ obszaru pierścienia wyznaczonych przez stany topologiczne.

Przeprowadzono analogiczne obliczenia dla dwuwarstwowego grafenu, gdzie również zaobserwowano interferencję Aharonova-Bohma, a wyjaśnienie zachodzących procesów jest identyczne jak w przypadku silicenu.

S1: Effective Landé factors for an electrostatically defined quantum point contact in silicene

Motywacją do pracy nad badaniami efektywnego czynnika Landégo w silicenie [S1] stanowią ostatnio opublikowane badania eksperymentalne kwantowego kontaktu punkowego (QPC z ang. *quantum point contact*) dla struktury dwuwarstwowego grafenu [42, 43] (BLG z ang. *bilayer graphene*), gdzie wykazano, że czynnik SO typu Kane-Mele wzmacnia rozszczepienie Zeemana dla jednej doliny, natomiast osłabia dla drugiej. W przeprowadzonych przez nas rachunkach spisanych w pracy [S1] dla silicenu zaobserwowaliśmy ten sam efekt oraz wytłumaczyliśmy zasadę jego powstawania w oparciu o model ciasnego wiązania.

Zaprojektowany przez nas układ składa się ze wstęgi silicenu szerokości 200 nm z dwoma bramkami wprowadzającymi potencjał $\pm V_g$ na podsieciach A/B ustawionymi w środku długości systemu (Fig. 1 [S1]). Rozkład potencjału bramek zamodelowano funkcją rozkładu Gaussa 2D [44] o odchyleniu standardowym 40 nm w kierunku x oraz y . Wraz ze wzrostem napięcia na bramkach zżęza się kanał przewodzenia pośrodku wstęgi formując QPC, którego szerokością możemy dowolnie sterować dobierając odpowiednie V_g .

W obliczeniach przeprowadzono standardową eksperymentalną procedurę wyznaczania efektywnego czynnika Landégo g^* , polegającą na: (1) wyznaczeniu współczynnika konwersji napięcia bramki V_g do zmiany energii stanów przewodnictwa w środku wstęgi, poprzez aplikację różnicy napięć $\pm \frac{V_{SD}}{2}$ na kontaktach brzegowych (S źródło i drenie D) i mierząc nachylenia krzywych na mapach transkonduktancji $\frac{dG}{dV_g} = \frac{d^2 I(V_{SD})}{dV_{SD} dV_g}$ (Fig. 6 [S1]) dla poszczególnych modów m według wzoru

$$\xi_m = \frac{1}{2} \frac{dV_{SD}}{dV_g}, \quad (77)$$

a następnie dokonując pomiaru konduktancji w zewnętrznym polu magnetycznym $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ wyznaczając (2) nachylenie krzywej $\frac{d(\Delta V_g(B))}{dB}$ odpowiadające szybkości rozszczepienia podpasem spinowych na mapach transkonduktancji w funkcji amplitudy pola \mathbf{B} . Na końcu wyznaczamy wartość g^* ze wzoru

$$g_m^* = \frac{1}{\mu_B} \frac{d(\Delta V_g(B))}{dB} \xi_m, \quad (78)$$

gdzie μ_B to magneton Bohra.

Wyznaczona została relacja dyspersji dla profilu potencjału elektrycznego ze środka układu poprzez zastosowanie periodycznych warunków brzegowych. W przypadku wstęgi zigzag doliny K oraz K' są rozróżnialne, a oddziaływania SO typu Kane-Mele rozsuwają podpasma o przeciwnych spinach w dwóch różnych kierunkach [9, 10] - stan spinu góra (dół) ma niższą (wyższą) energię w dolinie K (K'). Wynik ten jest istotny i niezbędny w identyfikacji poszczególnych prążków na mapach transkonduktancji celem wyznaczenia g^* . Dla wstęgi typu armchair relacja dyspersji ze środka wstęgi nie pozwala wprost na identyfikację dolin gdyż zachodzi ich pełne mieszanie. Ponadto kierunek rozsunęcia podpasem spinowych jest odwrotny do tego zaobserwowanego w brzegach typu zigzag, co wynika z rozważań symetrii układu i przeciwnego znaku czynnika ν_{ij} opisanego w równaniu (6).

Dla przypadku pól w płaszczyźnie wstęgi B_{\parallel} , gdzie dodatkowo oddziaływanie SO jest całkowicie pominięte w obliczeniach, odczytane z mapy transkonduktancji współczynniki dla trzech pierwszych podpasów g_1^* , g_1^* oraz g_3^* wynoszą odpowiednio 2.1, 2.2 oraz 2.1 i nieznacznie różnią się od $g = 2$ dla elektronu w silicenie. Dla B_{\perp} i braku SO wykres transkonduktancji nie jest odpowiednio dokładny by zarejestrować minimalne rozsuniecie prążków pochodzących od podpasów spinowych, ale posługując się relacją dyspersji środka układu dla kilku wartości B_z można wyliczyć $g^* = 2$ co potwierdza zgodność wykorzystywanej metody obliczeniowej z badaną fizyką.

W ostatnim etapie badań uwzględniono pełny Hamiltonian ze wszystkimi oddziaływaniami SO i rozpatrzono układ dla pola B_{\parallel} , oraz B_{\perp} z osobna. Otrzymane wyniki są zapisane w tabeli 1. Dla B_{\parallel} następuje tłumienie rozszczepienia Zeemana, a różnice między armchair i zigzag wynikają z innego kierunku działania lokalnego pola magnetycznego pochodzącego z czynnika Kane-Mele. Dla B_{\perp} różnice między armchair i zigzag można wytłumaczyć analogicznie jak poprzednio, natomiast w tym przypadku następuje wzmocnienie Zeemanowskiego rozszczepienia podpasów spinowych i związane jest to ze znaczącym wkładem wprowadzonej fazy Peierlsa, uwzględniającej oddziaływania pola skalarnego \mathbf{A} ze strukturą, opisaną równaniem (9).

Tabela 1: Efektywne czynniki Landégo g^* dla wstęgi silicenu typu armchair oraz zigzag. Tabela pochodzi z pracy [S1].

SO on	g_1^*	g_2^*	g_3^*
$B_{\parallel zz}$	1.2	0.78	0.45
$B_{\parallel a}$	1.17	0.92	0.32
$B_{\perp zz}$	5.8	13.3	-
$B_{\perp a}$	2.5	14.0	-

4 Podsumowanie i wnioski

W cyklu prac tworzących rozprawę, wykorzystując model ciasnego wiązania, przedstawiono wpływ oddziaływania spin-orbita typu Rashby i Kane-Mele na transport elektronowy, z uwzględnieniem oddziaływania struktury silicenu z zewnętrznym polem magnetycznym i elektrycznym. Zaproponowano konkretne projekty układów i pomiarów eksperymentalnych, które mogą służyć do badań przewidzianych efektów kwantowych lub być wykorzystane jako elementy w dziedzinie spintroniki i obliczeń kwantowych. Wykonano także obliczenia DFT warstwy silicenu na podłożu selenku indu (Si/InSe) i dokonano oszacowania parametrów Hamiltonianu dla orbitali p_z w modelu ciasnego wiązania.

Przedstawiono teoretyczny model tranzystora spinowego z układem pomiarowym, wykorzystujący efekt bliskości namagnesowanego w płaszczyźnie wstęgi ferromagnetyka do filtrowania elektronów. Sterowanie prędkością precesji spinu odbywa się poprzez dobór odpowiedniego napięcia na bramce, zwiększając przerwę energetyczną i przenosząc stany krawędziowe w paśmie konduktancji do poziomu Fermiego, przez co kontrolujemy różnicę wartości między wektorami falowymi modu wchodzącego i wychodzącego. Wykorzystując efekty transportu krawędziowego, pochodzącego od oddziaływań SO typu Kane-Mele, możemy skonfigurować układ do pełnego obracania spinu w płaszczyźnie wstęgi na odległościach rzędu kilku nanometrów.

Zaprojektowano interferometr Younga i Aharonova-Bohma służący do detekcji fazy topologicznego izolatora lub fazy trywialnego transportu poprzez pomiar konduktancji w funkcji zewnętrznego prostopadłego pola magnetycznego. Ostre piki pojawiające się w charakterystyce świadczą o transporcie krawędziowym (stanie topologicznym), natomiast gładkie oscylacje dopasowane do okresu interferencji Aharonova-Bohma świadczą o transporcie trywialnym, gdzie gęstość rozproszeniowa obejmuje pełną szerokość kanału (wstęgi).

W dwóch pracach zbadano cechy prądów chiralnych w zewnętrznym polu magnetycznym uformowanych na krawędziach zmiany znaku pola elektrycznego pochodzącego z obszarów bramkowania silicenu. Przedstawiono eksperymentalny układ czterokońcówkowego pomiaru rezystancji do badania efektu Aharonova-Bohma bez rozpraszania. Mierzona konduktancja oscyluje z okresem charakterystycznym dla n -krotności ćwiartek pola powierzchni pierścienia.

Ostatnie badania dotyczyły wyznaczenia efektywnego czynnika Landégo g^* dla silicenu w polu magnetycznym zorientowanym równolegle i prostopadle do wstęgi, przy zastosowaniu standardowej procedury eksperymentalnej, opierającej się o pomiar transkonduktancji w kwantowym kontakcie punktowym. Zaobserwowano tłumienie rozszczepienia Zeemanowskiego dla pól równoległych, ponieważ czynnik Kane-Mele wprowadza silne lokalne pole magnetyczne ustawiające spin elektronu wzdłuż osi z , przez co polaryzacja wzdłuż x/y jest utrudniona. Ten sam czynnik Kane-Mele wprowadza stałe rozszczepienie podpasm spinowych na mapach transkonduktancji dla pola prostopadłego do wstęgi, a ponadto wprowadza rozróżnienie podsieci A/B, które mają przeciwne znaki we wstęgach typu armchair/zigzag. Powoduje to znaczne (nieznaczne) wzmocnienie czynnika g^* dla pierwszego podpasma wstęgi zigzag (armchair). Głębsze podpasma, dla których oddziaływanie SO typu Kane-Mele nie jest już tak silne wykazują większe wzmocnienie efektu rozszczepienia Zeemana.

Literatura

- [1] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, and D. Akinwande, “Silicene field-effect transistors operating at room temperature,” *Nature Nanotechnology* **10**, 227–231 (2015).
- [2] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162 (2009).
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *Science* **306**, 666–669 (2004).
- [4] E. A. Laird, F. Kuemmeth, G. A. Steele, K. Grove-Rasmussen, J. Nygård, K. Flensberg, and L. P. Kouwenhoven, “Quantum transport in carbon nanotubes,” *Rev. Mod. Phys.* **87**, 703–764 (2015).
- [5] M. Gmitra and J. Fabian, “Graphene on transition-metal dichalcogenides: A platform for proximity spin-orbit physics and optospintronics,” *Phys. Rev. B* **92**, 155403 (2015).
- [6] M. Gmitra, D. Kochan, P. Högl, and J. Fabian, “Trivial and inverted dirac bands and the emergence of quantum spin Hall states in graphene on transition-metal dichalcogenides,” *Phys. Rev. B* **93**, 155104 (2016).
- [7] S. Irmer, T. Frank, S. Putz, M. Gmitra, D. Kochan, and J. Fabian, “Spin-orbit coupling in fluorinated graphene,” *Phys. Rev. B* **91**, 115141 (2015).
- [8] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, “Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin,” *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [9] C. L. Kane and E. J. Mele, “Quantum spin Hall effect in graphene,” *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).

- [10] F. D. M. Haldane, “Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the “parity anomaly”,” *Physical Review Letters* **61**, 2015–2018 (1988).
- [11] C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, “Quantum spin Hall effect in silicene and two-dimensional germanium,” *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
- [12] H. Pan, Z. Li, C.-C. Liu, G. Zhu, Z. Qiao, and Y. Yao, “Valley-polarized quantum anomalous Hall effect in silicene,” *Phys. Rev. Lett.* **112**, 106802 (2014).
- [13] M. Ezawa, “Valley-polarized metals and quantum anomalous Hall effect in silicene,” *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055502 (2012).
- [14] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, and S. Ciraci, “Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium,” *Phys. Rev. Lett.* **102**, 236804 (2009).
- [15] A. Kara, H. Enriquez, A. P. Seitsonen, L. L. Y. Voon, S. Vizzini, B. Aufray, and H. Oughadou, “A review on silicene — new candidate for electronics,” *Surface Science Reports* **67**, 1–18 (2012).
- [16] D. N. Sheng, Z. Y. Weng, L. Sheng, and F. D. M. Haldane, “Quantum spin-Hall effect and topologically invariant Chern numbers,” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 036808 (2006).
- [17] E. Prodan, “Robustness of the spin-Chern number,” *Phys. Rev. B* **80**, 125327 (2009).
- [18] W.-K. Tse, Z. Qiao, Y. Yao, A. H. MacDonald, and Q. Niu, “Quantum anomalous Hall effect in single-layer and bilayer graphene,” *Phys. Rev. B* **83**, 155447 (2011).
- [19] M.-H. Liu, P. Rickhaus, P. Makk, E. Tóvári, R. Maurand, F. Tkatschenko, M. Weiss, C. Schönenberger, and K. Richter, “Scalable tight-binding model for graphene,” *Phys. Rev. Lett.* **114**, 036601 (2015).
- [20] C. S. Lent and D. J. Kirkner, “The quantum transmitting boundary method,” *Journal of Applied Physics* **67**, 6353–6359 (1990).
- [21] M. Leng and C. S. Lent, “Quantum transmitting boundary method in a magnetic field,” *Journal of Applied Physics* **76**, 2240–2248 (1994).
- [22] M. Zwierzycki, P. A. Khomyakov, A. A. Starikov, K. Xia, M. Talanana, P. X. Xu, V. M. Karpan, I. Marushchenko, I. Turek, G. E. W. Bauer, G. Brocks, and P. J. Kelly, “Calculating scattering matrices by wave function matching,” *physica status solidi (b)* **245**, 623–640 (2008).
- [23] O. Schenk, A. Wächter, and M. Hagemann, “Matching-based preprocessing algorithms to the solution of saddle-point problems in large-scale nonconvex interior-point optimization,” *Computational Optimization and Applications* **36**, 321–341 (2007).
- [24] N. Nagaosa, “PHYSICS: A new state of quantum matter,” *Science* **318**, 758–759 (2007).
- [25] M. Ezawa, “A topological insulator and helical zero mode in silicene under an inhomogeneous electric field,” *New Journal of Physics* **14**, 033003 (2012).
- [26] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal’ko, “Electrically tunable band gap in silicene,” *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).

- [27] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, “Tunable bandgap in silicene and germanene,” *Nano Letters* **12**, 113–118 (2011).
- [28] K. Shakouri, H. Simchi, M. Esmailzadeh, H. Mazidabadi, and F. M. Peeters, “Tunable spin and charge transport in silicene nanoribbons,” *Phys. Rev. B* **92**, 035413 (2015).
- [29] W.-F. Tsai, C.-Y. Huang, T.-R. Chang, H. Lin, H.-T. Jeng, and A. Bansil, “Gated silicene as a tunable source of nearly 100% spin-polarized electrons,” *Nature Communications* **4**, 1500 EP – (2013), article.
- [30] Y. Aharonov and D. Bohm, “Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory,” *Phys. Rev.* **115**, 485–491 (1959).
- [31] R. A. Webb and S. Washburn, “Quantum interference fluctuations in disordered metals,” *Physics Today* **41**, 46–53 (1988).
- [32] S. Datta and B. Das, “Electronic analog of the electro-optic modulator,” *Applied Physics Letters* **56**, 665–667 (1990).
- [33] G. W. Mudd, S. A. Svatek, T. Ren, A. Patanè, O. Makarovskiy, L. Eaves, P. H. Beton, Z. D. Kovalyuk, G. V. Lashkarev, Z. R. Kudrynskyi, and A. I. Dmitriev, “Tuning the bandgap of exfoliated InSe nanosheets by quantum confinement,” *Advanced Materials* **25**, 5714–5718 (2013).
- [34] J. Lauth, F. E. S. Gorris, M. S. Khoshkhoo, T. Chassé, W. Friedrich, V. Lebedeva, A. Meyer, C. Klinke, A. Kornowski, M. Scheele, and H. Weller, “Solution-processed two-dimensional ultrathin InSe nanosheets,” *Chemistry of Materials* **28**, 1728–1736 (2016).
- [35] G. Kresse and J. Furthmüller, “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set,” *Phys. Rev. B* **54**, 11169–11186 (1996).
- [36] Y. Fan, X. Liu, J. Wang, H. Ai, and M. Zhao, “Silicene and germanene on InSe substrates: structures and tunable electronic properties,” *Physical Chemistry Chemical Physics* **20**, 11369–11377 (2018).
- [37] S. Grimme, “Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction,” *Journal of Computational Chemistry* **27**, 1787–1799 (2006).
- [38] L. Bengtsson, “Dipole correction for surface supercell calculations,” *Phys. Rev. B* **59**, 12301–12304 (1999).
- [39] W. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond*, Dover Books on Physics (Dover Publications, 1989).
- [40] J. C. Slater and G. F. Koster, “Simplified LCAO method for the periodic potential problem,” *Phys. Rev.* **94**, 1498–1524 (1954).
- [41] M. Nakhaee, S. A. Ketabi, and F. M. Peeters, “Tight-binding studio: A technical software package to find the parameters of tight-binding Hamiltonian,” *Computer Physics Communications* **254**, 107379 (2020).
- [42] Y. Lee, A. Knothe, H. Overweg, M. Eich, C. Gold, A. Kurzmann, V. Klasovika, T. Taniguchi, K. Wantanabe, V. Fal’ko, T. Ihn, K. Ensslin, and P. Rickhaus, “Tunable valley splitting due to topological orbital magnetic moment in bilayer graphene quantum point contacts,” *Phys. Rev. Lett.* **124**, 126802 (2020).

- [43] L. Banszerus, B. Frohn, T. Fabian, S. Somanchi, A. Epping, M. Müller, D. Neumaier, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. Libisch, B. Beschoten, F. Hassler, and C. Stampfer, “Observation of the spin-orbit gap in bilayer graphene by one-dimensional ballistic transport,” *Phys. Rev. Lett.* **124**, 177701 (2020).
- [44] M. D. Petrović and F. M. Peeters, “Fano resonances in the conductance of graphene nanoribbons with side gates,” *Phys. Rev. B* **91**, 035444 (2015).

Lista wystąpień konferencyjnych i seminaryjnych

1. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Analysis of the effective Landé factors for quantum point contacts defined electrostatically in silicene nanoribbons*, University of Antwerp, Department of Physics Online CMT seminar, 4 lutego 2021, (seminarium)
2. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Topological Aharonov-Bohm Interferometers Defined By Inhomogeneous Electric Field In Silicene*, Graphene and 2DM (GO2020) Online, 7 lipiec 2020, (plakat)
3. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *The control of the doubleslit silicene interferometer by the spin-Hall effect*, APS March Meeting 2019, 4-8 marca 2019. Boston, MA, (plakat)
4. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Detecting the topological insulating state in doubleslit silicene interferometer*, 48th International School & Conference on the Physics of Semiconductors "Jaszowiec 2019", 8-14 czerwca 2019, Szczyrk, Polska, (referat)
5. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Electron spin inversion in fluorinated graphene nanoribbons and Quantum spin Hall state detector in silicene interferometer*, University of Antwerp, Department of Physics CMT group, 23 lipca 2019, Belgia, (seminarium)
6. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Quantum spin Hall state detector in silicene*, Graphene Week 2019, 23-27 września 2019, Helsinki, Finlandia (plakat)
7. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Bartłomiej Szafran, *Spin manipulation in gated silicene nanoribbons*, 47th International School & Conference on the Physics of Semiconductors "Jaszowiec 2018", 16-22 czerwca 2018, Szczyrk, Polska, (referat)
8. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Spin precession in fluorinated graphene nanoribbons*, 34th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS) 2018, 29 lipca - 3 sierpnia 2018, Montpellier, Francja (plakat)
9. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Bartłomiej Szafran, *Gated silicene nanoribbon as a spin inverter*, Graphene Week 2018, 10-14 września 2018, San Sebastian, Hiszpania (plakat)

Granty oraz staże

1. Kierownik grantu *Transport ładunku i spinu w nanoukładach na bazie silicenu* w ramach projektu Diamentowy Grant MNiSW (DI2016 004546) na lata 2017-2021
2. Staż zagraniczny, Uniwersytet w Antwerpii pod opieką prof. F. M. Peetersa, wrzesień 2020 - styczeń 2021 w ramach programu ETIUDA 7, NCN (2019/32/T/ST3/00044)

Publikacje spoza rozprawy

1. Bartłomiej Szafran, Alina Mreńca-Kolasińska, **Bartłomiej Rzeszotarski**, Dariusz Żebrowski, *Electrical control of a confined electron spin in a silicene quantum dot*, Phys. Rev. B **97**, 165303 (2018)
2. Alina Mreńca-Kolasińska, **Bartłomiej Rzeszotarski**, Bartłomiej Szafran, *Spin-active devices based on graphene / WSe₂ heterostructures*, Phys. Rev. B **98**, 045406 (2018)
3. **Bartłomiej Rzeszotarski**, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Electron spin inversion in fluorinated graphene nanoribbons*, Phys. Rev. B **96**, 245307 (2017)

Electron spin inversion in gated silicene nanoribbons

Bartłomiej Rzeszutarski and Bartłomiej Szafran

AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science, al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Poland



(Received 7 March 2018; revised manuscript received 22 June 2018; published 15 August 2018)

We study locally gated silicene nanoribbons as spin active devices and we solve the quantum scattering problem in the atomistic tight-binding formalism. Particular attention is paid to the low energy range for which only four subbands appear at the Fermi level. We find that the gated segments of zigzag nanoribbons can be used for spin inversion. The strong intrinsic spin-orbit coupling in the presence of an external vertical electric field provides a fast spin precession around the axis perpendicular to the silicene plane. The spin inversion length can be as small as 10 nm. On the other hand, in the armchair nanoribbons the spin inversion occurs via the Rashba effect which is weak and the spin inversion lengths are of the order of microns.

DOI: [10.1103/PhysRevB.98.075417](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.075417)

I. INTRODUCTION

Silicene is a two-dimensional (2D) material, an alternative for graphene that provides a strong spin-orbit (SO) coupling [1–4]. Silicene belongs to the 2D-Xenes group [5] that potentially can be used in spintronic devices [6]. Other 2D-Xenes materials, germanene [7,8] and stanene [9], have similar properties to silicene but differ in magnitude of spin-orbit coupling parameters [10]. A germanene field-effect transistor at room temperature has been presented recently [11]. Fabrication of germanene on MoS₂ (transition metal dichalcogenide TMDC) [12] has also been reported. Strong SO coupling can also be obtained for graphene by the proximity effect of TMDC as a substrate for graphene monolayers. Another way to induce SO in graphene is to adsorb atoms, i.e., fluorine [13–15] or hydrogen [16–18]. Other 2D materials with strong SO coupling include hexagonal boron nitrides (hBN) [19,20] and pristine transition metal dichalcogenides (TMDs, such as MoS₂) [21]. The advantage of the silicene is that it could be potentially integrated with the well established silicon technology [10].

In silicene systems numerous quantum effects have been predicted, including the quantum spin Hall effect [1] and anomalous Hall effect [3] including its valley-polarized variant [22]. Also, an appearance of giant magnetoresistance is expected [23,24]. Furthermore, in the presence of the external perpendicular electric field topological phase transitions in the edge states are predicted [25–27]. Spin-filtering applications are also possible for silicene [28–32] as well as using ferromagnets to control spin transport along with giant magnetoresistance [33–37]. In recent research the silicene field effect transistor that operates at room temperature has been demonstrated [38] with Al₂O₃ dielectric substrate that only weakly modifies the free-standing silicene band structure near the Dirac points [39] in contrast to Ag substrates [40–42].

In the present paper we study the electron spin inverter in silicene that exploits the SO interactions. The Rashba spin-orbit interaction due to the vertical electric field generates an in-plane effective magnetic field [43] that in III-V two-dimensional electron gas induces precession of the spin that is injected perpendicular to the plane of confinement. However,

we find that for zigzag silicene nanoribbon the precession in the Rashba effective field is blocked by the intrinsic SO interaction that generates a strong internal magnetic field along the z axis [44] that stabilizes the spin and stops its precession. The effects of the intrinsic SO coupling [44] are lifted for the armchair edge that introduces the intervalley scattering. The spin precession in armchair ribbons is observed, but since the Rashba SO interaction in silicene is weak the spin inversion lengths are of the order of 1 μ m which may not be attractive for practical application.

We show that spin precession occurs very fast under intrinsic SO coupling in zigzag silicene nanoribbons when the spin is injected within the ribbon plane perpendicular to the electron momentum. The difference in wave vectors can be easily chosen by Fermi energy in the presence of the external electric field. The spin precession length can be tuned by the electric fields to values lower than 10 nm.

II. THEORY

In calculations we use the π band tight-binding Hamiltonian [2] for the free-standing silicene which takes the form

$$\begin{aligned}
 H_0 = & -t \sum_{\langle k,l \rangle \alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{l\alpha} + e \sum_{k,\alpha} F_z \ell_k c_{k,\alpha}^\dagger c_{k,\alpha} \\
 & - i \frac{2}{3} \lambda_R^{\text{int.}} \sum_{\langle \langle k,l \rangle \rangle \alpha, \beta} \mu_{kl} c_{k\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{kl})_{\alpha\beta}^z c_{l\beta} \\
 & + i \frac{\lambda_{\text{SO}}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle \langle k,l \rangle \rangle \alpha, \beta} \nu_{kl} c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha,\beta}^z c_{l\beta} \\
 & + i \lambda_R^{\text{ext.}} (F_z) \sum_{\langle \langle k,l \rangle \rangle \alpha, \beta} c_{k\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{kl})_{\alpha\beta}^z c_{l\beta} \\
 & + \sum_{k,\alpha,\beta} c_{k,\alpha}^\dagger (\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta} c_{k,\beta}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

where $c_{k\alpha}^\dagger$ ($c_{k\alpha}$) is the creation (annihilation) operator for an electron on site k with spin α . Summation over $\langle k, l \rangle$ and

$\langle\langle k, l \rangle\rangle$ stands for the nearest- and next-nearest-neighbor ions, respectively. (i) The first term of the Hamiltonian describes the hoppings between nearest-neighbor atoms with $t = 1.6$ eV [2,3]. (ii) The second term includes electrostatic potential due to electric field F_z perpendicular to the system with $\ell_k = \pm \frac{0.46 \text{ \AA}}{2}$ with + (−) sign for the ions of the A (B) sublattice. (iii) The third term describes the intrinsic Rashba interaction with parameter $\lambda_R^{\text{int}} = 0.7$ meV [2,3] due to the built-in electric field that emerges from the vertical shift of the A and B sublattices in silicene, where $\mathbf{d}_{kl} = \frac{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k|}$ is the position of the k th ion and $\mathbf{r}_k = (x_k, y_k, z_k)$, with the lattice constant $a = 3.86$ Å. The $\mu_{kl} = +1$ (−1) for $\langle\langle k, l \rangle\rangle$ ions within sublattice A (B). (iv) The fourth term represents the effective SO coupling with $\lambda_{\text{SO}} = 3.9$ meV in the Kane-Mele form [45,46] with $v_{kl} = +1$ (−1) for the counterclockwise (clockwise) next-nearest-neighbor hopping. (v) The fifth term describes the extrinsic Rashba effect which results from the external electric field perpendicular to the silicene plane or broken mirror symmetry by, e.g., the substrate. The parameter λ_R^{ext} varies linearly with the external field and for $F_z = 17$ meV/Å the $\lambda_R^{\text{ext}}(F_z) = 10$ μeV [3]. (vi) The last term introduces the local exchange field with magnetization described by exchange field $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ that may arise due to proximity of an insulating ferromagnetic substrate [10,33–37,47].

To solve the scattering problem for the atomistic system described by Hamiltonian (1) we use the wave function matching (WFM) technique as described in the Appendix of Ref. [48]. The transmission probability from the input lead to mode m (output lead) can be written as

$$T^m = \sum_n |t^{mn}|^2, \quad (2)$$

where t^{mn} is the probability amplitude for the transmission from mode n in the input lead to mode m in the output lead. We distinguish spin for each mode p by quantum expectation values of the Pauli matrices $\langle S_\bullet \rangle = \langle \psi^p | \sigma_\bullet | \psi^p \rangle$. The positive (negative) $\langle S_\bullet \rangle$ values are labeled by u, \uparrow (d, \downarrow). With this notation the spin-dependent conductance can be put in the form

$$G_{wv} = G_0 \sum_{m,n} |t^{mn}|^2 \delta_{w,\alpha(n)} \delta_{v,\beta(m)}, \quad (3)$$

where $G_0 = e^2/h$ is the conductance quantum, w (v) is the expected input (output) orientation of the spin, while α and β correspond to determined signs of $\langle S_\bullet \rangle$ sign for a given mode. For example, for the incident spin polarized along the z direction, the $\langle S_z \rangle = \langle \psi^p | \sigma_z | \psi^p \rangle$ is evaluated and the contribution to conductance that corresponds to the spin flip from u to d orientation is calculated as $G_{ud} = G_0 \sum_{m,n} |t^{mn}|^2 \delta_{+, \alpha(n)} \delta_{-, \beta(m)}$. All other spin-dependent conductance components can be calculated in the same way.

We consider the vertical orientation of the system in $z = 0$ plane where incident electron momentum is set in y direction and the width of the ribbon is defined along the x axis (see Fig. 1). External electric field is applied perpendicular to the system (along z direction).

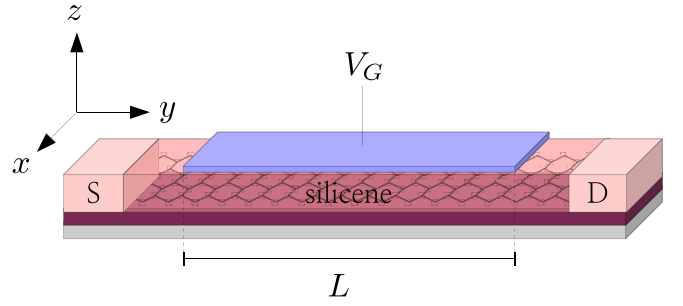


FIG. 1. Sketch of the device. The Fermi level electrons propagate from the source (S) to the drain (D). The voltage V_G applied to the top gate produces a perpendicular electric field F_z on length L [see Eq. (1)]. The role of the source (S) and drain (D) is played by homogeneous semi-infinite silicene ribbons outside the gated area.

III. RESULTS AND DISCUSSION

A. Perpendicular spin polarization

1. Zigzag lead

In Fig. 2 we show the dispersion relation and the average value of the spin for a zigzag silicene ribbon covered by an *infinite* top gate (Fig. 1) that can produce a homogeneous vertical electric field. The ribbon is 28 atoms wide, which corresponds to a width of $\simeq 5$ nm. Note that such narrow or even narrower—down to 0.8 nm—silicene nanoribbons have been grown [49].

In order to probe the spin properties of the system we introduced a very small external magnetic field equal to 1 μT oriented in the z [Figs. 2(a), 2(b) 2(e), and 2(f)] or x [Figs. 2(c), 2(d) 2(g), and 2(h)] direction. In Fig. 2 all the bands are nearly twofold degenerate with respect to the spin. The lifting of the spin degeneracy can only be observed on enlarged fragments which are discussed in detail below in the text.

For $\mathbf{B} = (0, 0, b)$ with no external electric field the electron spin is polarized in the $\pm z$ direction for any Fermi energy [Figs. 2(a) and 2(e)]. When the external electric field of $F_z = 100$ mV/Å is switched on, the external Rashba interaction introduces an effective magnetic field $\mathbf{B}_{\lambda_R^{\text{ext}}} = \xi(\mathbf{p} \times \mathbf{E}) = (\xi p_y F_z, 0, 0)$ [43] (ξ is a constant) that tends to set the spins parallel or antiparallel to the x axis. On the other hand, the intrinsic spin-orbit coupling of the Kane-Mele form in the absence of the intervalley scattering tends to polarize the spins in the direction perpendicular to the silicene plane [44]. Figures 2(b) and 2(f) illustrate the competition between the intrinsic spin-orbit coupling and the external Rashba interaction. The latter prevails for high Fermi energy for which the spins are polarized within silicene plane in the $\pm x$ direction. For lower Fermi energy the spin-diagonal intrinsic SO coupling keeps the spin polarized in $\pm z$ direction [44].

Now, let us consider a device, i.e., a system with a *finite* top gate (see Fig. 1) and the spin injected polarized in the z direction. The scattering problem for the zigzag nanoribbon has been solved for finite length of the external electric field $F_z = 1$ V/Å at $E_F = 0.258$ eV in two cases: (i) For $\lambda_{\text{SO}} = 0$ the splitting between the spin-polarized subbands is $\Delta k_1 = 0.00288 \frac{1}{2a}$. The Rashba SO interaction induces the spin precession with respect to the x axis. The rotation of the

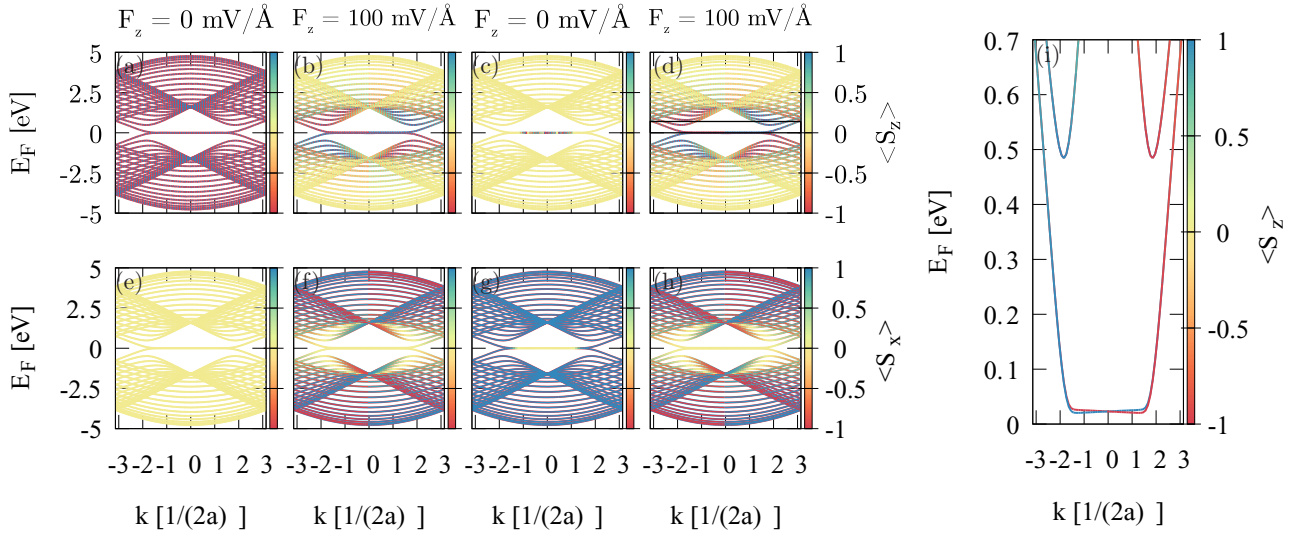


FIG. 2. Band structure of a zigzag silicene nanoribbon with 28 atoms across its width. Color in the upper (a)–(d) [lower (e)–(h)] row denote the spin S_z (S_x) component in $\hbar/2$ units. An external magnetic field of $b_0 = 1 \mu\text{T}$ oriented in the z and x direction was applied: in (a), (b), (e), and (f) $\mathbf{B} = (0, 0, b_0)$ and in (c), (d), (g), and (h) $\mathbf{B} = (b_0, 0, 0)$, respectively. Plots (a), (e), (c), and (g) represent band structures when no external electric field is applied while on the (b), (f), (d), and (h) the $F_z = 100 \text{ mV}/\text{\AA}$. (i) Zoom of a band structure marked by rectangle in plot (d).

electron spin along the x axis upon transition along the length of L_1 can be evaluated as [50]

$$\Delta\varphi = \Delta k L_1. \quad (4)$$

For $L_1(\pi) = 842 \text{ nm}$ the spin rotates from d to u orientation [Fig. 3(a)]. (ii) For $\lambda_{\text{SO}} = 3.9 \text{ meV}$ the intrinsic spin-orbit coupling keeps the electron spin polarized along the z direction with only weak oscillations due to $\Delta k_2 = 0.036 \frac{1}{2a}$ and the $L_2(\pi) = 67.4 \text{ nm}$ [Fig. 3(b)].

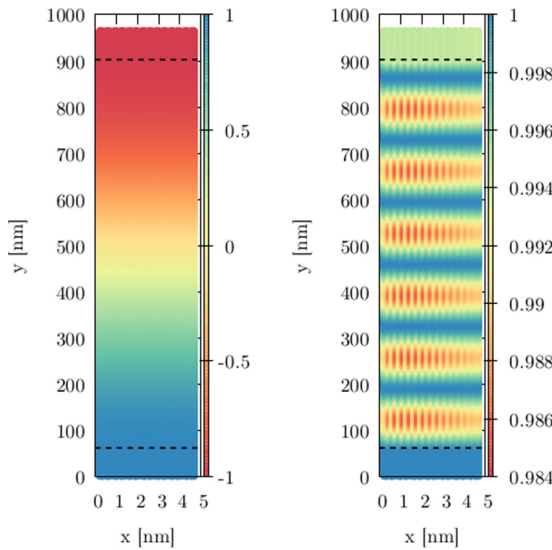


FIG. 3. Spin S_z component maps for a zigzag nanoribbon 28 atoms wide for the intrinsic SO coupling constant $\lambda_{\text{SO}} = 0$ (a) and $\lambda_{\text{SO}} = 3.9 \text{ meV}$ (b). In between dashed horizontal lines the external electric field $F_z = 1 \text{ V}/\text{\AA}$ is applied. The first propagating mode with initial spin up has been chosen at $E_F = 258 \text{ meV}$.

We conclude that the realization of a perpendicular spin inverter in a zigzag nanoribbon at low Fermi energy is excluded by the strong intrinsic SO which keeps the spin polarized along the z axis.

2. Armchair lead

The effective magnetic field due to the intrinsic spin-orbit interaction that prevents the spin precession along the Rashba effective field is only present provided that the transport modes have a definite valley [44,45]. The armchair edge of the ribbon introduces maximal valley mixing and removes the intrinsic spin-orbit effective magnetic field. In order to eliminate the effects of the intrinsic spin-orbit interaction we considered an

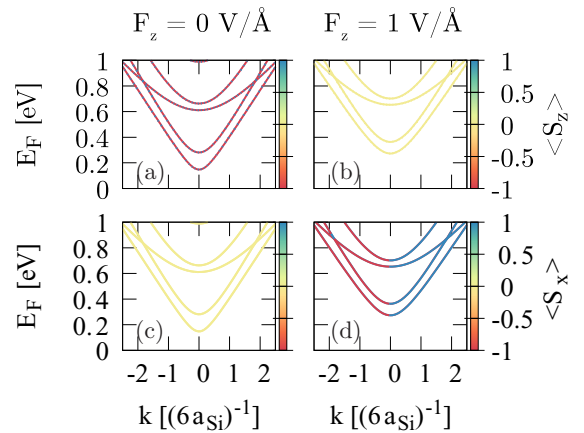


FIG. 4. Band structure of an armchair silicene nanoribbon with 19 atoms width for electron with spin polarization in z direction. Colors in upper (lower) row represent spin S_z (S_x) component in $\hbar/2$ units. The left panels correspond to external electric field $F_z = 0$ and the right panels to $F_z = 1 \text{ V}/\text{\AA}$.

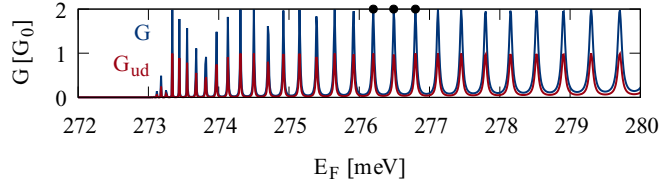


FIG. 5. Total conductance G (blue) and the spin-flipping G_{ud} contribution (red) for an armchair silicene nanoribbon with the length of the gated area $L = 842$ nm and the external electric field $F_z = 1$ V/Å. The basis of spin states perpendicular to the ribbon is considered here. The black dots marked the peaks described in Table I.

armchair semiconducting ribbon 19 atoms wide (for a metallic version precession occurs in the same manner). In the armchair nanoribbon with no electric field the initial spin z is conserved [Figs. 4(a) and 4(c)] but when a high electric field $F_z = 1$ V/Å is applied, the available states correspond to spins polarized along x axis [Figs. 4(b) and 4(d)] due to the Rashba effective magnetic field.

The conductance for $L = 842$ nm and $F_z = 1$ V/Å was calculated and presented in Fig. 5. Total conductance (blue line) and spin-flipping conductance (red line) oscillates with peaks for an integer number of wavelength halves within the gated length L (see Table I). For $F_z \neq 0$ a step potential appears in silicene sublattices that allows transmission for resonant modes only.

Figure 5 shows that for the armchair ribbon and the chosen length of the gated area the resonant electron transfer is accompanied by the spin flip. In a wide range around $E_F = 276.49$ meV the spin-subbands splitting remains almost the same $\Delta k \approx 0.005 \frac{1}{6a_{Si}}$ [where $a_{Si} = \frac{a}{\sqrt{3}}$ is the in-plane distance between nearest-neighbors Si atoms, thus $L_a(\pi) \approx 842$ nm] and provides a perfect spin inverter. We can see that the spin inversion length is very large even for an extreme value 1 V/Å of the electric field applied here [51,52], which is not promising in the context of practical applications.

B. In-plane spin polarization

Figures 2(c) and 2(g) show that for the electrons fed from the silicene lead in which the external electric field is absent one can polarize the spins in the x direction with an infinitesimal

TABLE I. Fermi wavelengths λ_m in resonances (see black dots in Fig. 5). The results are obtained from the band structure for an armchair ribbon (19 atoms width) with vertical electric field $F_z = 1$ V/Å. m_1 and m_2 stand for the two modes in the first conductive subband at the Fermi level.

E_F (meV)		k ($1/6a_{Si}$)	$\lambda_m = \frac{2\pi}{k}$ (nm)	$N = \frac{L}{\lambda_m}$	\bar{N}
276.8	m_1	0.1172	71.71	11.75	12
	m_2	0.1221	68.78	12.25	
276.49	m_1	0.1121	74.93	11.25	11.5
	m_2	0.1171	71.74	11.75	
276.2	m_1	0.1072	78.37	10.75	11
	m_2	0.1122	74.89	11.25	

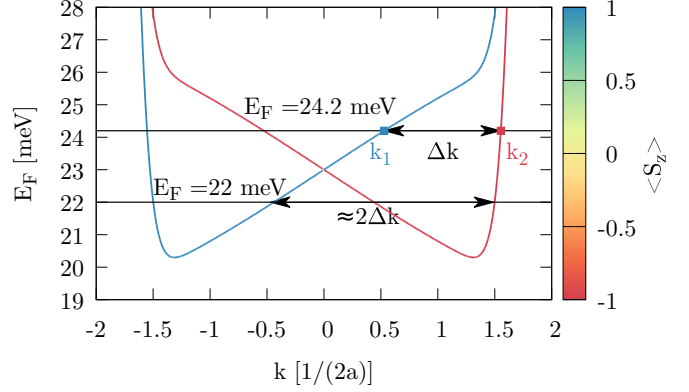


FIG. 6. The lowest conduction subbands for zigzag nanoribbon and $F_z = 100$ mV/Å. The color scale denotes the spin S_z component in $\hbar/2$ units. The difference between two opposite-spin right-going subbands at Fermi energy $E_F = 24.2$ meV is marked as $\Delta k = 1.02 \frac{1}{2a}$.

magnetic field. For $F_z = 0$, above energy $E_F = 10$ meV, the electron spin is oriented parallel or antiparallel to the x axis by the field of 1 μ T. Moreover, Fig. 2(d) indicates that in the presence of nonzero F_z for low Fermi energy the spins of the transport modes are polarized along the z axis. One can use this fact in order to arrange for a device which inverts the in-plane polarized incident spins for the electrons that enter a gated region. Furthermore, if we apply external electric field $F_z = 100$ mV/Å, the first subbands [see Fig. 2(i)] with specified spin z states splits in a very wide Δk spectrum (zoom in Fig. 6) between the two propagating modes.

Figure 7 shows the conductance for the zigzag nanoribbon (28 atoms width) with external electric field $F_z = 100$ mV/Å and $L = 5.5$ nm. We show the total conductance G and its the spin-resolved contributions to conductance $G = G_{ud} + G_{uu} + G_{du} + G_{dd}$. G_{ud} stands for the flip from 1 to -1 in $S_x[\hbar/2]$ component, and G_{uu} for the transport with the spin kept parallel to the x axis. Since the time-reversal symmetry is conserved one has $G_{du} = G_{ud}$ and $G_{dd} = G_{uu}$.

We find two peaks of $G_{ud} \simeq G_0$ for $E_F = 22$ and 24.2 meV. For the first peak the difference of the Fermi wave vectors is roughly twice larger than in the other (Fig. 6). For higher E_F the Δk values drastically drop and the precession is too slow to invert spin on that short L path and G_{ud} in Fig. 7 drops to zero.

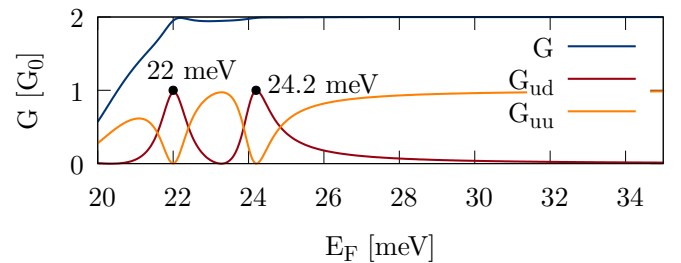


FIG. 7. Total conductance G (blue), the spin flipping G_{ud} (red), and spin conserving G_{uu} (orange) contributions. Here G_{ud} denotes the flip from $S_x = 1$ to $S_x = -1$ in $\hbar/2$ units. The width of the zigzag ribbon was set to 28 atoms, the length is $L = 5.5$ nm and $F_z = 100$ mV/Å. The two peaks marked by black dots correspond to dashed lines in band structure in Fig. 6.

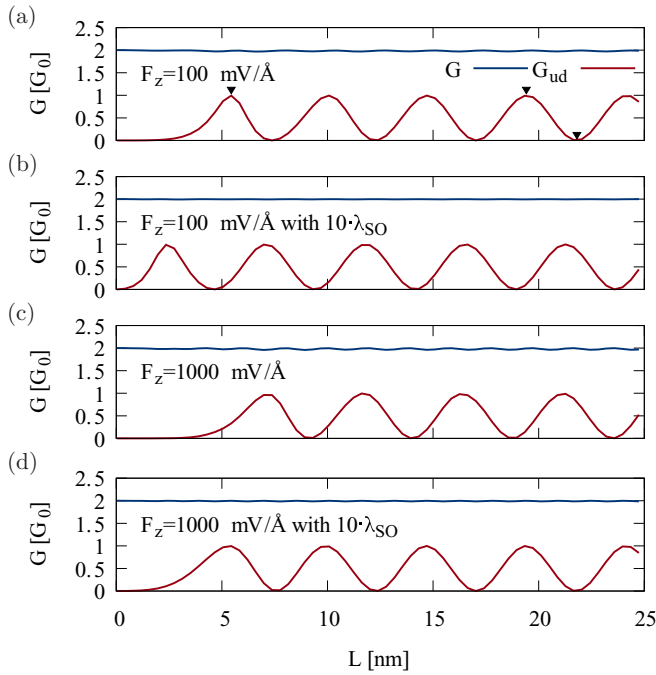


FIG. 8. Total conductance G (blue) and conductance with spin flip G_{ud} (in x direction) with variable length L on which external electric field is applied. For (a) and (b) the $F_z = 100$ mV/Å and (c) and (d) $F_z = 1000$ mV/Å. In two cases (b) and (d) the λ_{SO} was increased 10 times to measure the contribution of the intrinsic spin-orbit coupling to the offset arising. For black triangles in (a) the first mark from the left corresponds to the system described in the text, the middle and the last one to Figs. 9(a) and 9(b), respectively. The applied Fermi energies: $E_F = 24.2$ meV (a), $E_F = 38.386$ meV (b), $E_F = 231.653$ meV (c), and $E_F = 252.989$ meV (d).

For the $E_F = 24.2$ meV the spacing of the right-going wave vectors for opposite spin states is $\Delta k = 1.02 \frac{1}{2a}$ which according to Eq. (4) provides the spin precession length $L_x(\pi) = 6a \approx 2.32$ nm. In Fig. 8 we plotted the spin-flipping conductance as a function of the length of the gated region

for varied values of the F_z and λ_{SO} . For each subplot in Fig. 8 the Fermi energy was tuned to maintain the same spin precession rate: $\Delta k = 1.02 \frac{1}{2a}$, $L_x(\pi) \approx 2.32$ nm. We find that the subsequent peaks of the spin-flipping conductance G_{ud} are separated by $2L_x(\pi) = 4.64$ nm, corresponding to an additional full spin rotation from one peak to the other. The offset between the nominal $L_x(\pi)$ and the actual L value for which the first peak of G_{ud} occurs is due to the finite size of the top gate. Note that the band structure of Fig. 6 is calculated for an infinite L . We find that this offset depends on the Fermi energy (the higher E_F , the lower wave sensitivity to the step of F_z potential) and on intrinsic SO interaction strength. Increasing ten times the intrinsic SO factor λ_{SO} we significantly shorten the offset lengths. At the start and at the end of F_z area the spin precession is unsettled which extends the actual spin inversion length [Figs. 9(a) and 9(b)]. In the scattering spin density the local extrema of S_x are indeed spaced by $2L_x(\pi) = 4.64$ nm [Fig. 9(c)]. The fact that the scattering density mostly occupies the left edge of the nanoribbon [Fig. 9(d)] is consistent with the results obtained for infinite L [Figs. 9(e) and 9(f)].

C. Spin-flip detection

Above we indicated the setup for the in-plane spin inversion. Let us now discuss a possible experimental setup that could detect the inversion. For that purpose we consider a system with ferromagnetic insulators placed above the silicene. Due to the proximity effect the exchange energy \mathbf{M} appears in Hamiltonian (1) and modifies the band structure. In Figs. 10(a) and 10(e) we plotted the dispersion relation for $M_x = \pm 7$ meV and $F_z = 100$ mV/Å that can be achieved in a proximity of a ferromagnet magnetized along the x axis (see the sketch on top of Fig. 10).

The configuration proposed in Fig. 10 filters the spins polarized along the x axis by choosing the Fermi energy that corresponds to only one conductive subband. Spin polarization along the $+x$ or $-x$ direction for that propagation is allowed on each lead and can be set by an adequate FM polarization. The

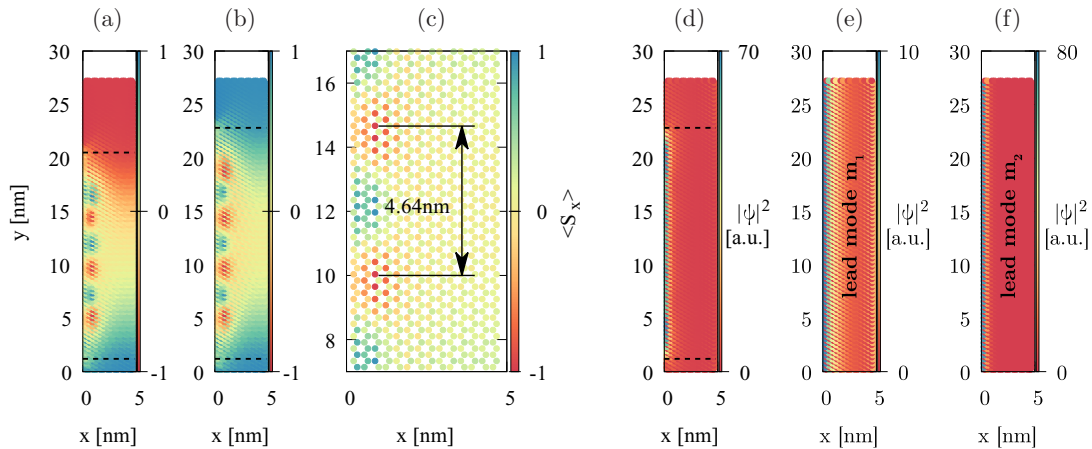


FIG. 9. S_x spin projection maps for L (a) 19.3 nm and (b) 21.6 nm [see the length marked by triangles in Fig. 8(a)] for the solution of the scattering problem with spin-up electron incident from the side of negative y . (c) Zoom of the area where one period of the spin rotation is visualized. (d) Scattering density for the system shown in plot (b). The horizontal dashed lines limit the area of the external electric field $F_z = 100$ mV/Å. The electron density of the input lead with $F_z = 100$ mV/Å as above for two incoming modes m_1 (e) and m_2 (f).

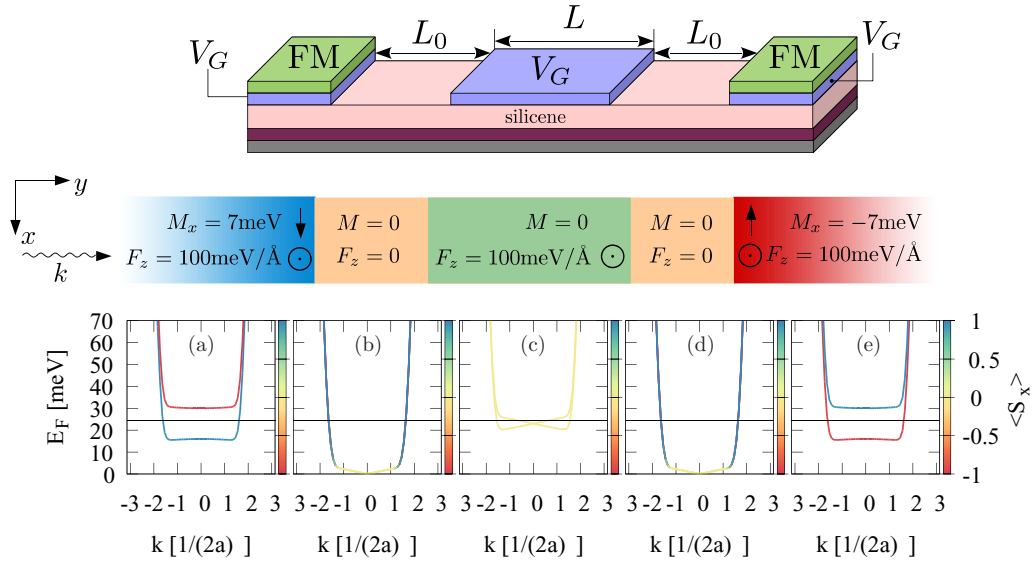


FIG. 10. Schematic view of a spin detector with FM placed above the left (a) and right (e) lead of silicene nanoribbon with gate voltage $F_z = 100 \text{ meV}/\text{\AA}$. (b) and (d) Correspond to pristine silicene and (c) is a gated area where precession occurs ($L = 5.5 \text{ nm}$). Below each section (a)–(e) band structure of its infinite counterpart has been drawn. Horizontal line denotes the energy $E_F = 24.2 \text{ meV}$ according to the previous spin-flip length. L_0 is the spacer between the gated region and the leads.

length of the spacer L_0 was set to 11 nm and the length of the top gate [Fig. 10(c)] in the middle remains the same as in the system without FM, $L = 5.5 \text{ nm}$, for the band structure of Fig. 6.

The setup of Fig. 10 works in the following way: the total conductance of the system is equal to 1 flux quantum only if the full spin-flip occurs (Fig. 11) and the maxima of G coincide with the maxima of G_{ud} that were obtained in Fig. 7 without the ferromagnets. Figure 11 presents the results for varied length of the spacer L_0 . Although the conductance varies with L_0 , the total conductance stays at $1 G_0$ for the Fermi energies that correspond to the spin flip under the gate of the fixed length L . The proposed device should allow us to tune the Fermi energy to obtain a perfect spin inverter.

Note that for the spin injection by the input lead alternatively to the magnetic proximity effect one can use the procedure for all-electrical generation of spin-polarized currents by an energy-dependent phase difference for the electron spin proposed recently [53].

D. Electrostatic disorder

In order to check the robustness of a spin-flipping conductance to a disorder we returned to the system without the FM

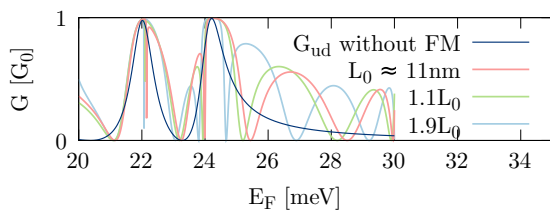


FIG. 11. Total conductance G (light colored lines) as a function of the spacer length L_0 [see Figs. 10(b) and 10(d)] compared to the G_{ud} (dark blue) in nanoribbon without FM leads (see Fig. 7).

proximity effect and we introduced inhomogeneities to the vertical electric field that produces Gaussian impurities in the potential [54]

$$U_z = \sum_i^N U_i \exp(-|\mathbf{r}_k - \mathbf{R}_i|^2/2\eta^2), \quad (5)$$

where \mathbf{R}_i is the center of the i th impurity and η is set equal to the lattice constant. $U_i \in (-mF_z, mF_z)$ is a scale factor

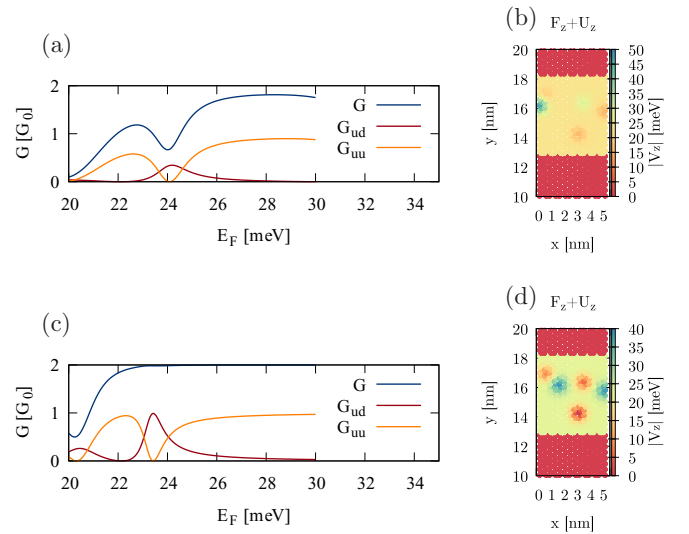


FIG. 12. Conductance G with spin conserving G_{uu} and spin-flipping G_{ud} parts in disordered system for a random fluctuation of the vertical field U_z including the left edge (a), and with no fluctuation on the left edge (c). Map of on-site energies that correspond to $|V_z| = e(F_z + U_z)|\ell_k|$ has been presented for each case (b) and (d), respectively. Magnitude of the fluctuating field U_z in both cases is comparable to F_z and corresponds to energy $\approx 20 \text{ meV}$.

chosen randomly and multiplied by magnitude factor m equal 1 or 0.1. This fluctuations is introduced in our calculations by modification of the vertical electric field $F_z^d(x, y) = F_z + U_z(x, y)$ in Hamiltonian H_0 (1).

We considered $N = 5$ impurities in the gated area. When the magnitude of U_i was set to $m = 0.1$ we observe only a slight difference in the spin-flipping conductance. The results is still very similar to the case without the fluctuations (Fig. 7). For magnitude $m = 1$ we can distinguish two cases: (i) when one of the impurity center is localized at the left edge of the nanoribbon then spin-flip conductance drastically falls down [Figs. 12(a) and 12(b)] because most of the wave function goes along the left edge and any fluctuation on this path just blocks the electron propagation and (ii) when all impurities centers are localized inside the top gate excluding the left edge the one-inversion conductance is still available but spin-flipping conductance with more than one inversion along path is hampered [Figs. 12(c) and 12(d)].

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

We considered a gated segment of a silicene nanoribbon as a spin inverter via precession of the incident spin in the effective magnetic field due to the SO interactions. The Rashba interaction due to the external electric field fails to induce the spin inversion in the zigzag ribbon for which the intrinsic SO interaction keeps the incident electron spin polarized along the z direction. The perpendicular polarization of the electron spin is not present for the armchair ribbon that allows the Rashba

interaction to drive the spin precession. However, the resulting spin precession length is large, of the order of microns. We demonstrated that the gated zigzag nanoribbon can be used as an inverter of in-plane polarized incident spins and that spin precession length can be very short for low Fermi energy, e.g., less than 10 nm for a reasonable value of the external electric field $F_z = 100$ meV/Å. That spin inversion length strongly depends of the Δk chosen through the E_F level that can be tuned in a large range due to the spin splitting in the band structure when the external electric field is applied. With the local exchange field it is possible to prepare a spin-flip detection device that is transparent for the spin-polarized transport only for a perfect spin inversion in the gates area. Electric field fluctuations can suppress the precession if the center of impurity appears on the left edge of the nanoribbon and its magnitude is comparable to an applied external electric field. In other cases precession is hampered but spin flip is still observed.

ACKNOWLEDGMENTS

We would like to thank Alina Mreńca-Kolasińska for helpful discussions. B.R. is supported by Polish government budget for science in 2017–2021 as a research project under the program “Diamantowy Grant” (Grant No. 0045/DIA/2017/46) and by the EU Project POWR.03.02.00-00-I004/16. B.S. acknowledges the support of NCN Grant DEC-2016/23/B/ST3/00821. The calculations were performed on PL-Grid Infrastructure.

-
- [1] C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
 - [2] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
 - [3] M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055502 (2012).
 - [4] A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, and R. A. Duine, *Nat. Mater.* **14**, 871 (2015).
 - [5] A. Molle, J. Goldberger, M. Houssa, Y. Xu, S.-C. Zhang, and D. Akinwande, *Nat. Mater.* **16**, 163 (2017).
 - [6] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
 - [7] M. E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, and G. L. Lay, *New J. Phys.* **16**, 095002 (2014).
 - [8] L. Li, S. zan Lu, J. Pan, Z. Qin, Y. qi Wang, Y. Wang, G. yu Cao, S. Du, and H.-J. Gao, *Adv. Mater.* **26**, 4820 (2014).
 - [9] L. Wu, P. Lu, J. Bi, C. Yang, Y. Song, P. Guan, and S. Wang, *Nanoscale Res. Lett.* **11**, 525 (2016).
 - [10] S. Chowdhury and D. Jana, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 126501 (2016).
 - [11] B. N. Madhushankar, A. Kaverzin, T. Giousis, G. Potsi, D. Gournis, P. Rudolf, G. R. Blake, C. H. van der Wal, and B. J. van Wees, *2D Mater.* **4**, 021009 (2017).
 - [12] L. Zhang, P. Bampoulis, A. N. Rudenko, Q. Yao, A. van Houselt, B. Poelsema, M. I. Katsnelson, and H. J. W. Zandvliet, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 256804 (2016).
 - [13] X. Hong, S.-H. Cheng, C. Herding, and J. Zhu, *Phys. Rev. B* **83**, 085410 (2011).
 - [14] X. Hong, K. Zou, B. Wang, S.-H. Cheng, and J. Zhu, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 226602 (2012).
 - [15] S. Irmer, T. Frank, S. Putz, M. Gmitra, D. Kochan, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **91**, 115141 (2015).
 - [16] J. Balakrishnan, G. K. W. Koon, M. Jaiswal, A. H. C. Neto, and B. Özyilmaz, *Nat. Phys.* **9**, 284 (2013).
 - [17] M. Gmitra, D. Kochan, and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 246602 (2013).
 - [18] F. Gargiulo, G. Autès, N. Virk, S. Barthel, M. Rösner, L. R. M. Toller, T. O. Wehling, and O. V. Yazyev, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 246601 (2014).
 - [19] K. Watanabe, T. Taniguchi, and H. Kanda, *Nat. Mater.* **3**, 404 (2004).
 - [20] L. Song, L. Ci, H. Lu, P. B. Sorokin, C. Jin, J. Ni, A. G. Kvashnin, D. G. Kvashnin, J. Lou, B. I. Yakobson, and P. M. Ajayan, *Nano Lett.* **10**, 3209 (2010).
 - [21] J. Hong, Z. Hu, M. Probert, K. Li, D. Lv, X. Yang, L. Gu, N. Mao, Q. Feng, L. Xie, J. Zhang, D. Wu, Z. Zhang, C. Jin, W. Ji, X. Zhang, J. Yuan, and Z. Zhang, *Nat. Commun.* **6**, 6293 (2015).
 - [22] H. Pan, Z. Li, C.-C. Liu, G. Zhu, Z. Qiao, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 106802 (2014).
 - [23] C. Xu, G. Luo, Q. Liu, J. Zheng, Z. Zhang, S. Nagase, Z. Gao, and J. Lu, *Nanoscale* **4**, 3111 (2012).
 - [24] S. Rachel and M. Ezawa, *Phys. Rev. B* **89**, 195303 (2014).
 - [25] M. Ezawa, *New J. Phys.* **14**, 033003 (2012).
 - [26] E. Romera and M. Calixto, *Europhys. Lett.* **111**, 37006 (2015).
 - [27] C. J. Tabert and E. J. Nicol, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 197402 (2013).
 - [28] W.-F. Tsai, C.-Y. Huang, T.-R. Chang, H. Lin, H.-T. Jeng, and A. Bansil, *Nat. Commun.* **4**, 1500 (2013).

- [29] X. Q. Wu and H. Meng, *J. Appl. Phys.* **117**, 203903 (2015).
- [30] N. Missault, P. Vasilopoulos, V. Vargiamidis, F. M. Peeters, and B. Van Duppen, *Phys. Rev. B* **92**, 195423 (2015).
- [31] K. Shakouri, H. Simchi, M. Esmailzadeh, H. Mazidabadi, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **92**, 035413 (2015).
- [32] C. Núñez, F. Domínguez-Adame, P. A. Orellana, L. Rosales, and R. A. Römer, *2D Mater.* **3**, 025006 (2016).
- [33] T. Yokoyama, *Phys. Rev. B* **87**, 241409 (2013).
- [34] Y. Wang and Y. Lou, *J. Appl. Phys.* **114**, 183712 (2013).
- [35] R. Saxena, A. Saha, and S. Rao, *Phys. Rev. B* **92**, 245412 (2015).
- [36] V. Derakhshan, S. Ketabi, and A. Moghaddam, *Superlattices Microstruct.* **100**, 214 (2016).
- [37] D. Wang, Z. Huang, Y. Zhang, and G. Jin, *Phys. Rev. B* **93**, 195425 (2016).
- [38] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, and D. Akinwande, *Nat. Nanotechnol.* **10**, 227 (2015).
- [39] M. X. Chen, Z. Zhong, and M. Weinert, *Phys. Rev. B* **94**, 075409 (2016).
- [40] B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Léandri, B. Ealet, and G. L. Lay, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 183102 (2010).
- [41] B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. Yao, X. He, P. Cheng, L. Chen, and K. Wu, *Nano Lett.* **12**, 3507 (2012).
- [42] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, and G. Le Lay, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 155501 (2012).
- [43] L. Meier, G. Salis, I. Shorubalko, E. Gini, S. Schön, and K. Ensslin, *Nat. Phys.* **3**, 650 (2007).
- [44] A. W. Cummings, J. H. Garcia, J. Fabian, and S. Roche, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 206601 (2017).
- [45] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [46] M. Laubach, J. Reuther, R. Thomale, and S. Rachel, *Phys. Rev. B* **90**, 165136 (2014).
- [47] X.-T. An, Y.-Y. Zhang, J.-J. Liu, and S.-S. Li, *New J. Phys.* **14**, 083039 (2012).
- [48] K. Kolasinski, B. Szafran, B. Brun, and H. Sellier, *Phys. Rev. B* **94**, 075301 (2016).
- [49] R. Hiraoka, C. Lin, K. Nakamura, R. Nagao, M. Kawai, R. Arafune, and N. Takagaki, *Bellstein J. Nanotechnol* **8**, 1699 (2017).
- [50] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
- [51] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
- [52] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, *Nano Lett.* **12**, 113 (2011).
- [53] L. L. Tao, K. T. Cheung, L. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. B* **95**, 121407 (2017).
- [54] J. Tworzydło, I. Snyman, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **76**, 035411 (2007).

Electron interferometry and quantum spin Hall phase in silicene

Bartłomiej Rzeszutowski, Alina Mreńca-Kolasińska, and Bartłomiej Szafran

AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science, al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Poland



(Received 30 January 2019; published 22 April 2019)

We discuss devices for detection of the topological insulator phase based on the two-path electron interference. For that purpose we consider buckled silicene, for which a local energy gap can be opened by a vertical electric field to close one of the interference paths and for which the quantum spin Hall insulator conditions are controlled by the Fermi energy. In quantum spin Hall phase the interference is absent due to the separation of the spin currents, and the conductance of the devices include sharp features related to localized resonances. In the normal transport conditions the two-path interference produces regular Aharonov-Bohm oscillations in the external magnetic field.

DOI: [10.1103/PhysRevB.99.165426](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.165426)

I. INTRODUCTION

Silicene [1–3], the two-dimensional material that forms a honeycomb structure (similar to graphene), has recently been strongly examined regarding its synthesis [4]. Significant interest in this material mainly comes from two factors: (i) the strong intrinsic spin-orbit coupling [1,2] that accompanies the buckling and provides a wide variety of potential implementations in spintronics [5–8] as well as topological spintronics [9], and (ii) the potential of integration with currently well-known silicon technology [10]. Topological spintronics is a promising field where the electronic devices based on topological insulators will generate less heat and achieve higher performance [11] in comparison to silicon-semiconductor electronics.

Quantum spin Hall (QSH) insulators [12–14] form a class of two-dimensional topological insulators with bulk energy gap and topologically protected currents of a fixed spin-orbital helicity. The QSH phase [15] is discussed for bulk nanostructures including HgTe quantum wells [16–19] and InAs/GaSb interfaces [20,21]. In two-dimensional materials it has been investigated for bilayer graphene with spin-orbit coupling [22], twisted bilayer graphene [23,24], as well as graphenelike monolayer Xenon materials [25,26], including silicene [1–4,27]. The QSH conditions in silicene occur for Fermi energies near the charge neutrality point [1–4,27]. The Fermi energy in 2D monolayer materials can be controlled by external gating. In the QSH phase the spin currents are confined by opposite edges of the sample, which was used for proposals of spin sources and spin filters in silicene [5–8,28,29].

In this paper we propose electron interferometer devices that can be used for detection of the QSH transport conditions. The devices are based on the idea of two-path interference and the spin separation by the split silicene ribbon [5]. We consider a double-slit interference device as well as a quantum ring and find that in the normal phase one observes smooth Aharonov-Bohm conductance oscillations, while in the QSH regime only sharp conductance features due to the localized resonances with circular current loops are observed. In

silicene both the localized resonances and the Aharonov-Bohm oscillations can be intentionally switched off by applying a local electric field to one of the arms of the split channels, due to the buckling of the crystal lattice that translates the electric field into a local energy gap [30,31] that stops the current flow.

II. THEORY

A. Hamiltonian

We use the tight-binding Hamiltonian spanned on p_z orbitals of Si atoms [3]:

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{\text{SO}}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha, \beta} v_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha, \beta}^z c_{j\beta} \\
 & - i \frac{2}{3} \lambda_R^{\text{int}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha, \beta} \mu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij})_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \\
 & + \sum_{i\alpha} V_{zi} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha},
 \end{aligned} \quad (1)$$

where $c_{i\alpha}^\dagger$ ($c_{j\alpha}$) is the creation (annihilation) operator for an electron on atom i with spin α . The calculation accounts for a hexagonal lattice of Si atoms with constant $a = 3.89 \text{ \AA}$ and a vertical shift of 0.46 \AA between the A and B sublattices. Summations over $\langle i, j \rangle$ and $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ run over nearest- and next-nearest-neighbor ions, respectively. In Eq. (1) we use $t = 1.6 \text{ eV}$ for the hopping energy [1,3], $\lambda_{\text{SO}} = 3.9 \text{ meV}$ [3] is the intrinsic spin-orbit coupling energy [15], where $v_{ij} = -1$ ($+1$) for the clockwise (counterclockwise) next-nearest neighbor hopping, and $\lambda_R^{\text{int}} = 0.7 \text{ meV}$ is the intrinsic spin-orbit coupling energy [1,3], where the unit vector from the j th to i th ion $\vec{d}_{ij} = \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|}$. Within sublattice A (B) we apply $\mu_{ij} = +1$ (-1). The last term in Eq. (2) introduces a local vertical electric field (yellow gates in Fig. 1) at the entrance to the slits to intentionally switch off the currents in the channels. The gates introduce a vertical electric field of about 100 mV/\AA that produces the potential difference $\pm 25 \text{ meV}$ at the A and B sublattices of the buckled silicene lattice. The

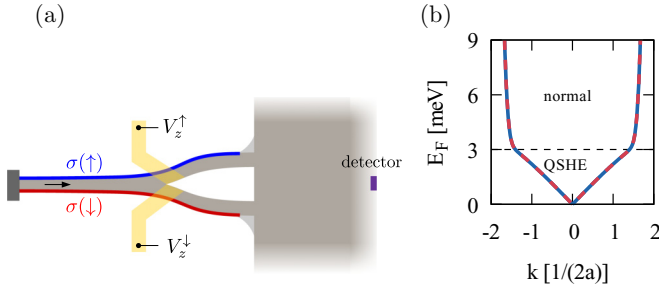


FIG. 1. (a) Sketch of the split-channel system. The input lead and the split channels are silicene ribbons of width 6.5 nm and zigzag edges. In the quantum spin Hall effect (QSHE) phase, each channel is fed by a different spin-state current from the input lead (the blue and red lines at the edges of the channel). The length of the split part is about 60 nm, and the vertical spacing between the split channels is 7 nm. The horizontal distance between openings of the slits and the detector is 32 nm. The detector is a ribbon 6.5 nm wide. External gates marked in yellow can be used to locally open the energy gap in silicene. (b) The spin-degenerate dispersion relation of the zigzag 6.5-nm-wide silicene ribbon at the conduction band side. The linear energy range corresponds to the QSH insulator phase. For higher E_F the spin for both spin orientations flows through the center of the ribbon.

field opens the local energy gap for the Fermi energy range considered here and closes the channel for the electron flow.

In the presence of an external perpendicular magnetic field B_z , the Peierls phase is introduced to the hopping terms $\mathbf{h}_{i\alpha j\beta}$ for the Hamiltonian, written in general form

$$H' = \sum_{i,j,\alpha,\beta} \mathbf{h}_{i\alpha j\beta} \exp \left[\frac{2\pi i}{\Phi_0} \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_j} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \right] c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}, \quad (2)$$

where \mathbf{A} is the vector potential, $\Phi_0 = h/e$ is the magnetic flux quantum, and \mathbf{r}_i is the position of the i th ion.

B. Method

In our calculations we use the wave-function matching (WFM) technique as described in Refs. [29,32]. The transmission probability from the input lead to mode k (output lead) is

$$T^k = \sum_l |t^{kl}|^2, \quad (3)$$

where t^{kl} is the probability amplitude for the transmission from mode l in the input lead to mode k in the output lead. For the m th mode with the wave function ψ^m , we distinguish spin by calculating $\langle \mathbf{S}_\bullet \rangle = \langle \psi^m | \sigma_\bullet | \psi^m \rangle$ as a quantum expectation value of the Pauli matrix through each atom inside the lead. The positive (negative) $\langle \mathbf{S}_\bullet \rangle$ values are labeled by u, \uparrow (d, \downarrow). In this notation the spin-dependent conductance can be written as

$$G_{ab} = G_0 \sum_{k,l} |t^{kl}|^2 \delta_{a,\alpha(l)} \delta_{b,\beta(k)}, \quad (4)$$

where $G_0 = e^2/h$, and a (b) is expected input (output) orientation of the spin, while α and β correspond to the signs of $\langle \mathbf{S}_\bullet \rangle$ value for a given mode. For example the

spin-conserving up-oriented conductance is calculated as $G_{uu} = G_0 \sum_{k,l} |t^{kl}|^2 \delta_{u,\alpha(l)} \delta_{u,\beta(k)}$ for $\langle \mathbf{S}_z \rangle = \langle \psi^m | \sigma_z | \psi^m \rangle$. All other components of the spin-dependent conductance can be calculated in the same manner.

In the tight-binding model the current flowing between i and j ions along the π bonds is calculated as

$$J_{i\alpha j\beta} = \frac{i}{h} \sum_{\alpha,\beta} [\mathbf{h}_{i\alpha j\beta} \Psi_{i,\alpha}^* \Psi_{j,\beta} - \mathbf{h}_{j\beta i\alpha} \Psi_{j,\beta}^* \Psi_{i,\alpha}], \quad (5)$$

where $\Psi_{j,\beta}$ is the β spin component of the wave function at the j th ion. Due to spin-orbit coupling included in Hamiltonian (1), the formula (5) also describes the currents that flow between different spin components.

III. RESULTS

A. Double-slit system

The schematics of the double-slit interferometer are depicted in [Fig. 1(a)]. The electrons are fed from the left by the silicene ribbon of a zigzag edge of 6.5 nm width. The zigzag ribbon supports the spin-polarized edge transport at the Fermi energy $E_F \in (-3, 3)$ meV with respect to the charge neutrality point [see the dispersion relation in Fig. 1(b)]. In the quantum spin Hall insulator phase the opposite spin currents flow at the opposite edges of the ribbon [see Fig. 1(a)]. The input lead splits into two channels of the same width. In the topological phase this spindle-shaped connection separates the opposite spin currents to the two channels [Fig. 1(a)].

The split channels are connected to a semi-infinite open plane of silicene [Fig. 1(a)] with smoothed extensions that prevent backscattering. At open half plane, the areas marked

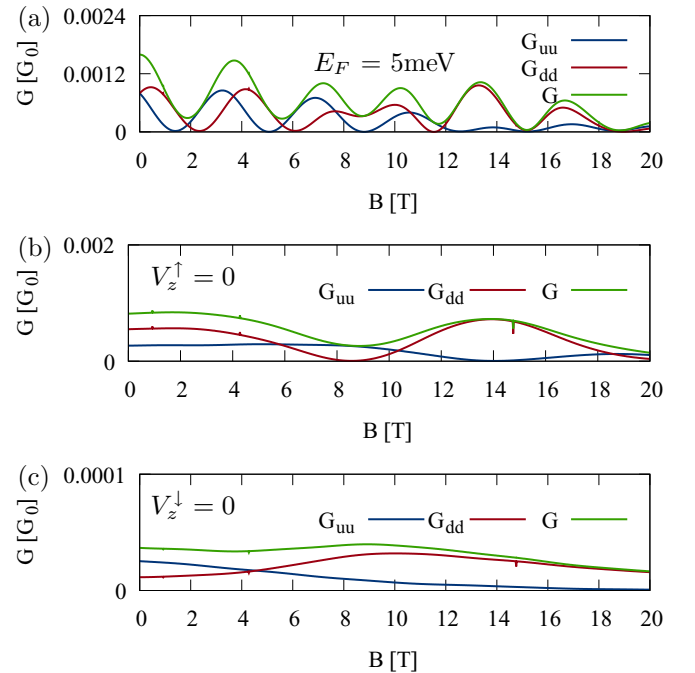


FIG. 2. Conductance with both channels (a), the upper (b) and lower (c) channel open for $E_F = 5$ meV (outside the QSHE regime). In (b) [(c)] the 100 meV/Å vertical electric field is applied to the lower [upper] channel.

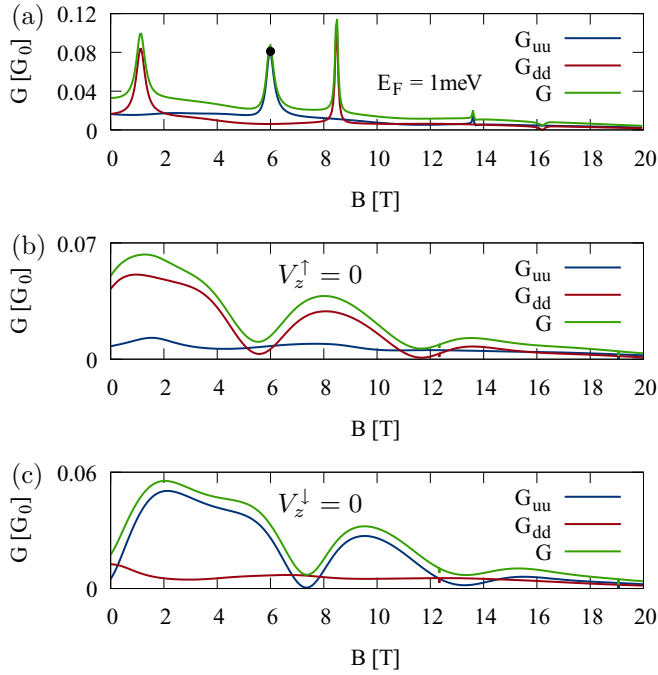


FIG. 3. (a) Two-slit interference for $E_F = 1$ meV (in the QSHE regime) in comparison to the one-slit transmissions (b, c). In (b) the upper slit is open ($V_z^{\uparrow} = 0$ and $V_z^{\downarrow} = 100$ meV/Å), while in (c) the lower slit is open ($V_z^{\uparrow} = 100$ meV/Å and $V_z^{\downarrow} = 0$).

by the gray color fading to white in Fig. 1(a), we attach wide silicene ribbons that make the edges of the computational box reflectionless. For $E_F > 3$ meV [Fig. 1(b)] the current flows through the bulk of the channel for both spin orientations, and we refer to these conditions as the normal phase. In the normal phase the current flows through both split channels for both spin orientations. The Young interference of the waves entering the open half plane by different slits can only occur in the normal phase. In the topological phase each of the slits feeds opposite spin. Thus, observation of the Young interference should depend on the Fermi energy. In order to

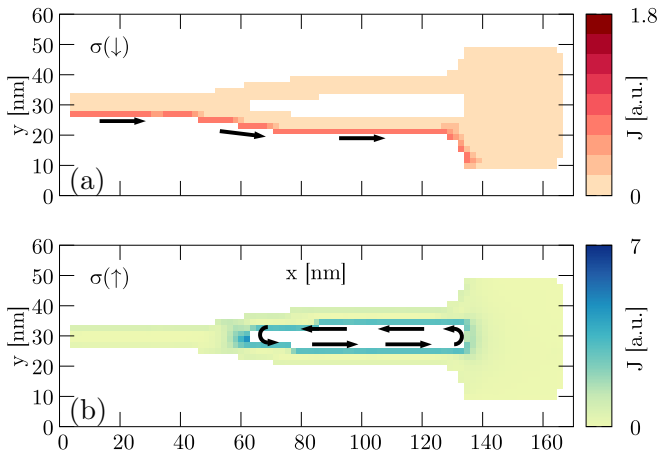


FIG. 4. The current map for $E_F = 1$ meV and $B = 6$ T [marked by dot in Fig. 3(c)]. Subplot (a) is for mode k_i associated with spin down [$\sigma(\downarrow)$] and (b) is for the spin up [$\sigma(\uparrow)$].

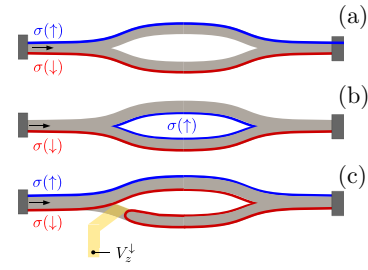


FIG. 5. Sketch of the quantum ring formed by reflection of the fork channel of Fig. 1. The current distributions observed in the QSH phase are given for off-resonant (a) and resonant (b) conditions and for the entrance of the lower lead closed by a local electrostatic potential.

monitor the interference in the model device [Fig. 1], at 32 nm to the right of the slit opening a zigzag ribbon of width 6.5 nm is connected as a detector [33]. In order to gain additional control in the interference device, we introduce local gates (yellow gates in Fig. 1) to switch off the currents.

Figure 2(a) shows the conductance in the absence of the electric field in the gated area in the normal phase for $E_F = 5$ meV. The conductance for both spin orientations and the total conductance undergo periodic oscillations in the external magnetic field with a period of about 4 T, which is the Aharonov-Bohm period for the area of about 1000 nm² enclosed between the electron paths passing through the split channels to the detector. For the lower [Fig. 2(b)] or upper [Fig. 2(c)] channel cut off by the vertical electric field, the Aharonov-Bohm conductance oscillations disappear, which is a signature of the switched-off two-slit interference.

In the QSH phase [Fig. 3(a)] we do not observe the regular AB oscillations, even for both channels open. The wave function for each spin passes through a single slit to the half plane so no Young interference can occur. Instead, in Fig. 3(a) we find sharp peaks of conductance which correspond to

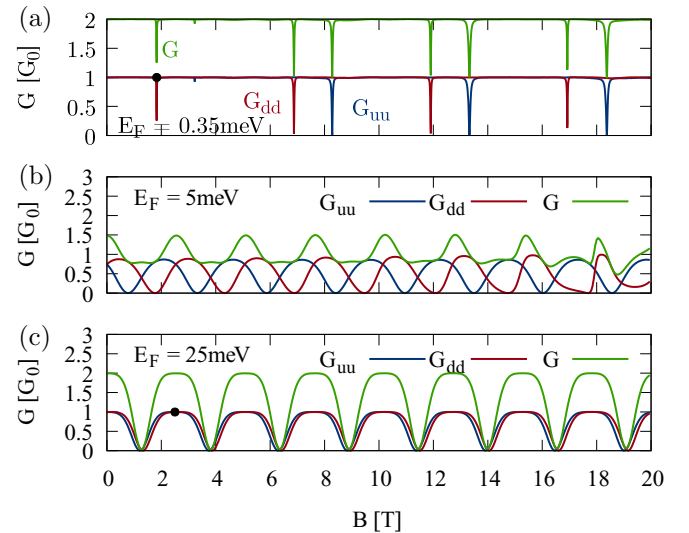


FIG. 6. Conductance of the quantum ring in the (a) QSH regime $E_F = 0.35$ meV and in the normal conditions for $E_F = 5$ meV (b) and 25 meV (c) in the absence of vertical electric field.

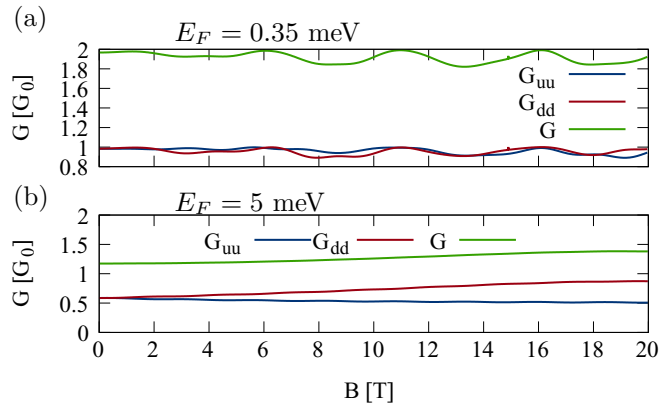


FIG. 7. (a, b) Same as Figs. 6(a) and 6(b) but in the presence of the local electric field in the entrance to the lower lead [Fig. 5(c)].

localized resonances with the current circulation around the etched area [see Fig. 4(b) for the point marked by the dot in Fig. 3(a)]. The local electric field which cuts off the upper or lower channels excludes the current circulation, and the rapid features of the conductance dependence on the external field disappear [Figs. 3(b) and 3(c)]. For one of the closed channels [Figs. 3(b) and 3(c)] the dominant spin in the detector is somewhat counterintuitive: when the lower channel—preferred by the spin-down currents—is closed, the calculated G_{dd} is much larger than G_{uu} [Fig. 3(b)] for a general B . The reason for this is that for $V_z^\downarrow \neq 0$ the spin-down current is directed to the upper channel where it flows near its lower edge and thus is closer to the detector.

B. Ring geometry

Similar control of the two-path interference effects can be obtained in a quantum ring [Fig. 5] formed by reflection of the split channel of Fig. 1(a). The calculated conductance in the QSH regime is given in Fig. 6(a) for $E_F = 0.35$ meV. For a general magnetic field the system is transparent for the electron flow [Fig. 5(a)]. Sharp dips of conductance appear [Fig. 6(a)] by interference with the localized loops of current stabilized near the inner edge of the ring [Fig. 5(b)]. Note that in the open system the conductance peaked by interference with localized states, because the signal received by the detector came from leakage [Fig. 3(a)] of the resonant current loop. The localized resonances are only weakly coupled to

the leads, hence their long lifetime, which is translated to narrow resonance widths. Under normal transport conditions [Figs. 6(b) and 6(c)], no sharp resonances appear and smooth AB oscillations appear with the period independent of the energy. For higher energy [Fig. 6(c)] the contribution of opposite spins to conductance becomes equal.

For the gate that cuts off the current flow across the lower channel [Fig. 5(c)], the dips due to the localized states disappear in the QSH regime [Fig. 7(a)] and the AB oscillations are removed in the normal conditions [Fig. 7(b)]. For the normal conditions at $B = 0$, the closed lower channel reduces the conductance significantly. In the QSH conditions, both spin currents find their way to the exit of the ring, although the path for the spin-down current becomes quite complex [Fig. 5(c)].

IV. SUMMARY

We have demonstrated that gated interference devices can be defined in silicene to allow for detection of the quantum spin Hall transport conditions by reaction of the conductance to the local electric fields closing one of the paths for the electron flow.

Considering double-slit geometry, the topological transport can be distinguished by sharp peaks in conductance—without any oscillations—in dependence of increasing external magnetic field amplitude. Conductance peaks are caused by localized resonances that occur as current flow around etched area. However, the normal transport is characterized by smooth Aharonov-Bohm oscillations.

In the system with ring geometry, the topological state is observed by sharp dips in conductance (in contrast to peaks in double slit), but the explanation of an effect remains the same, as well as for the normal transport recognition with Aharonov-Bohm oscillations.


ACKNOWLEDGMENTS

B.R. and A.M-K. are supported by the Polish Government budget for science 2017–2021 within the “Diamen-towy Grant” project (Grant No. 0045/DIA/2017/46). B.R. acknowledges the support of EU Project POWER.03.02.00-00-I004/16. B.S. acknowledges the support of NCN Grant No. DEC-2016/23/B/ST3/00821. The calculations were performed on the PL-Grid Infrastructure at ACK Cyfronet AGH.

- [1] M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055502 (2012); M. Ezawa, E. Salomon, P. De Padova, D. Solonenko, P. Vogt, M. E. Dávila, A. Molle, T. Angot, and G. Le Lay, *Riv. Nuovo Cimento* **41**, 175 (2018).
- [2] C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
- [3] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [4] A. Molle, C. Grazianetti, L. Tao, D. Taneja, M. H. Alam, and D. Akiwande, *Chem. Soc. Rev.* **47**, 6370 (2018).
- [5] W.-F. Tsai, C.-Y. Huang, T.-R. Chang, H. Lin, H.-T. Jeng, and A. Bansil, *Nat. Commun.* **4**, 1500 (2013).
- [6] X. Q. Wu and H. Meng, *J. Appl. Phys.* **117**, 203903 (2015).
- [7] N. Missault, P. Vasilopoulos, V. Vargiamidis, F. M. Peeters, and B. Van Duppen, *Phys. Rev. B* **92**, 195423 (2015).
- [8] K. Shakouri, H. Simchi, M. Esmailzadeh, H. Mazidabadi, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **92**, 035413 (2015).
- [9] W. Luo, L. Sheng, B. G. Wang, and D. Y. Xing, *Sci. Rep.* **6**, 31325 (2016).
- [10] S. Chowdhury and D. Jana, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 126501 (2016).
- [11] N. H. D. Khang, Y. Ueda, and P. N. Hai, *Nat. Mater.* **17**, 808 (2018).

- [12] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [13] J. H. Bardarson and J. E. Moore, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056501 (2013).
- [14] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [15] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005); **95**, 146802 (2005).
- [16] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [17] M. König, S. Wiedemann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- [18] A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S. C. Zhang, *Science* **325**, 294 (2009).
- [19] C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Nat. Phys.* **8**, 485 (2012).
- [20] C. Liu, T. L. Hughes, X.-L. Qi, K. Wang, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 236601 (2008).
- [21] I. Knez, R.-R. Du, and G. Sullivan, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 136603 (2011).
- [22] E. Prada, P. San-Jose, L. Brey, and H. A. Fertig, *Solid State Commun.* **151**, 1075 (2011).
- [23] J. D. Sanchez-Yamagishi, J. Y. Luo, A. F. Young, B. M. Hunt, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, *Nat. Nanotechnol.* **12**, 118 (2017).
- [24] F. Finocchiaro, F. Guinea, and P. San-Jose, *2D Mater.* **4**, 025027 (2017).
- [25] A. Molle, J. Goldberger, M. Houssa, Y. Xu, S.-C. Zhang, and D. Akinwande, *Nat. Mater.* **16**, 163 (2017).
- [26] Z. Liu, C.-X. Liu, Y. S. Wu, W. H. Duan, F. Liu, and J. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 136805 (2011).
- [27] E. Scalise, M. Houssa, E. Cinquanta, C. Grazianetti, B. van den Broek, G. Pourtois, A. Stesmans, M. Fanciulli, and A. Molle, *2D Mater.* **1**, 011010 (2014).
- [28] C. Nunez, F. Domínguez-Adame, P. A. Orellana, L. Rosales, and R. A. Römer, *2D Mater.* **3**, 025006 (2016).
- [29] B. Rzeszutowski and B. Szafran, *Phys. Rev. B* **98**, 075417 (2018).
- [30] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
- [31] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, *Nano Lett.* **12**, 113 (2011).
- [32] K. Kolasinski, B. Szafran, B. Brun, and H. Sellier, *Phys. Rev. B* **94**, 075301 (2016).
- [33] P. Khatua, B. Bansal, and D. Shahar, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 010403 (2014).

Topologically protected wave packets and quantum rings in silicene

Bartłomiej Szafran , Bartłomiej Rzeszutarski, and Alina Mreńca-Kolasińska

AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science, al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Poland



(Received 20 May 2019; revised manuscript received 22 July 2019; published 22 August 2019)

We study chiral wave packets moving along the zero line of a symmetry-breaking potential of vertical electric field in buckled silicene using an atomistic tight-binding approach with initial conditions set by an analytical solution of the Dirac equation. We demonstrate that the wave packet moves with a constant untrembling velocity and with a preserved shape along the zero line. Backscattering by the edge of the crystal is observed that appears with the transition of the packet from K to K' valley or vice versa. We propose a potential profile that splits the wave packet and next produces interference of the split parts that acts as a quantum ring. The transition time exhibits Aharonov-Bohm oscillations in the external magnetic field that are translated to conductance oscillations when the intervalley scattering is present within the ring. We study wave packet dynamics as function of the width of the packet up to the limit of plane waves. In the stationary transport limit the conductance oscillation period is doubled and the scattering density oscillates between the left and right arms of the ring as function of the magnetic field. We demonstrate that this effect is also found in a quantum ring defined by the zero lines of the symmetry-breaking potential in bilayer graphene.

DOI: [10.1103/PhysRevB.100.085306](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.085306)

I. INTRODUCTION

In monolayer honeycomb materials, including graphene [1], Xenes [2] (silicene [3,4], germanene [4,5], stanene [6]), transition metal dichalcogenides [7], or bismuthene [8], the Fermi level appears in two nonequivalent valleys of the Brillouin zone. In graphene ribbons [9] with zigzag edges there is a strict correspondence between the valley state and the direction of the current flow [10–12]. The valley protects the chiral [13] electron transport from backscattering by long-range potential disorder, which led to the valley electronics [14,15] or application of the valley degree of freedom to information processing [15–17].

In bilayer [18] and staggered monolayer graphene [19] a topological confinement inside the sample, far from the edges, was found [18,19] along a zero line of inversion-symmetry-breaking potential. For bilayer graphene [20] this potential is introduced by an electric field perpendicular to the layers [18]. The bias opens the energy gap in the band structure [20,21]. For an inhomogeneous electric field that is inverted at the zero line in space, topologically protected chiral currents have been found [18] confined in space to a region of the electric field flip. The flip line provides a one-dimensional confinement or quantum-wire-type channels [22–25]. The one-dimensional confinement of currents is also found in the quantum Hall conditions at the n-p junctions [26] induced by electric fields. In contrast to the currents localized at the n-p interface [27–29], the confinement in zero-line channels does not require external magnetic field [18]. Note that formation of an energy gap was also found in epitaxial monolayer graphene due to the sublattice symmetry breaking by the substrate [30]. However, the gap of this origin cannot be easily inverted for the topological confinement.

A perpendicular electric field opens the energy gap for the buckled Xenes monolayers [2,31,32], and an inversion of the

field induces topological confinement similarly as in bilayer graphene [33]. In contrast to bilayer graphene, (i) in Xenes the chiral energy level that passes from the valence to the conduction band is a linear function of the wave vector. In Xenes a (ii) single topological state per current direction is present instead of two as in bilayer graphene. As a consequence of (i) and (ii) the wave packet formed at zero line in Xenes should be stable against excitations and should travel with a constant shape due to independence of the velocity on the wave vector.

In this paper we study the dynamics of the chiral wave packets along the zero lines of the electric field in silicene [2,34–39], the Xenes material for which the gating technology is the most advanced, with a successful application for the field effect transistor [40]. We find that the chiral wave packets move with the Fermi velocity and the motion of the topological packets is free from Zitterbewegung [41–44], which is characteristic to the solution of the Dirac equation and is found also for Weyl fermions in graphene [42,43,45]. Moreover, the topological electron packets move with a constant shape, similarly to solitons, that in other conditions require interaction with the environment—see the electron solitons self-focused with interaction to the metal gates in heterostructures [46] or the Trojan wave packets formed by carefully prepared electromagnetic field [47,48].

We show that the chiral electron packets can be transferred from one valley to the other by backscattering from the edge of the crystal and we find that the packet appears in the opposite valley in a restored shape. Potential profiles that act as beam splitters and quantum rings [49] are proposed. An interference of the split parts of the wave packet can be controlled by external magnetic field threading the quantum ring. The ring stores the wave packet for a time that is a periodic function with the period the flux quantum. The Aharonov-Bohm [50] conductance oscillations are also demonstrated for the system with an intervalley scattering present. The

topological rings are a new form of quantum rings for Dirac electrons, with respect to previously considered systems with structural confinement [51–55], mass confinement [56–58] or the confinement at circular n-p junctions in the quantum Hall conditions [59].

In the long wave packet limit, i.e., when the width of the packet is comparable with the diameter of the ring, the interference within the ring is translated into an imbalance of the scattering density in the left and right arms of the ring that becomes a periodic function with doubled Aharonov-Bohm period. The result is also found in the stationary transport for silicene and bilayer graphene.

This paper is organized as follows. In Sec. II we provide an analytic solution to the Dirac equation for the topologically protected currents at the inversion of the electric field (Sec. II A). In Sec. II B the solution of the continuum approximation (Sec. II A) is translated to atomistic tight-binding description which naturally accounts for the intervalley scattering, and the time stepping procedure is explained. In the Sec. III we test the stability of the wave packet against the intervalley transition (Sec. III A) and describe the Aharonov-Bohm [50] oscillations of the electron storage time by the ring (Sec. III B). Section III C describes the conductance oscillations for intervalley scattering within the ring. The long wave packet limit is discussed in Sec. III D, and the limit is confronted with the standard calculation based on the stationary electron scattering in Sec. III E. Section III F shows the results of the Landauer approach for quantum rings defined by the zero lines in bilayer graphene. Section IV contains the summary.

II. THEORY

A. Chiral currents confined by the energy gap inversion

The chiral currents at the band inversion in silicene similar to the ones in bilayer graphene [18] were found in Ref. [33]. For buckled monolayers as well as for bilayer systems the energy gap can be tailored in space using multiple split gates with inverted polarization. The idea of the local manipulation of the energy gap by dual split gates was proposed for topological confinement [18] and pseudospin electronics in bilayer systems [60–62].

Here, we consider a buckled silicene monolayer sandwiched in between top and bottom gates [Figs. 1(a) and 1(b)]. The gates are split, so that the electric field changes orientation along the y axis (i.e., for $x = 0$). We model the potential at the A sublattice using an arctangent function,

$$V_A(x) = \frac{2V_g \arctan(x/\lambda)}{\pi}. \quad (1)$$

We assume that the silicene is embedded symmetrically between the gates, so that on the B sublattice we have $V_B(x) = -V_A(x)$ [Fig. 1(c)]. The potential bias between the sublattices opens an energy gap in the band structure [31,32]. For potential of Eq. (1) the energy gap is inverted at $x = 0$ by the flip of the electric field orientation.

For the wave function components defined on sublattices $\psi = (\psi_A, \psi_B)^T$ the low-energy approximation to the atomistic tight-binding Hamiltonian reads [33]

$$H_\eta = \hbar v_F (k_x \tau_x - \eta k_y \tau_y) + V(\mathbf{r}) \tau_z - \eta \tau_z \sigma_z t_{SO}, \quad (2)$$

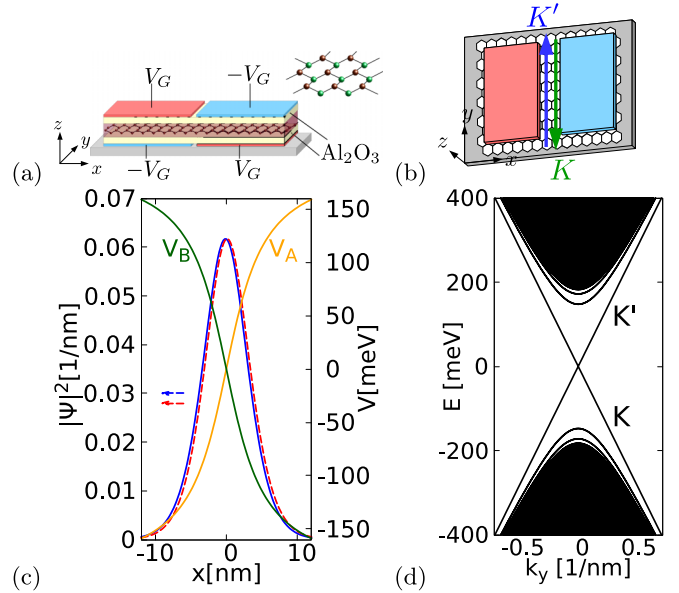


FIG. 1. (a) Schematic side view of a silicene monolayer embedded in a dielectric sandwiched between top and bottom gates with the A sublattice on top (red dots in the inset) closer to a positively $V_G > 0$ biased top gate (red color) gated inducing a negative potential energy for $x < 0$. (b) Top view of the system. The K' (K) valley current flows leaving the negative (positive) potential energy on the A sublattice on the left hand side. The flake has a zigzag (armchair) termination at the edges with constant y (x). (c) The potential profile on the A and B sublattices (right axis) and the wave function on the A sublattice as calculated in the continuum approximation [Eq. (6)]. The blue solid (red dashed) lines show the wave functions with the positive (negative) product of the valley index η and the spin σ_z eigenvalue for $\lambda = 4$ nm and $V_g = 0.2$ eV. (d) The dispersion relation calculated numerically.

where η is the valley index ($\eta = 1$ for the K valley and -1 for the K' valley), τ_x , τ_y , and τ_z are the Pauli matrices in the sublattice space, $\mathbf{k} = -i\nabla$, the Fermi velocity v_F is determined by the nearest distance between Si atoms $d = 2.25$ Å and the tight-binding hopping parameter $t = 1.6$ eV [4,36], $v_F = 3dt/2\hbar$. In Eq. (2) $t_{SO} = 3.9$ meV is the intrinsic spin-orbit coupling constant [4,36]. The intrinsic spin-orbit coupling is diagonal in the basis of eigenstates of the z component of the spin and $\sigma_z = \pm 1$ is treated as a quantum number.

With potential given by Eq. (1) the Hamiltonian commutes with the $\frac{\partial}{\partial y}$ operator. The common eigenfunctions of the energy and y momentum component can be put in form $\psi^{k_y}(x, y) = \exp(ik_y y) [\psi_A^{k_y}(x) \quad \psi_B^{k_y}(x)]^T$. The Hamiltonian eigenfunctions fulfill the system of equations

$$\frac{[V_A(x) - E - \eta \sigma_z t_{SO}] \Psi_A(x)}{i\hbar v_F} = (\Psi'_B - \eta k_y \Psi_B), \quad (3)$$

$$\frac{[-V_A(x) - E + \eta \sigma_z t_{SO}] \Psi_B(x)}{i\hbar v_F} = (\Psi'_A + \eta k_y \Psi_A), \quad (4)$$

where the prime stands for x derivative. We plug in Eqs. (3) and (4) a relation $\Psi_B = i\Psi_A$, i.e., a guess based on a numerical solution that allows us to derive an analytical solution for states localized near the zero-line area. A sum of the resulting

equations relates the potential and the wave function

$$V_A(x) - \eta\sigma_z t_{\text{SO}} = -\hbar v_F \frac{\partial}{\partial x} \ln \Psi_A(x). \quad (5)$$

For the specific form of potential given by Eq. (1) the (un-normalized) wave function is found by a standard integration technique

$$\Psi_A = (\lambda^2 + x^2)^{\frac{\lambda V_g}{\pi \hbar v_F}} e^{-\frac{2V_g x}{\pi \hbar v_F} \arctan \frac{x}{\lambda} + \frac{\eta \sigma_z t_{\text{SO}} x}{\hbar v_F}}. \quad (6)$$

The term $x \arctan(x/\lambda)$ in the exponent for low x introduces a Gaussian-like dependence to the wave function and keeps it localized near the band inversion area [Fig. 1(c)]. The average value of $\langle x^2 \rangle^{1/2}$ for $\lambda = 1, 2, 4, 12$, and 20 nm is 2.45, 2.87, 3.55, 5.45, and 6.83 nm, respectively. In presence of the spin-orbit coupling the wave function is not ideally symmetric with respect to the center of the gap inversion line: the term including the spin-orbit coupling shifts the wave function at left (right) of the inversion line for negative (positive) product of valley index η and the σ_z eigenvalue. For the applied parameters these shifts are not very strong – see the blue and red lines in Fig. 1(c). In the calculations below we set $\sigma_z = 1$.

The energy of the states localized at the gap inversion can be calculated by adding Eqs. (3) and (4) still with the relation $\Psi_B = i\Psi_A$, which gives

$$E = -\eta \hbar k_y v_F. \quad (7)$$

The entire dispersion relation calculated numerically with a finite difference approach [63] is given in Fig. 1(d). The linear band energy is independent of the V_g or λ which only affect the transverse wave function localization at the energy gap inversion line. Above the energy gap a continuous spectrum is found with a parabolic in k_y . Near the zero energy only the localized reflectionless currents flow, and for $V_g = 200$ meV, the gap is wide enough to make the currents stable at room temperature. For the Fermi wave vector $k_F \simeq 0.25$ nm⁻¹ ($E_F \simeq 100$ meV) the continuum appears still 100 meV above the linear band.

The sign of the electron velocity within the linear band $v(k_y) = \frac{1}{\hbar} dE/dk_y = -\eta v_F$ depends on the valley index. Hence, the transport at the inversion line is chiral, i.e., the electron states of the valley K' (K) go up (down) along the electric field flip line [Fig. 1(b)]. Generally, in the states localized along the field flip the current in the K' (K) valley flows with the negative (positive) potential at the A sublattice at the left-hand side.

B. Chiral wave packets in the atomistic tight-binding approach

1. Atomistic Hamiltonian

Since the electron velocity in the linear chiral band is independent of k_y the wave packet localized at the flip of the electric field should move with an unchanged shape along the $x = 0$ line. The description of the electron wave packets stabilized by the valley degree of freedom calls for an approach that takes into account the intervalley scattering. A natural choice is the atomistic tight-binding approach. The positions of the ions of the A sublattice $\mathbf{r}_m^A = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2$ are generated with the crystal lattice vectors $\mathbf{a}_1 = a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$ and $\mathbf{a}_2 = a(1, 0, 0)$, where $a = 3.89$ Å is the silicene lattice

constant, and m_1, m_2 are integers. The B sublattice ions are generated by $\mathbf{r}_m^B = \mathbf{r}_m^A + (0, d, \delta)$, with the vertical shift of the sublattices $\delta = 0.46$ Å. The coordinates of the center of the valleys in the reciprocal space are $\mathbf{K}_\eta = (\frac{4\pi\eta}{3a}, 0)$ [35]. The valleys for $\eta = 1$ (-1) are referred to as K (K').

We use the Hamiltonian [34,36,64]

$$H_{TB} = -t \sum_{\langle m,l \rangle} p_{ml} c_m^\dagger c_l + it_{\text{SO}} \sigma_z \sum_{\langle m,l \rangle} p_{ml} v_{ml} c_m^\dagger c_l + \sum_m V(\mathbf{r}_m) c_m^\dagger c_m + \frac{g\mu_B B}{2} \sigma_z, \quad (8)$$

where $\langle m, l \rangle$ stands for the nearest-neighbor ions, $\langle \langle m, l \rangle \rangle$ for the next-nearest-neighbor ions. For the potential $V(\mathbf{r}_m)$ we take $V_A(\mathbf{r}_m)$ or $V_B(\mathbf{r}_m)$. The sign $v_{ml} = \pm 1$ is plus (minus) for the next-nearest-neighbor hopping path via the common neighbor ion that turns counterclockwise (clockwise).

In Eq. (8) p_{ml} is the Peierls phase $p_{ml} = e^{i\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_m}^{\mathbf{r}_l} \vec{A} \cdot d\vec{l}}$, where $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ is the vector potential, and B is the value of the magnetic field that is oriented perpendicular to the silicene plane. The last term in Eq. (8) is the spin Zeeman term with the Landé factor $g = 2$, and Bohr magneton μ_B .

2. Initial condition and the time-stepping

In the calculations to follow for the initial condition we use the solution of the continuum Hamiltonian [Eq. (2)] and localize the packet along the band inversion using an envelope of form $\frac{1}{1 + \frac{(y-y_0)^2}{D^4}}$, with $D = 80$ nm and y_0 that sets the center of the packet. We set the valley momentum with a plane wave and the K or K' coordinates. Accordingly, for the atoms of the A sublattice we set as the initial condition

$$\psi(\mathbf{r}_m^A, t=0) = \exp[i(\mathbf{K}_\eta + \mathbf{k}_y) \cdot \mathbf{r}_m^A] \chi(y_m^A), \quad (9)$$

where $\mathbf{k}_y = (0, k_y, 0)$ is the wave vector of the packet calculated with respect to the valley center, and Ψ_A is given by Eq. (6). For the atoms on the B sublattice we take

$$\psi(\mathbf{r}_m^B, t=0) = i\eta \exp[i(\mathbf{K}_\eta + \mathbf{k}_y) \cdot \mathbf{r}_m^B] \chi(y_m^B), \quad (10)$$

where $\chi(y) = \frac{\Psi_A(y)}{1 + \frac{(y-y_0)^2}{D^4}}$. We set $k_y = 0$ unless stated otherwise.

We solve the Schrödinger equation on the atomic lattice $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$, using the time step of $dt = 10$ atomic units or $dt = 2.418 \times 10^{-4}$ ps. The wave function at the first step is calculated with the implicit Crank-Nicolson scheme $\psi(dt) = \psi(0) + \frac{dt}{2i\hbar} H_{TB}[\psi(0) + \psi(dt)]$. The subsequent time steps are calculated with the explicit Askar-Cakmack scheme $\psi(t+dt) = \psi(t-dt) + \frac{2dt}{i\hbar} H_{TB}\psi(t)$. In presence of the external magnetic field the eigenstates of (3,4) need to be calculated numerically [63]. However, for the discussed range of the magnetic field ($B < 1$ T) and the applied narrow flip area ($\lambda = 4$ nm) no significant difference between the numerical eigenstates and formula of Eq. (6) used for the initial condition were found in the wave packet evolution.

III. RESULTS

A. Wave packet motion

We first consider a square flake $(x, y) \in [-300 \text{ nm}, 300 \text{ nm}] \times [-300 \text{ nm}, 300 \text{ nm}]$ with a zigzag

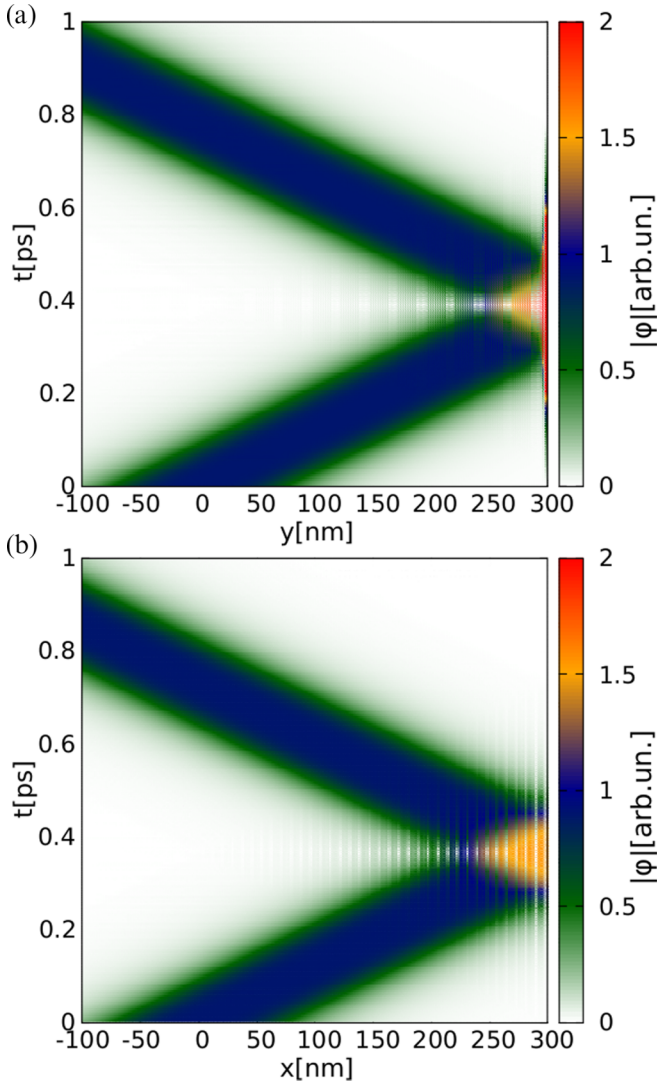


FIG. 2. Time evolution of the absolute value of the electron packet ($|\phi|$) backscattered by the zigzag (a) and armchair (b) edge of the flake. The square flake has a zigzag edge at $y = 300$ nm (a) and an armchair edge at $x = 300$ nm (b). The plots show the absolute value of the wave function at the inversion of the energy band that is introduced at $x = 0$ (a) and at $y = 0$ (b). For the zigzag edge the wave packet is temporarily localized at the edge. The vertical fringes observed at the backscattering result from the superposition of the incoming and outgoing waves from the opposite valleys K and K' .

edge at $y = \pm 300$ nm and armchair edge at $x = \pm 300$ nm. The packet is set in the K' valley ($\eta = -1$) to make it move upwards [to increasing y values—see Fig. 1(b)]. Figure 2(a) shows the cross section of the packet along the $x = 0$ line. The packet indeed moves up in a stable form until it reaches the zigzag edge of the flake.

The same result—as long as the packets does not reach the edge—is obtained for the solution of the time dynamics with the continuum Hamiltonian [by Eq. (2)]. The absence of Zitterbewegung [41–44] for the wave packet that follows the Dirac equation calls for a comment. The velocity operator is obtained as $\hat{v}_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_0}{\partial k_y} = -\eta \tau_y v_f$ [42]. For the Dirac equation this operator does not commute with the Hamiltonian

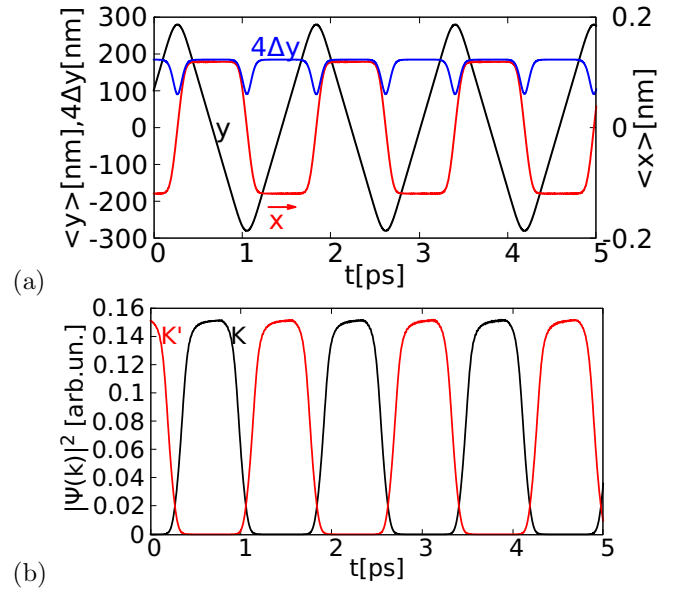


FIG. 3. (a) The average position in the y (black line, left axis) direction for the wave packet scattered by the armchair edge of the flake. The spread of the wave packet $\sqrt{\langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle}$ multiplied by 4 (blue line, left axis), and the average position at the x axis (right axis, red line). The variation of $\langle x \rangle$ are due to the spin-orbit coupling and the valley transitions that follow the backscattering by the edge [see. Eq.(6)]. The electron spin is set at $\sigma_z = +1$. The parameters of the system are the same as in Fig. 2(a), only the packet is started with the initial average position at $y_0 = 100$ nm. (b) The Fourier transform of the packet calculated for the K' (red) and K valley (black).

$[H_\eta, v_y] \neq 0$ which is usually invoked in the interpretation of the trembling motion [42]. However, the wave function localized at the zero line that follows the specific form used in Sec. II A $\Psi = (\Psi_A, i\Psi_A)^T$ happens to be an eigenfunction of the \hat{v}_y operator, with the eigenvalue $v_y = -\eta v_f$. By, the Ehrenfest theorem for we have $\frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{v}_y | \Psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | [\hat{v}_y H - H \hat{v}_y] | \Psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} (\langle H \hat{v}_y \Psi | \Psi \rangle - \langle \Psi | H \hat{v}_y \Psi \rangle) = \frac{1}{i\hbar} (-\eta v_f \langle H \Psi | \Psi \rangle + \eta v_f \langle \Psi | H \Psi \rangle) = 0$, hence the constant velocity of the packet.

B. Backscattering by the flake edge

The zigzag edge of the crystal supports edge localized states. The incident packet couples to these states and in Fig. 2(a) we find formation of a high peak of the absolute value of the wave function (see the red region at the right edge of the plot for $t \simeq 0.4$ ps). The packet is backscattered and moves to the left with a shape restored to its original form, only in the opposite direction.

The average position $\langle y \rangle$, $\langle x \rangle$, and the size of the packet along the junction $\Delta y \equiv \sqrt{\langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle}$ is plotted in Fig. 3(a). The system is the same as in Fig. 2(a) only the packet is started at $y_0 = 100$ nm. In Fig. 3(b) we additionally plot the square of the absolute value of the Fourier transform of the wave packet calculated for K and K' valleys,

$$\psi(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{2\pi} \int \psi(x, y, t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (11)$$

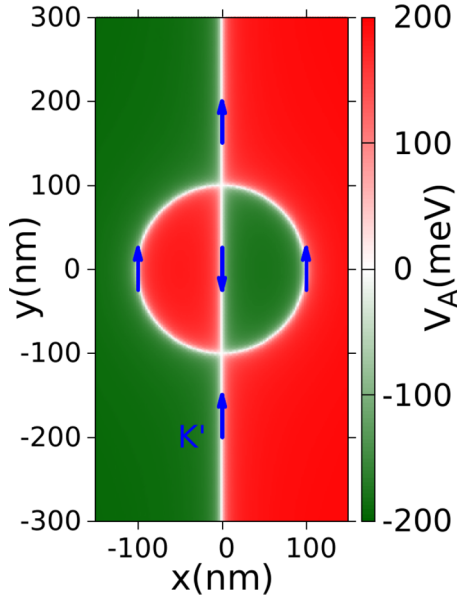


FIG. 4. The potential at the A sublattice for a quantum ring of radius 100 nm. The potential at the B sublattice is assumed opposite. The arrows indicate the orientation of the K' currents. The currents in the K valley flow in the opposite direction.

for $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{-1}$ (i.e., the K' valley) and $\mathbf{k} = \mathbf{K}_1$ (K valley). We find that as the packet reaches the edge of the flake it is scattered to the other valley that makes it travel in the opposite direction. In Fig. 3(a) we can also see that the average $\langle x \rangle$ oscillates with a small magnitude which results from the valley flips at the backscattering by the edge which changes the sign of the exponent with t_{SO} in the wave function (σ_z is set to 1).

We find that the restoration of the chiral packet upon scattering is observed for both the armchair and the zigzag termination of the flake. For backscattering by the armchair edge we rotated the potential within the flake by $-\pi/2$ angle. The packet which is still started in the K' valley moves toward larger x values until it reaches the edge [Fig. 2(b)]. Here no peak of the wave function at the edge is observed since the armchair termination does not support the edge localized states [65].

C. Quantum ring

A form of a quantum ring with the chiral wave guides for the electron flow can be defined with an engineering of the electric field. For that purpose one needs a local inversion of the electric field which requires additional top and bottom gates in the system. Here we consider a circular area of radius R , and set the model potential at the A sublattice to

$$V_A = \frac{4V_g}{\pi^2} \arctan\left(\frac{r-R}{\lambda}\right) \arctan\left(\frac{x}{\lambda}\right), \quad (12)$$

where $R = 100$ nm is the circle radius with the center at the origin and $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ is the distance from the origin. The potential at the A sublattice is plotted in Fig. 4. As above we take $V_B(\mathbf{r}) = -V_A(\mathbf{r})$. Figure 4 shows also the direction of the flow for currents in the K' valley—with the negative

(positive) potential at left (right) side of the current flow. When the line of $V_A = 0$ meets the ring at $y = -100$ nm the K' current can go to either the left or the right arm of the ring. This potential profile introduces a beam splitter for the electron wave packet in this way. The central bar of the ring is inaccessible for the K' current going up.

In quantum rings [49] Aharonov-Bohm [50] oscillations of coherent conductance are observed that in the Landauer-Büttiker [66] approach are explained as due to variation of the electron transfer probability across the ring with phase shifts accumulated from the vector potential of the magnetic field. In the present system the electron backscattering from the ring is prohibited by the topological protection of the valley current, so the transfer probability of the chiral wave packet is 1 for any magnetic field. However, we find that the time that the electron spends within the ring changes due to the phase shifts introduced by the vector potential.

In this section and in the rest of the paper we neglect the intrinsic spin-orbit coupling ($t_{SO} = 0$) that introduces a weak asymmetry in the electron injection to the ring due to the spin-valley dependent shift off the zero line [cf. Fig. 3(a) and Eq. (6)]. The calculations for the quantum ring require long leads to prevent return of the packet to the scattering area upon reflection from the edge of the crystal. For long wave packets the entire computational box is taken long up to $6 \mu\text{m}$. Systems these long are treated with the scaling method of Ref. [67] for which the crystal constant is scaled as $a_s = a s_f$ with the hopping parameter $t_s = t/s_f$. In Hamiltonian Eq. (8) t_s replaces t , and a_s replaces a while the Si ions are generated in the computational box. We use the scaling factor $s_f = 3$ or 4 in the calculations for silicene below.

Figure 5(a) shows the snapshots of the simulation of the packet transfer across the ring for $B = 0$. For $t = 0$ the packet is started 350 nm below the center of the ring of radius 100 nm. The snapshots taken at 0.204 and 0.325 ps show that the packet is split into two parts at the entrance to the ring. In both the left and right arms of the ring the K' current moves up leaving the negative potential at the A sublattice at the left-hand side [see Fig. 4]. The split packets meet at the exit of the ring [$t = 0.568$ ps and $t = 0.689$ ps] with the same phase and the packet of its original size is restored [$t = 0.810$ ps].

Figure 6(a) shows the parts of the packet before (“b4,” black lines) the ring, within (“in,” blue lines), as well as the transferred part (“passed,” red lines) as a function of time. The results for $B = 0$ that correspond to Fig. 5(a) are plotted with the solid lines. For $t = 0.75$ ps the entire packet is transferred above the ring.

Below we denote the magnetic field flux threading the ring by $\Phi \equiv B\pi R^2$. For $R = 100$ nm the flux is equal to the flux quantum $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ when $B = 0.13167$ T. In Fig. 5(b) we plotted the snapshots of the simulation for $B = 0.066$ T, which corresponds to $\Phi = \Phi_0/2$. The parts of the packet that meet at the exit ($t = 0.6$ ps) acquire a relative π phase due to the Aharonov-Bohm effect. A node of the wave function is formed at the exit to the upper channel. A nondestructive interference is observed within the area below the exit from the ring, which directs the packet to the internal bar within the ring ($t = 0.72$ ps), i.e., to the only path where the K' current can go for the exit to the upper channel blocked by

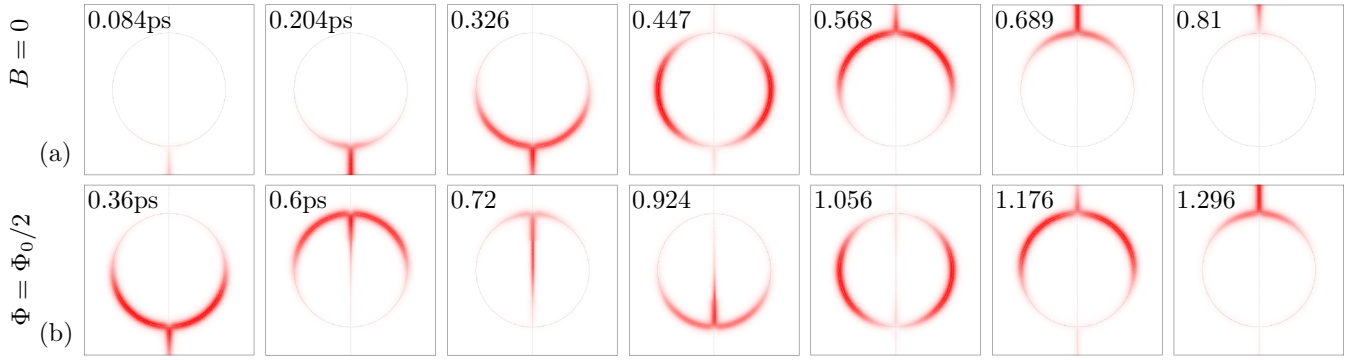


FIG. 5. The snapshots of the time evolution of the wave packet for $B = 0$ (a) and $B = 0.066$ T (b), which corresponds to the magnetic field flux across the ring of radius $R = 100$ nm $\Phi = B\pi R^2$ equal to half the flux quantum $\Phi_0 = h/e$, $\Phi = \Phi_0/2$. The time from the start of the simulation is given in picoseconds in the frames.

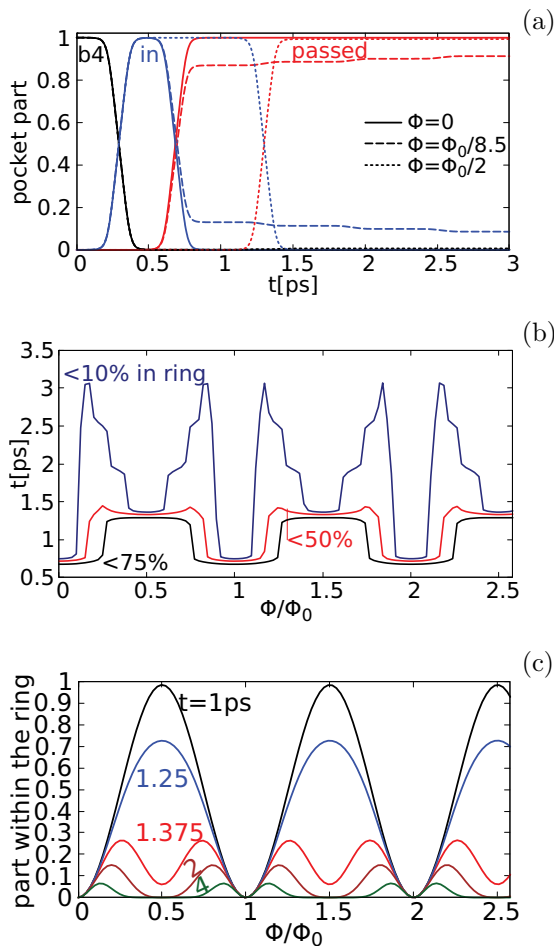


FIG. 6. (a) The part of the wave packet before the ring (black lines), inside the ring (blue lines), and above the ring (red lines) for zero magnetic field (solid lines), half of the flux quantum ($B = 0.066$ T), and the magnetic field corresponding to the flux equal to $\Phi_0/8.5$ ($B = 0.0155$ T). (b) The time at which less than 10% (blue line), 50% (red line), and less than 75% of the electron density stays within the ring as a function of the magnetic field flux through the ring of radius $R = 100$ nm. Local extrema of the times are found even and odd multiples of $\Phi_0/2$. (c) The part of the wave packet inside the ring for the selected moments in time from the start of the simulation.

the Aharonov-Bohm effect. The bar is transparent for the K' current going down [Fig. 4]. The packet is split again to the left and right arms of the ring at 0.924 ps. After the second round the parts of the packet meet in phase 2π at the exit and the packet smoothly leaves the ring [$t = 1.176$ ps, $t = 1.296$ ps].

In Fig. 6(a) the results for half the flux quantum are plotted with the dotted line. The packet is transferred to the exit with a delay but completely and in a single move. For comparison in Fig. 6(a) the results for the magnetic field of 0.0155 T which corresponds to $\Phi_0/8.5$ are plotted with the dashed lines. Here a part of the packet passes to the exit as fast as for $B = 0$, but due to a phase difference at the exit a part of the packet stays inside the ring and leaves it in portions at subsequent rounds, which produces the steps in the dashed lines in Fig. 6(a).

In Fig. 6(b) we plotted the moments in time for which less than 75%, less than 50% and less than 10% stays within the ring as a function of the external magnetic field. The plot is periodic with Φ_0 . The ring is emptied the fastest for the integer and half quanta. The result of Fig. 6(a) for $\Phi = \Phi_0/8.5$ (or $B = 0.0155$ T) corresponds to a local maximum of the time for which more than 10% of the packet stays within the ring. Finally, Fig. 6(c) shows the part of the packet contained within the ring for a fixed moment in time as a function of the magnetic field. For $t = 1$ ps and 1.25 ps the ring-confined part is locally maximal for the magnetic field corresponding to odd multiples of half the flux quantum. For longer times these maxima are turned into minima due to compensation of the phase difference after the second round of electron circulation [Fig. 5(b)] within the ring.

D. Intervalley scattering and conductance oscillations

For the potential profile plotted in Fig. 4 the transfer probability can fall below 1 only provided that a intervalley transition is present within the ring. The intervalley scattering is introduced by potential variation that is short on the atomic scale. For the modeling we introduced a point potential defect of a Lorentzian form

$$V_d(\mathbf{r}) = \frac{V_g}{1 + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_d)^2/l^2}, \quad (13)$$

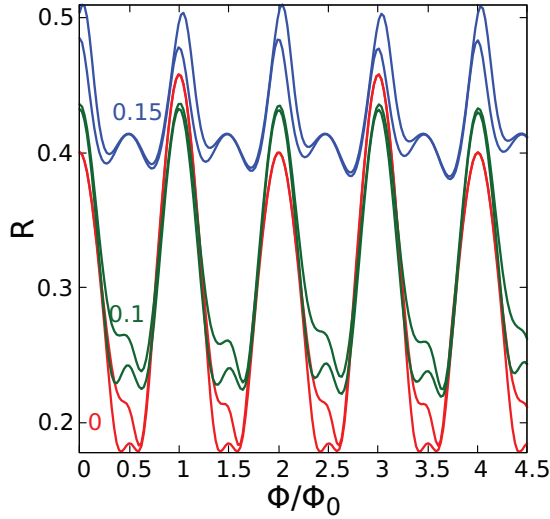


FIG. 7. The backscattering probability for a sharp perturbation to the potential given by Eq. (13) as a function of the magnetic field flux threading the ring of radius $R = 100$ nm. The red, green, and blue lines correspond to $k_y = 0, 0.1/\text{nm}$, and $0.15/\text{nm}$, respectively. For each value of k_y two lines are plotted: the lower and upper bound to the backscattering probability. The spacing between these two lines is given by the probability density localized within the ring at the end of the simulation (6.1 ps from the start).

where $\mathbf{r}_d = (R, 0, 0)$, and $V_g = 7.2/s_f^2$ eV and $l = 12a = 4.7$ nm. In the scaling approach [67] the smooth potential that changes slowly on the atomic scale, in particular, the one given by Eqs. (1) and (12) stays invariant with s_f . For the abrupt short-range defect potential we found that scaling of V_g with s_f is necessary to keep the same effectiveness of the intervalley scattering. The defect potential V_d enters with the same sign to potential on both sublattices, as $V_A + V_d$ on sublattice A and $V_B + V_d = -V_A + V_d$ on sublattice B.

In presence of the defect, the results start to change significantly with k_y . The backscattering probability R as a function of the external field is given in Fig. 7 for $k_y = 0, 0.1/\text{nm}$, and $0.15/\text{nm}$. For each value of k_y two lines are plotted, which are the minimal and maximal bound for the backscattering probability. The difference between the two is determined by the part of the electron packet that stays within the ring at the end of the simulation (6.1 ps). R as a function of B is approximately periodic with the period of flux quantum threading

the ring. The behavior of the electron packet is displayed in Fig. 8 for $B = 0$ and $k_y = 0.1/\text{nm}$. The packet is incident in the K' valley. For $t = 0.508$ ps we spot the scattering center near \mathbf{r}_d . A part of the packet passes across the defect moving still in K' valley, and a larger part is backscattered and move in the direction which is only allowed for the K valley. For $t = 0.628$ ps the K current reaches the entrance to the ring, a part of it is backscattered to the input channel, and another goes up along the bar. The electron packets of opposite valley meet within the bar for $t = 0.749$ ps and 0.87 ps. For $t = 0.991$ ps we can see recycling of currents for both the valleys: the K valley current cannot pass to the output channel and the K' one to the input channel. The opposite valley currents meet again, this time in the arms of the ring for $t = 1.11$ ps. For $t = 1.47$ ps the packet distribution is similar to $t = 0.87$ ps, only a smaller portion of the electron packet is still present within the ring.

E. The limit of long wave packets

The wave packet dynamics in the limit of a large size of the packet should approach the conditions of the stationary electron flow. To study the limit of a plane incident wave we consider a Gaussian envelope of the packet, i.e., in the initial condition given by Eqs. (9) and (10) we set $\chi = \exp[-(y - y_0)^2/4\sigma^2]/(2\pi\sigma^2)^{1/4}$. The Fourier transform of the packet produces the probability density with the standard deviation of $\sigma_k = \frac{1}{2\sigma}$ in the wave vector space.

We solve the time evolution and integrate the parts of the packet in the left and right arms of the ring and in the center bar over time as the packet transfers the ring. In Fig. 9 we plot the results for increasing length of the packet in the initial condition. The results for $\sigma = 30$ nm and $\sigma = 60$ nm are nearly identical. The packet passes equally through the left and right arms of the ring. The integrals in Figs. 9(a) and 9(b) are periodic functions of the magnetic field with the quantum of the flux threading the ring of radius $R = 100$ nm, as above. An asymmetry of the electron transfer across the arms appears for $\sigma = 120$ nm [Fig. 9(c)] and becomes very strong for $\sigma = 240$ nm [Fig. 9(d)]. Moreover, as the result of this asymmetry, the period of the integrals as functions of the magnetic flux threading the ring of radius R doubles and becomes equal to $2\Phi_0$. For explanation of this effect the solution of the stationary scattering problem of the next subsection is helpful.

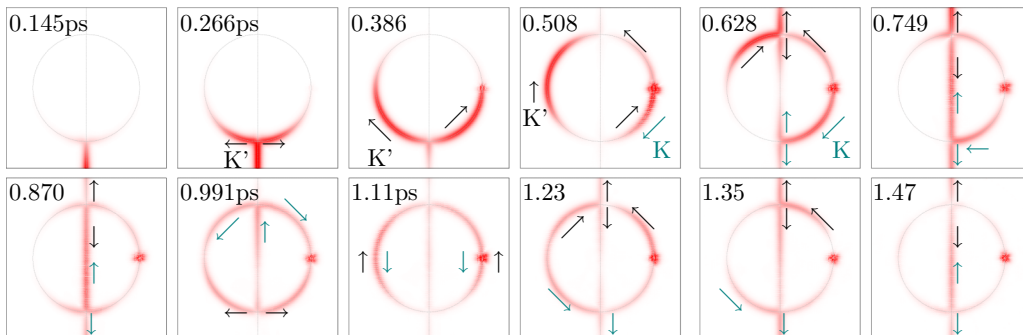


FIG. 8. Snapshots of the electron density for $B = 0$, $k_y = 0.1/\text{nm}$ [the green lines in Fig. 7(a)]. The blue (green) arrows indicate the motion of the parts of the packet moving in the K (K') valley. The time from the start of the simulation is given in picoseconds in the frames.

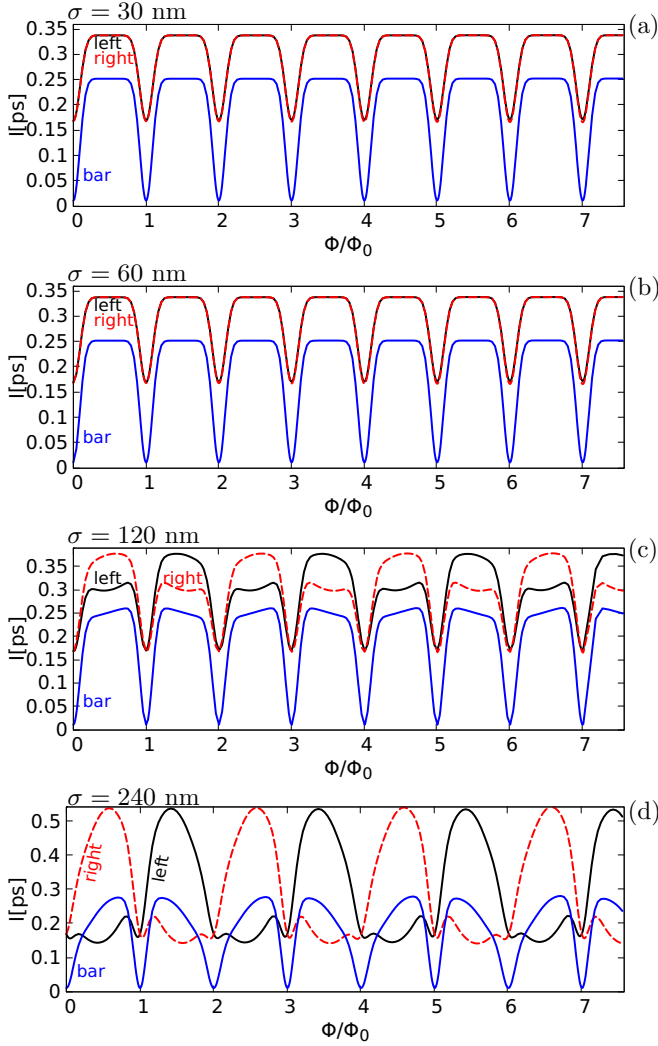


FIG. 9. Probability density in the left (red dashed line) and right (black line) arms of the ring and in the central bar (blue line) integrated over time, for a Gaussian envelope of the wave packet in the initial condition $\exp[-(y - y_0)^2/4\sigma^2]$, with σ given in the figure. The wave vector applied in the initial condition is $k_y = 0.01/\text{nm}$.

F. Stationary electron flow

We solve the standard stationary quantum scattering problem for the Fermi level electron using the wave function matching technique [68] for the atomistic tight binding Hamiltonian. We set $E_F = 6.4$ meV for which the Fermi wave vector is displaced by $k_y = 0.01/\text{nm}$ from the K' Dirac point at $B = 0$. The integral over the scattering density in space is plotted in Fig. 10(a). The result corresponds very well with Fig. 9(d), only the features are more abrupt in the stationary case, which is due to the presence of a finite range of k_y in the wave packet dynamics. The period of integrals is $2\Phi_0$.

Figures 10(b)–10(d) show the scattering density for $\Phi = 0.91\Phi_0$, $0.99\Phi_0$, and $1.06\Phi_0$, respectively. For $0.99\Phi_0$ [Fig. 10(c)] the parts of the electron density passing through both the arms of the ring meet in phase at the exit to the ring, and the electron wave function does not enter the central bar. However, for slightly different magnetic field [Figs. 10(b) and 10(d)] a phase difference appears, the part of the wave

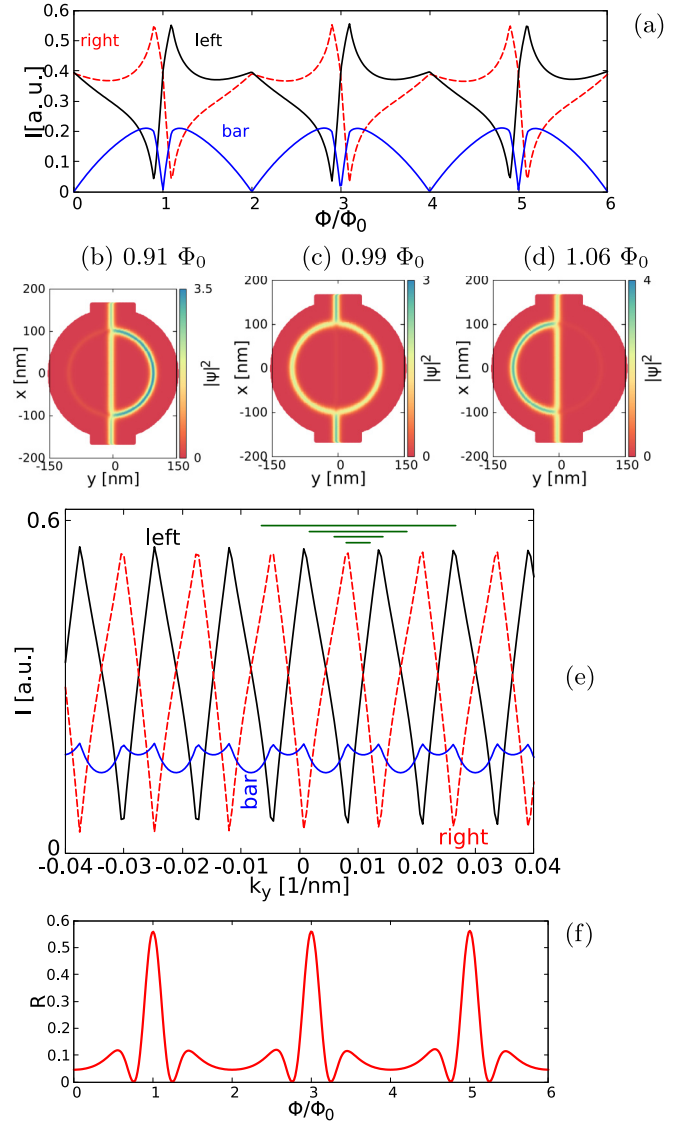


FIG. 10. Solutions of the stationary scattering problem for $E_F = 6.4$ meV, which corresponds to the wave vector $k_y = 0.01/\text{nm}$ as calculated with respect to the K' valley. (a) Scattering density integrated over the left (red dashed line), the right (black line) arm of the ring, and in the central bar (blue line). (b–d) The scattering density for $B = 0.12, 0.13, 0.14$ T, that correspond to the flux of the magnetic field threading the ring of radius 100 nm $\Phi = 0.91\Phi_0, 0.99\Phi_0$, and $1.06\Phi_0$, respectively. (e) Same as (a) only as a function of k_y for $B = 0.075$ T ($\Phi = 0.57\Phi_0$). The horizontal bars show the segments $[k_y - \sigma_k, k_y + \sigma_k]$ with the standard deviation of the Gaussian packet $\sigma_k = \frac{1}{2\sigma}$ for $\sigma = 30, 60, 120$, and 240 nm, from top to bottom. (f) Backscattering probability obtained for the defect potential given by Eq. (13).

function is injected to the central bar from above, and the interference within the ring promotes right or left arm of the ring. In the extreme conditions of Figs. 10(b) and 10(d) the electron circulates around a *half* of the entire ring, which is the origin of the period doubling of the period on the flux scale, as now the area for the magnetic field flux is halved.

In the time-dependent dynamics for short packets the injection to both the arms of the ring is nearly ideally symmetric.

Figure 10(e) gives the integrals for the stationary flow for $\Phi = 0.57\Phi_0$ (i.e., $B = 0.075$ T) as a function of k_y . The scattering density switches very fast from the left to the right arms of the ring. The horizontal bars at the top of the Figure show the segments of k_y from $0.01 \frac{1}{\text{nm}} \pm \sigma_k = 0.01 \frac{1}{\text{nm}} \pm \frac{1}{2\sigma}$, for $\sigma = 30, 60, 120$, and 240 nm (from top to bottom). Only for large σ the asymmetry survives averaging over k_y range contained within the packet, hence the symmetric transfer for shorter packets.

Figure 10(f) shows the backscattering probability R for the ring with the defect given by Eq. (13). The conductance $G = (1 - R) \frac{e^2}{h}$ has a period of $2\Phi_0$ in terms of the flux threading the entire ring, or the period of the oscillations corresponds to the flux quantum threading half of the ring in consistency with the period of the scattering density integrals of Fig. 10(a).

G. Quantum rings defined by zero lines in bilayer graphene

Qualitatively similar results for the transfer across the quantum rings defined by the zero lines of the symmetry-breaking electric field are found for the bilayer graphene.

For bilayer graphene we use the atomistic tight-binding Hamiltonian spanned by p_z orbitals,

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (t_{ij} c_i^\dagger c_j + \text{H.c.}) + \sum_i V(\mathbf{r}_i) c_i^\dagger c_i, \quad (14)$$

where $V(\mathbf{r}_i)$ is the external potential at the i th site at position \mathbf{r}_i , and in the first term we sum over the nearest neighbors. We use the tight-binding parametrization of Bernal stacked layers [69], with $t_{ij} = -3.12$ eV for the nearest neighbors within the same layer. For the interlayer coupling, we take $t_{ij} = -0.377$ eV for the A-B dimers, $t_{ij} = -0.29$ eV for skew interlayer hoppings [69] between atoms of the same sublattice (A-A or B-B type), and $t_{ij} = 0.12$ eV for skew interlayer hopping between atoms of different sublattices. The orbital effects of the magnetic field are introduced by Peierls phase, as in Sec. II B 1.

For simulation of the ring, we assume potential of the form given by Eq. (12) on the upper sublattice and an opposite potential on the lower sublattice [see Fig. 11(a)]. We set $V_g = 0.2$ eV, $\lambda = 4$ nm as above, but the radius of the ring is taken equal to $R = 50$ nm. The magnetic field period corresponding to the flux quantum threading the circle of this radius is 0.53 T.

The dispersion relation for armchair nanoribbon is displayed in Fig. 11(b). For calculations we take the the Fermi energy is $E_F = 0.1$ eV. For bilayer graphene we have two energy bands instead of the single one moving up the ribbon towards the ring. The integrals of the scattering density are plotted in Fig. 11(c) and display the periodicity with Φ period of $2\Phi_0$, as found above for silicene.

To produce the backscattering we removed an atom of the upper graphene layer from the center of the right arm. We selected an atom that does not form a vertical dimer with the lower layer. The backscattering probability—the sum of probabilities for each of the incident subbands—is given in Fig. 11(d) and display the periodicity corresponding to the flux through half the ring, as found above for silicene.

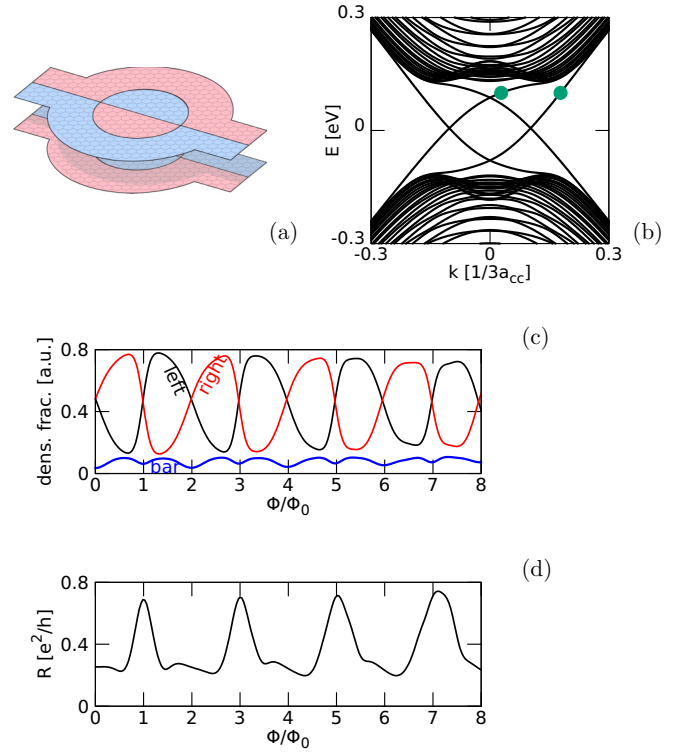


FIG. 11. (a) Schematics of the potential on the upper and lower layers of bilayer Bernal stacked graphene. Blue and red colors correspond to opposite sign of the potential. We consider an armchair nanoribbon of width $W = 49.2$ nm, with 1604 atoms in the elementary cell (on both layers). The zero line forms the ring of radius $R = 50$ nm. The computational box in the ring area covers an area of radius 74.5 nm. (b) The dispersion relation for the armchair nanoribbon feeding the current to the ring at $B = 0$. The dots indicate the Fermi wave vectors at the bands with positive velocity for $E_F = 0.1$ eV. a_{cc} is the nearest-neighbor distance for graphene. (c) Integral of the scattering density in the left and right arms of the ring and in the bar for $E_F = 0.1$ eV. (d) Backscattering probability for a vacancy: a carbon atom removed from the center of the right arm from a position that does not form a vertical dimer with the bottom layer.

IV. SUMMARY

We studied the dynamics of electron wave packets in buckled silicene in inhomogeneous vertical electric field that breaks the symmetry between the sublattices using an atomistic tight-binding approach. We have demonstrated that the line of the electric field flip in silicene supports a smooth untrembling motion of unspreading wave packets that are topologically protected from backscattering. We proposed a form of a quantum ring that uses branching of the zero line to split the wave packets and to make them interfere again. The ring stores the packet for a finite time that can be controlled with the external magnetic field. For short wave packets the time spent by the electron in the left and right arms of the ring is a periodic function of the flux with the period of the flux quantum threading the ring. We found that for long packets, close to the plane waves, the electron transport across the rings becomes asymmetrical with an imbalance of the electron transfer across the left and right halves of the ring. In consequence the period of oscillations in terms of the magnetic field

flux across the ring is doubled. This result is reproduced by stationary scattering calculations. We demonstrated that the same effect is found for rings defined in bilayer graphene. The point defects produce backscattering probability that has a period of the flux quantum threading the ring for short packets. For long packets and in the stationary transport the period of the backscattering probability is doubled.

ACKNOWLEDGMENTS



The results of Sec. III F were obtained by B.R. (stationary transport silicene), who was supported by the Pol-

ish Government budget for science 2017–2021 within the Diamantowy Grant project (Grant No. 0045/DIA/2017/46). The results of Sec. III G were calculated by A.M.-K. (stationary transport bilayer graphene), who was supported by National Science Centre (NCN) according to decision DEC-2015/17/B/ST3/01161. The rest of the results were provided by B.S., who was supported by the National Science Centre (NCN) according to decision DEC-2016/23/B/ST3/00821. B.R. acknowledges the support of EU PhD Project POWER.03.02.00- 00-I004/16. The calculations were performed on PL-Grid Infrastructure at ACK Cyfronet AGH.

- [1] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [2] A. Molle, J. Goldberger, M. Houssa, Y. Xu, S.-C. Zhang, and D. Akinwande, *Nat. Mater.* **16**, 163 (2017).
- [3] B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Léandri, B. Ealet, and G. Le Lay, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 183102 (2010).
- [4] Cheng-Cheng Liu, Wanxiang Feng, and Yugui Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
- [5] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Akturk, H. Sahin, and S. Ciraci, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 236804 (2009).
- [6] Y. Xu, B. Yan, H.-J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 136804 (2013).
- [7] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 136805 (2010).
- [8] F. Reis, G. Li, L. Dudy, M. Bauernfeind, S. Glass, W. Hanke, R. Thomale, J. Schaefer, and R. Claessen, *Science* **357**, 287 (2017).
- [9] K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist, *New J. Phys.* **11**, 095016 (2009).
- [10] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [11] K. Wakabayashi, *Phys. Rev. B* **64**, 125428 (2001).
- [12] N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **73**, 195411 (2006).
- [13] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [14] A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, *Nat. Phys.* **3**, 172 (2007).
- [15] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, and X. Xu, *Nat. Rev. Mat.* **1**, 16055 (2016).
- [16] X. Xu, W. Yao, D. Xiao, and T. F. Heinz, *Nat. Phys.* **10**, 343 (2014).
- [17] Z. Gong, G.-B. Liu, H. Yu, D. Xiao, X. Cui, X. Xu, and W. Yao, *Nat. Commun.* **4**, 2053 (2013).
- [18] Ivar Martin, Ya. M. Blanter, and A. F. Morpurgo, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 036804 (2008).
- [19] W. Yao, S. A. Yang, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 096801 (2009).
- [20] Edward McCann and Mikito Koshino, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056503 (2013).
- [21] T. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, *Nature* **459**, 820 (2009).
- [22] Z. Qiao, J. Jung, Q. Niu, and A. H. MacDonald, *Nano Lett.* **11**, 3453 (2011).
- [23] M. Zarenia, J. M. Pereira, Jr., G. A. Farias, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **84**, 125451 (2011).
- [24] L. Ju, Z. Shi, N. Nair, Y. Lv, C. Jin, J. Velasco, Jr., C. Ojeda-Aristizabal, H. A. Bechtel, M. C. Martin, A. Zettl, J. Analytis, and F. Wang, *Nature* **520**, 650 (2015).
- [25] J. Li, K. Wang, K. J. McFaul, Z. Zern, Y. Ren, K. Watanabe, T. Taniguchi, Z. Qiao, and J. Zhu, *Nat. Nano.* **11**, 1060 (2016).
- [26] J. R. Williams, L. DiCarlo, and C. M. Marcus, *Science* **317**, 638 (2007); D. A. Abanin and L. S. Levitov, *ibid.* **317**, 641 (2007).
- [27] P. Rickhaus, P. Makk, M.-H. Liu, E. Tovari, M. Weiss, R. Maurand, K. Richter, and C. Schonenberger, *Nat. Commun.* **6**, 6470 (2015).
- [28] T. Taychatanapat, J. Y. Tan, Y. Yeo, K. Watanabe, T. Taniguchi, and B. Özyilmaz, *Nat. Commun.* **6**, 6093 (2015).
- [29] Y. Liu, R. P. Tiwari, M. Brada, C. Bruder, F. V. Kusmartsev, and E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **92**, 235438 (2015).
- [30] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, *Nat. Mater.* **6**, 770 (2007).
- [31] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, *Nano Lett.* **12**, 113 (2012).
- [32] N. D. Drummond, V. Zolyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
- [33] M. Ezawa, *New J. Phys.* **14**, 033003 (2012).
- [34] S. Chowdhury and D. Jana, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 126501 (2016).
- [35] M. Ezawa, E. Salomon, P. De Padova, D. Solonenko, P. Vogt, M. E. Davila, A. Molle, T. Angot, and G. Le Lay, *Riv. Nuovo Cimento* **41**, 175 (2018).
- [36] M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055502 (2012).
- [37] B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. Yao, X. He, P. Cheng, L. Chen, and K. Wu, *Nano Lett.* **12**, 3507 (2012).
- [38] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, and G. Le Lay, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 155501 (2012).
- [39] A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and Y. Yamada-Takamura, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 245501 (2012).
- [40] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chappé, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, and D. Akinwande, *Nat. Nano.* **10**, 227 (2015).
- [41] A. O. Barut and A. J. Bracken, *Phys. Rev. D* **23**, 2454 (1981).
- [42] T. M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **76**, 195439 (2007).

- [43] V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, A. A. Perov, and E. V. Frolova, *Phys. Rev. A* **82**, 052115 (2010).
- [44] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos, *Nature* **463**, 68 (2010).
- [45] E. Romera and F. de los Santos, *Phys. Rev. B* **80**, 165416 (2009).
- [46] S. Bednarek and B. Szafran, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 216805 (2008); S. Bednarek, B. Szafran, R. J. Dudek, and K. Lis, *ibid.* **100**, 126805 (2008).
- [47] I. Bialynicki-Birula, M. Kalinski, and J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1777 (1994).
- [48] B. Wyker, S. Ye, F. B. Dunning, S. Yoshida, C. O. Reinhold, and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 043001 (2012).
- [49] Edited by V. Fomin, *Physics of Quantum Rings* (Springer, Berlin, 2018).
- [50] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
- [51] P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya. M. Blanter, C. W. J. Beenakker, and A. F. Morpurgo, *Phys. Rev. B* **76**, 235404 (2007).
- [52] D. Sticlet, B. Dora, and J. Cayssol, *Phys. Rev. B* **88**, 205401 (2013).
- [53] N. Bolivar, E. Medina, and B. Berche, *Phys. Rev. B* **89**, 125413 (2014).
- [54] S. Bellucci, A. A. Saharian, and A. Kh. Grigoryan, *Phys. Rev. D* **94**, 105007 (2016).
- [55] M. Saiz-Bretin, L. Medrano Sandonas, R. Gutierrez, G. Cuniberti, and F. Dominguez-Adame, *Phys. Rev. B* **99**, 165428 (2019).
- [56] M. Zarenia, J. M. Pereira, A. Chaves, F. M. Peeters, and G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **81**, 045431 (2010).
- [57] L. Gioia, U. Zülicke, M. Governale, and R. Winkler, *Phys. Rev. B* **97**, 205421 (2018).
- [58] P. Michetti and P. Recher, *Phys. Rev. B* **83**, 125420 (2011).
- [59] A. Mreńca-Kolasińska, S. Heun, and B. Szafran, *Phys. Rev. B* **93**, 125411 (2016); A. Mreńca-Kolasińska and B. Szafran, *ibid.* **94**, 195315 (2016).
- [60] S. Soleimanikahnoj and I. Knezevic, *Phys. Rev. Appl.* **8**, 064021 (2017).
- [61] S. K. Banerjee, L. F. Register, E. Tutuc, D. Reddy, and A. H. MacDonald, *IEEE Electron Device Lett.* **30**, 158 (2009).
- [62] P. San-Jose, E. Prada, E. McCann, and H. Schomerus, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 247204 (2009).
- [63] B. Szafran, A. Mreńca-Kolasińska, and D. Żebrowski, *Phys. Rev. B* **99**, 195406 (2019).
- [64] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [65] K. Wakabayashi, K. Sasaki, and T. Nakanishi, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **11**, 054504 (2010).
- [66] M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **38**, 9375 (1988).
- [67] M.-H. Liu, P. Rickhaus, P. Makk, E. Továri, R. Maurand, F. Tkatschenko, M. Weiss, C. Schonenberger, and K. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 036601 (2015).
- [68] K. Kolasinski, B. Szafran, B. Brun, and H. Sellier, *Phys. Rev. B* **94**, 075301 (2016); B. Rzeszutarski and B. Szafran, *ibid.* **98**, 075417 (2018).
- [69] B. Partoens and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **74**, 075404 (2006).

Aharonov-Bohm oscillations of four-probe resistance in topological quantum rings in silicene and bilayer graphene

Bartłomiej Rzeszutarski, Alina Mreńca-Kolasińska , and Bartłomiej Szafran 

AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science, al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Poland



(Received 22 December 2019; accepted 12 March 2020; published 27 March 2020)

We consider observation of Aharonov-Bohm oscillations in clean systems based on the flow of topologically protected currents in silicene and bilayer graphene. The chiral channels in these materials are defined by the flips of the vertical electric field. The line of the flip confines chiral currents flowing along it in the direction determined by the valley. We present an electric field profile that forms a crossed ring to which four terminals can be attached, and find that the conductance matrix elements oscillate in the perpendicular magnetic field in spite of the absence of backscattering. We propose a four-probe resistance measurement setup, and demonstrate that the resistance oscillations have large visibility provided that the system is prepared in such a way that a direct transfer of the chiral carriers between the current probes is forbidden.

DOI: [10.1103/PhysRevB.101.115308](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.115308)

I. INTRODUCTION

In III-V systems with two-dimensional (2D) electron gas, the Aharonov-Bohm interferometers are formed by definition of gated channels forming ringlike structures by etching [1] or surface oxidation [2]. Quantum rings are also defined in graphene by etching [3]. In the etched systems disorder and resulting electron backscattering within the arms of the ring are usually present which lowers the visibility of the Aharonov-Bohm conductance oscillations [4]. In the present work we consider Aharonov-Bohm interferometers with arms formed by chiral [5] channels that are protected against backscattering by symmetry constraints.

Graphene [6] nanoribbon [7] with zigzag edges forms a perfect chiral channel for low Fermi energy. The Fermi wave vectors corresponding to the current flow in one direction or the other appear in opposite valley states [8–10]. The chiral [5] valley current within a quasi-one-dimensional channel is protected against backscattering by a smooth potential variation. Only potential defects that are short range on the scale of the lattice constant can induce an intervalley transition that implies backscattering [8–10]. However, formation of a quantum ring of purely zigzag edges is unlikely. For that reason we consider chiral channels defined within the bulk of the sample by gating. In staggered monolayer graphene [11,12], in buckled silicene lattice [13–16], or other 2D Xene materials [17–19], the chiral channels for the electron flow can be tailored by a symmetry breaking potential along its zero lines [11,20,21]. For buckled silicene [13–16]—a hexagonal crystal with the two sublattices placed on two parallel planes, the symmetry breaking potential is introduced by perpendicular electric field [20,21]. Similar chiral channels appear in bilayer graphene [12,22–26] along the flip of the vertical electric field or in bilayer graphene at the AB/BA stacking interface induced by a dislocation [25,27] or twist of the layers [28,29]. The AB/BA interfaces in twisted bilayer graphene form a triangular lattice with the direction of the current flow opposite for both valleys [29–31].

Recently, a ringlike system with splittings of the chiral zero-line channels was proposed for both silicene and bilayer graphene [21]. The electron passage time across this system is a periodic function of the external magnetic field due to the Aharonov-Bohm phase difference accumulated from the vector potential [21]. However, the two-terminal Landauer conductance of these systems is independent of the external magnetic field, since the backscattering is absent due to the valley protection. In order to observe the Aharonov-Bohm oscillations in two-terminal conductance one should rely on atomic-scale disorder. The atomic disorder is hard to control and electron interferometers should be difficult to construct in this way.

The message of this paper is that one can design a four-terminal interferometer device for the observation of the Aharonov-Bohm oscillations of conductance for clean chiral channels defined in both silicene and bilayer graphene that works in the absence of electron backscattering. We study the chiral current flow in the channels formed by the electric potential flips that define the four-terminal crossed-quantum ring in silicene and bilayer graphene. A simulation of two nonequivalent four-point resistance measurement setups is performed. We find a distinct Aharonov-Bohm periodicity in the resistance amplitude that is associated with the interference on $1/4$ of the ring area. We discuss the interference paths that are behind this periodicity.

II. THEORY

A. Silicene

In this work we use the atomistic tight-binding Hamiltonian spanned by p_z orbitals [15,16,32]

$$H = -t \sum_{\langle n,m \rangle} (p_{nm} c_n^\dagger c_m + \text{H.c.}) + \sum_n V(\mathbf{r}_n) c_n^\dagger c_n, \quad (1)$$

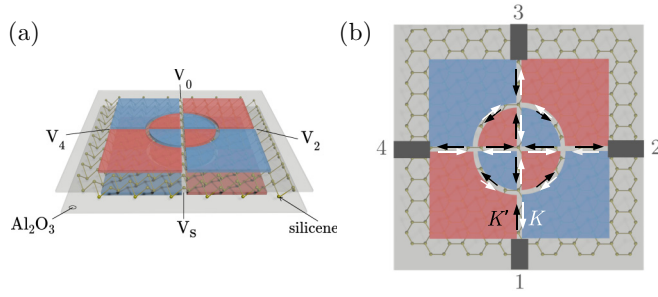


FIG. 1. (a) Sketch of the silicene monolayer between top and bottom gates. Positive potential V_G is put on the blue gates, and negative $-V_G$ on the red gates. (b) Top view of the system with leads numeration. Black (white) arrows denote for the directions of K' (K) valley protected charge currents within each channel defined by gate interfaces.

where $\langle n, m \rangle$ stands for the nearest neighbor ions. The c_n^\dagger (c_n) is the creation (annihilation) operator for an electron on site n , and $t = 1.6$ eV is the hopping parameter [15,32]. We introduce the magnetic field via the Peierls phase in the p_{nm} term, where $p_{nm} = e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_m}^{\mathbf{r}_n} \vec{A} \cdot d\vec{l}}$ with the vector potential $\vec{A} = (0, Bx, 0)$. The crystal lattice vectors $\mathbf{a}_1 = a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$ and $\mathbf{a}_2 = a(1, 0, 0)$ define the positions $\mathbf{r}_n^A = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$ of the ions of the A sublattice, where the silicene lattice constant $a = 3.89$ Å, and n_1, n_2 are integers, and the ions of the B sublattice are shifted by the basis vector $(0, d, \tau)$, where $d = 2.248$ Å is the nearest neighbor in-plane distance and $\tau = 0.46$ Å is the vertical shift between the sublattice planes.

The quantum ring with the chiral channels is formed by the electric field induced by the split top and bottom gates [Fig. 1(a)]. The systems of multiple dual gates below and above the 2D crystals are used to modify the local electron structure [31,33–35]. The inversion of the field creates a topologically protected conducting channel. We consider a ring of radius \mathcal{R} with the center at the origin formed by the model potential

$$V_A = \frac{8V_G}{\pi^3} \arctan\left(\frac{x}{\lambda}\right) \arctan\left(\frac{y}{\lambda}\right) \arctan\left(\frac{\mathcal{R}-r}{\lambda}\right), \quad (2)$$

where $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ is the distance from the origin, V_G is the gate potential, and λ is the parameter responsible for the inversion length. For symmetric gating the potential on the B sublattice is opposite $V_B(\mathbf{r}) = -V_A(\mathbf{r})$.

In Fig. 1(b) we plot the direction of the current channels that are open for the K and K' valley electron flow. The K' valley electrons move along the zero line of the potential given by Eq. (2) leaving the region of negative potential on the A sublattice on the left hand-side. Note that the current injected from terminal zero-line 1 can be directed to either terminal 2 or terminal 4. In terminal 3 there is no K' valley state that carries the electron flow up, away from the ring (Fig. 2). In every channel the direction of the current flow for the K valley (with respect to the K') is opposite.

The wave function of the states confined laterally at the zero line near $x = 0$ is plotted in Fig. 3(a). The confined states correspond to linear bands that appear within the energy gap [Fig. 3(b)].

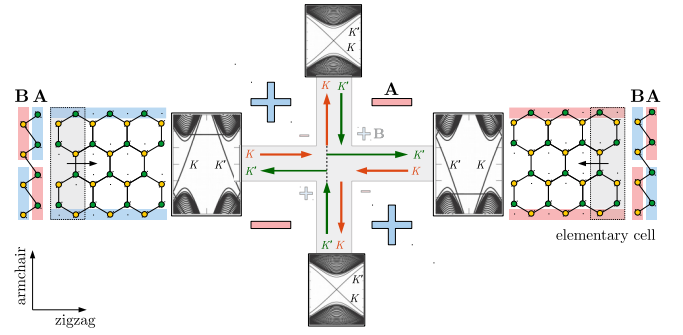


FIG. 2. Schematic view of four-terminal crossing channels defined by flips of the electric potential. Negative potential $-V_G$ is shown by red color ("−" symbol) and positive V_G by blue color ("+" symbol), for both the A (upper) and B (lower) sublattice. Green (orange) arrows indicate the orientation of the K' (K) currents in the channel that are associated with a specific valley marked in the band structures for each lead. In the zigzag ribbon the potential at the edge changes its sign and shifts the flat subbands (edge states) to different Fermi levels, $E_F = +V_G$ and $E_F = -V_G$, respectively.

B. Bilayer graphene

For bilayer graphene the inversion-symmetry-breaking potential can be introduced by an electric field perpendicular to the sheet. We consider a bilayer-graphene-based system analogous to the one described in Sec. II A, with the difference that due to the presence of two layers, two topological states occur instead of one as in silicene. We consider the tight-binding Hamiltonian similar to Eq. (1)

$$H = - \sum_{\langle n, m \rangle} (t_{nm} p_{nm} c_n^\dagger c_m + \text{H.c.}) + \sum_n V(\mathbf{r}_n) c_n^\dagger c_n, \quad (3)$$

with graphene lattice constant $a_{CC} = 1.42$ Å, the interlayer distance of $d = 3.35$ Å and the tight-binding parameters of bilayer graphene with Bernal stacking [36], where $t_{nm} = -3.12$ eV for the nearest neighbors within the same layer, and for the interlayer coupling, $t_{nm} = -0.377$ eV for the A – B dimers, $t_{nm} = -0.29$ eV for the skew hoppings between atoms

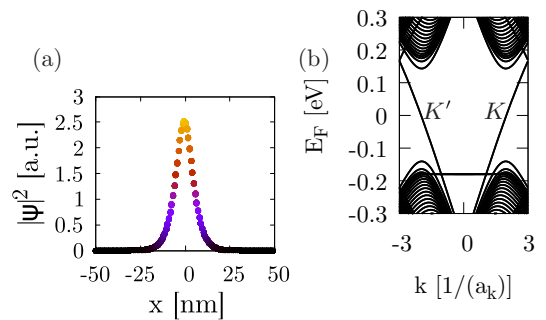


FIG. 3. (a) Probability density $|\psi|^2$ of the states confined along the zero lines and (b) band structure for the input lead 1 with zigzag edges and electric potential defined as described in Fig. 1. The flat horizontal band corresponds to the edge state. The translation vector of the supercell of the zigzag nanoribbon has the length of two lattice constants $a_k = 2a$.

of the same sublattice, and $t_{nm} = 0.12$ eV – between the atoms of different sublattices.

The model potential in the lower layer is described by a formula analogous to Eq. (2), and in the upper layer it has the opposite polarization, but the sign is the same in both sublattices within the same layer. We use $\lambda = 4$ nm, $\mathcal{R} = 100$ nm, and $V_G = 200$ meV.

C. Landauer approach

We solve the electron scattering problem formed in the tight binding model with the wave-function matching technique. The details of the method were described in Refs. [37,38]. The electron transfer probability is calculated as

$$T_{\xi\eta}^w = \sum_v |t_{\xi\eta}^{wv}|^2, \quad (4)$$

where $t_{\xi\eta}^{wv}$ denote the probability amplitude for the transfer from incoming mode v in the input lead η to outgoing mode w in the output lead ξ . Thus, the Landauer conductance formula for the transfer from lead η to ξ can be written as

$$G_{\xi\eta} = G_0 \sum_w T_{\xi\eta}^w, \quad (5)$$

where $G_0 = e^2/h$ is the conductance quantum.

We focus our attention on the Fermi level $E_F \in \{0 : 0.1\}$ eV and take into account the spin degree of freedom so that all the assumptions provide $\mathcal{G} = \max(G_{\xi\eta}) = 2G_0$ for silicene, and $\mathcal{G} = \max(G_{\xi\eta}) = 4G_0$ for bilayer graphene.

D. Conductance matrix

The scattering problem for the four-terminal system was solved for each lead as an input channel and the results were collected in the conductance matrix \mathbf{G} with the general form

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} g_{11} & -G_{12} & -G_{13} & -G_{14} \\ -G_{21} & g_{22} & -G_{23} & -G_{24} \\ -G_{31} & -G_{32} & g_{33} & -G_{34} \\ -G_{41} & -G_{42} & -G_{43} & g_{44} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

with $g_{ii} = \sum_{j \neq i} G_{ij}$. Due to the rotational symmetry (C_4 in terms of channel shape) the conductance matrix \mathbf{G} can be put in the form

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G} & -B & 0 & -A \\ -A & \mathcal{G} & -B & 0 \\ 0 & -A & \mathcal{G} & -B \\ -B & 0 & -A & \mathcal{G} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

where the coefficients

$$A = G_{14} = G_{21} = G_{32} = G_{43}, \quad (8)$$

$$B = G_{41} = G_{12} = G_{23} = G_{34}, \quad (9)$$

$$0 = G_{13} = G_{24} = G_{31} = G_{42}, \quad (10)$$

and $B = \mathcal{G} - A$.

Assuming that $V_3 = 0$ we can truncate the 3rd column [39] and calculate the resistance matrix $\mathbf{R} = \mathbf{G}^{-1}$ that can be

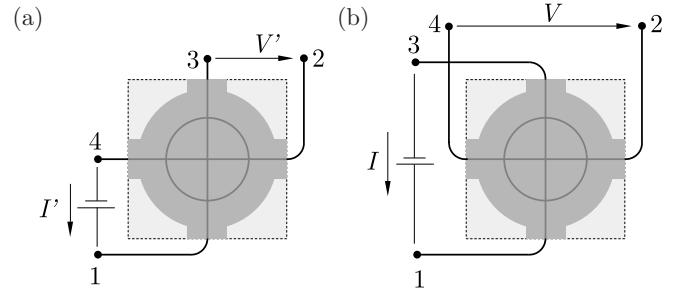


FIG. 4. Schemes for experimental resistance measurement configuration: for the current flow between neighbor (a) and opposite (b) leads. In both configurations the voltage V_3 associated to the third lead is set to 0.

written as follows:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{14} \\ R_{21} & R_{22} & R_{24} \\ R_{41} & R_{42} & R_{44} \end{pmatrix} = \frac{1}{W} \begin{pmatrix} \mathcal{G}^2 & B\mathcal{G} & A\mathcal{G} \\ A\mathcal{G} & \mathcal{G}^2 - AB & A^2 \\ B\mathcal{G} & B^2 & \mathcal{G}^2 - AB \end{pmatrix} \quad (11)$$

with matrix determinant $W = \mathcal{G}(B^2 + A^2)$ that is always positive.

E. 4-point resistance measurement

We consider two configurations of resistance measurement (Fig. 4) in the system with varied voltage and current terminals.

For the first configuration from Fig. 4(a) the resistance is calculated as

$$R' = \frac{V'}{I'} = \left[\frac{V_2}{I_1} \right]_{I_2=0, I_1=-I_4} = R_{21} - R_{24} = \frac{AB}{W}, \quad (12)$$

and for the other [Fig. 4(b)],

$$R = \frac{V}{I} = \left[\frac{V_4 - V_2}{I_1} \right]_{I_2=I_4=0} = R_{41} - R_{21} = \frac{\mathcal{G}(B - A)}{W}. \quad (13)$$

III. RESULTS AND DISCUSSION

A. Small ring $\mathcal{R} = 100$ nm

In this subsection for the silicene system we use $V_G = 200$ meV and $\lambda = 4$ nm. In Fig. 5 and 6 we plotted the results for the conductance matrix elements (upper plots) and the resistances R and R' (lower plots) for $E_F = 20$ meV and $E_F = 6.43$ meV, respectively. The oscillations of the matrix elements that have nearly maximal amplitude are translated to oscillations of resistance that have high (R) or low (R') visibility.

The current probe terminals for configuration R' correspond to an open direct current path. The R' resistance has a constant sign since the numerator in Eq. (12) is always nonnegative $AB \geq 0$.

For configuration R the current from terminal 1 can reach terminal 3 only via the voltage terminals 2 and 4, which absorb the current and send an equal current back in the opposite

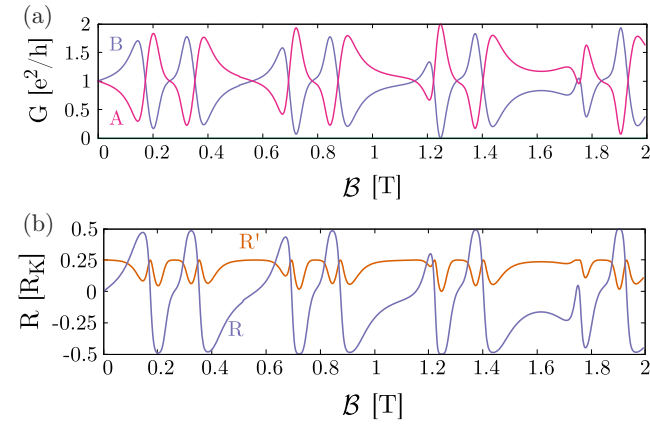


FIG. 5. (a) Conductance plot for simplified conductance matrix elements [Eq. (7)] for the system in external magnetic field at fixed Fermi level $E_F = 20$ meV. (b) Resistance R' for the case in Fig. 4(a) and R [case in Fig. 4(b)] in units of von Klitzing constant R_K .

valley, which is necessary to keep the net current at the voltage probes equal to zero. The resistance R changes sign [Figs. 5(b) and 6(b)] as the magnetic field is varied. From Eq. (13), since the determinant W is positive, the sign change needs to be accompanied by the sign change of the difference $V_4 - V_2$ (or the matrix elements $B - A = G_{41} - G_{14}$). Hence, the changes of sign of R appear when the electron transfer probability from terminal 1 to 4 crosses the electron transfer probability in the opposite direction. The directions become nonequivalent from the point of view of the electron transfer when the external magnetic field is introduced.

The current circulation paths for $E_F = 20$ meV are presented in Fig. 7. For magnetic fields such that $A = B$ Fig. 5(a), the current is evenly distributed from terminal 1 to the left and the right leads [Figs. 7(a) and 7(c)], while for stationary points $0 = \frac{\partial A}{\partial B} = \frac{\partial B}{\partial B}$ [Figs. 7(b)–7(f)], one can distinguish current loops around quarters of the ring.

By taking the Fourier transform of the resistance R and R' [from Figs. 5(b) and 6(b), respectively] for magnetic field B range from 0 to 40 T we

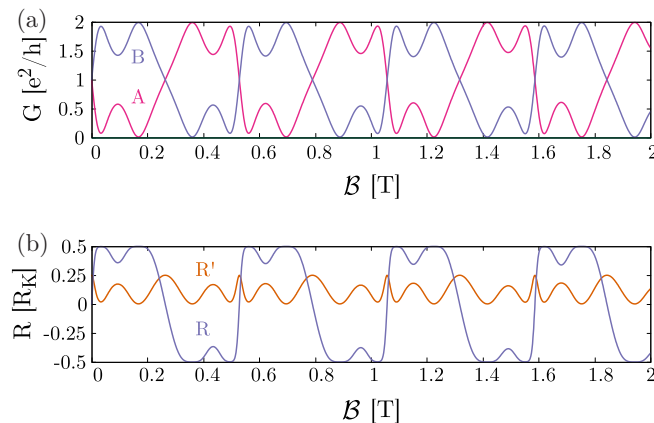


FIG. 6. (a) Conductance and (b) resistance plots same as Fig. 5 but for $E_F = 6.43$ meV.

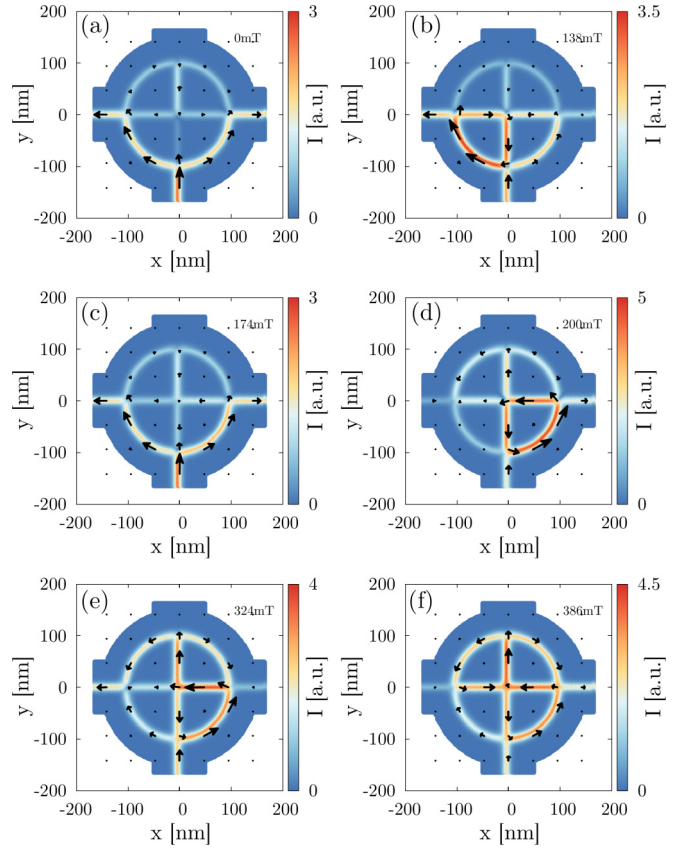


FIG. 7. Current distribution maps for different magnetic field magnitudes: (a) 0 mT, (b) 138 mT, (c) 174 mT, (d) 200 mT, (e) 324 mT, and (f) 386 mT for $E_F = 20$ meV (see Fig. 5 for conductance matrix element and resistance). For each map the color indicates the averaged current amplitude I , while the arrows indicate the direction of this current.

can distinguish four characteristic peaks (Fig. 8) $f_B = \{11.9, 23.8, 35.7, 47.6\} \frac{1}{T}$ associated to periods $(\Delta B = 2\pi/f_B)$ $\Delta B = \{528 \text{ mT}, 264 \text{ mT}, 176 \text{ mT}, 132 \text{ mT}\}$, respectively. For each period the area Λ can be calculated as $\Lambda = \pi R^2$, and using the Aharonov-Bohm formula for period $\Delta B = \frac{h}{e\Lambda}$ we obtain

$$\Lambda = \frac{h}{e\Delta B}. \quad (14)$$

In our calculations the channel ring has radius $R = 100$ nm and area $\Lambda_0 = \pi R^2$, hence

$$\Lambda = \frac{\Lambda_0}{\Lambda_0} = \frac{h}{e\Delta B\pi R^2} \quad (15)$$

is the fraction of the ring area responsible for the Aharonov-Bohm interference. Thus, taking the $\{\Delta B\}$ list from the Fourier transform we obtain

$$\Lambda = \left\{ \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1 \right\},$$

for peaks 1 – 4 from left to right in Fig. 8, respectively. The leftmost peak that corresponds to the interference paths that encircle a quarter of the ring is the most pronounced. In the current distribution in Fig. 7 one can indicate the paths that

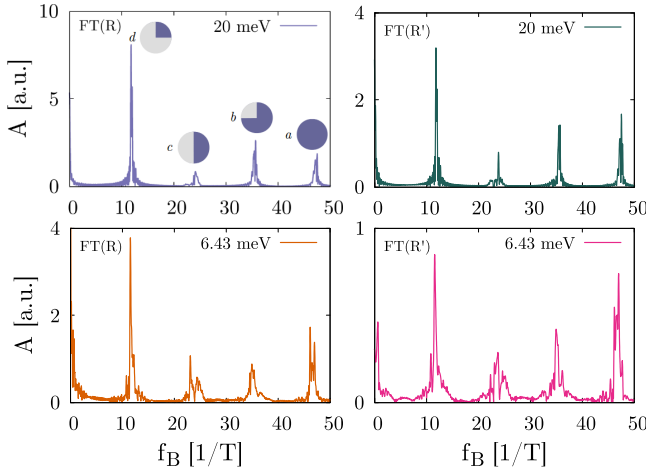


FIG. 8. Fourier transform of $R(\mathcal{B})$ and $R'(\mathcal{B})$ data for $E_F = 20$ and 6.43 meV. Input magnetic field range \mathcal{B} was set to [0:40] T. Inset icons indicate the area encircled by the currents to produce Aharonov-Bohm periodicity corresponding to the peak with $T_a = 132$ mT for the entire ring area, $\frac{3}{4}$ ring with $T_b = 176$ mT, half of the ring with $T_c = 264$ mT, and quarter of the ring with $T_d = 528$ mT.

encircle a few quarters of the ring, but the fundamental period corresponds to $1/4$ of the ring.

B. Larger ring, nonchiral bands, weaker vertical field

The clear Aharonov-Bohm oscillations of the resistance presented above were obtained for a system with a relatively small radius, narrow flip length and a very strong vertical electric field with only chiral bands at the Fermi level.

Let us consider a system with larger field inversion length increased from $\lambda = 4$ nm to 12 nm and $E_F = 100$ meV, for which nonchiral modes appear at the Fermi level (Fig. 9). The results for the conductance matrix elements and the resistance are plotted in Fig. 10(a). The nonchiral currents transfer across the ring from lead 1 to 3, see $G_{31} \neq 0$ [Fig. 10(a)], which is forbidden for the chiral bands. In the presence of the nonchiral bands the conductance matrix has no longer the form given

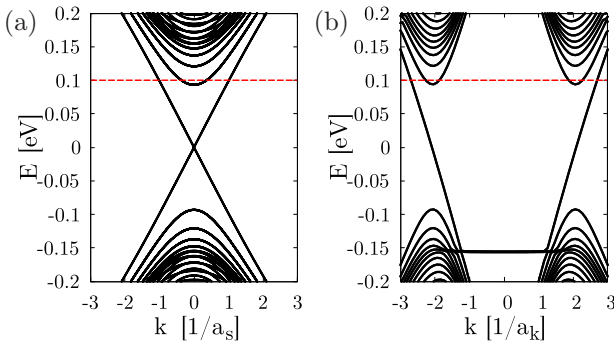


FIG. 9. (a) Band structure for the armchair-type lead number 1 and (b) for the zigzag-type lead number 2 with $V_G = 200$ meV and $\lambda = 12$ nm. Red line denotes $E_F = 100$ meV that includes one chiral and one (two) nonchiral subbands in armchair (zigzag) lead. $a_s = 2\sqrt{3}a$ is the translation vector of the supercell of the armchair nanoribbon.

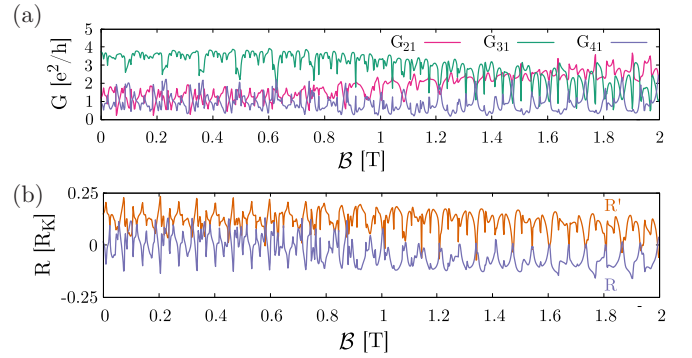


FIG. 10. (a) Conductance matrix elements G_{21} , G_{31} , G_{41} and (b) resistances R , R' calculated from the inverted conductance matrix Eq. (6) for $E_F = 100$ meV and parameters $V_G = 200$ meV and $\lambda = 12$ nm.

by Eq. (7) and a general formula needs to be applied to calculate the resistances R and R' by inverting the conductance matrix. The results of R and R' calculations are presented in Fig. 10(b). Matching peaks (dips) to a periodic pattern, we observe periodicity of the $R(\mathcal{B})$ plot with mean spacing $\Delta\mathcal{B}$ of 66 and 131 mT, which for $\mathcal{R} = 200$ nm correspond to flux quantum threading $1/2$ and $1/4$ of the ring area, respectively. In the presence of the nonchiral bands, the amplitude of the R' oscillations becomes comparable to the ones of R .

For the same parameters $\mathcal{R} = 200$ nm and $\lambda = 12$ nm but a lower Fermi level $E_F = 20$ meV (see Fig. 9), we reproduce the regular oscillations (Fig. 11) of the purely chiral case presented above for $\mathcal{R} = 100$ nm and $\lambda = 4$ nm.

The assumed potential of ± 0.2 eV at each sublattice of the buckled silicene requires a giant vertical field of the order of 10 V/nm. The vertical field applied for two-dimensional crystals can be very large without inducing the breakdown due to the atomic width of the system. However, the fields considered for the silicene [40] and the ones applied to bilayer-graphene [31,41] are of the order of 1 V/nm only. In order to verify that the effects described above can be observed for similar electric fields we performed calculations for 10 times weaker gate potential $V_G = 20$ meV at $E_F = 2$ meV for $\mathcal{R} = 200$ nm and $\lambda = 4$ nm with only the single linear chiral mode at the Fermi level. The Aharonov-Bohm oscillations can be resolved in R and R' dependence on the magnetic field (Fig. 12), with the larger visibility of the R oscillations as above.

IV. BILAYER-GRAPHENE-BASED SYSTEM

For the bilayer graphene system the results are qualitatively similar as for silicene, with the difference that for the Fermi energy within the energy gap we have $\max(G_{\xi\eta}) = 4G_0$, as

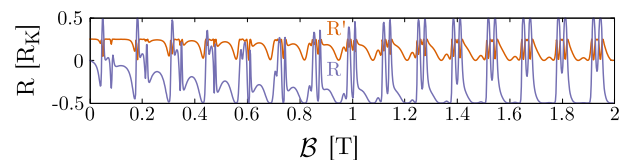


FIG. 11. Resistances R , R' for $V_G = 200$ meV and inversion length $\lambda = 12$ nm at $E_F = 20$ meV.

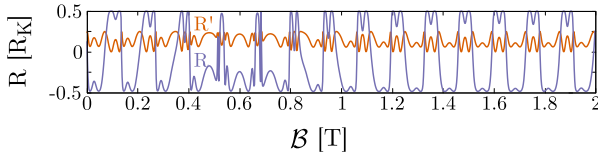


FIG. 12. R and R' resistances for 10 times weaker gate potential $V_G = 20$ meV with $\lambda = 4$ nm at $E_F = 2$ meV.

the number of topological states is doubled due to the presence of two layers. This can be seen in the band structure of the armchair input leads in Fig. 13(d). For the zigzag leads, Figs. 13(a)–13(c), within the energy gap the edge states occur that, however, do not contribute to the interlead conductance. G_{11} and G_{33} is always equal to 2, with the edge modes being completely backscattered, and only the flip modes leaving the zigzag leads.

Figure 14 shows the current distribution in the bilayer graphene system for $E_F = 50$ meV for the electron incident from the lower lead. As in silicene, the current cannot pass to the upper lead. Instead, we observe only the transfer to one of the two nearest leads. For $A = B$ [Figs. 14(a) and 14(b)] the current is evenly distributed within the system, while at the extrema of A and B [Figs. 14(c) and 14(d)] the current distribution is asymmetric, and loops around quarters of the ring are more pronounced.

The conductance matrix elements in Fig. 15(a), and the resistance in Fig. 15(b) manifest oscillations of the periodicity corresponding to a single or several quarters of the ring as for silicene. In the Fourier transform of the resistance in Figs. 16(a) and 16(b) we find peaks at the frequencies $f_B = \{12.7, 23.8, 36.4, 49\} \frac{1}{T}$ associated with the periods $(\Delta B =$

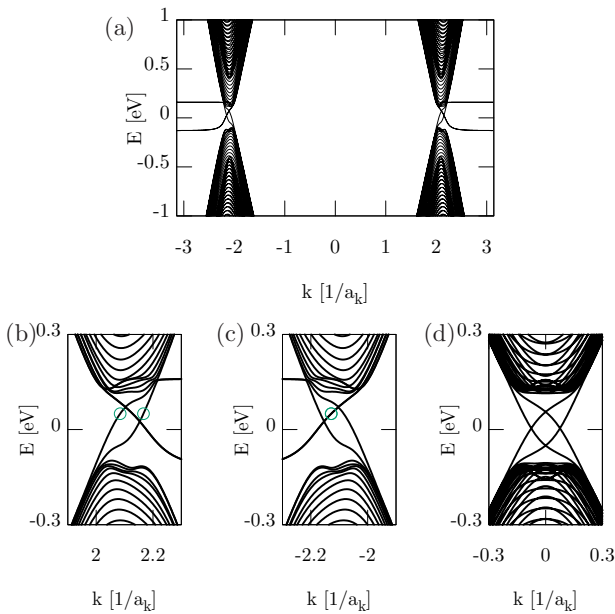


FIG. 13. (a) Band structure for lead 1 (with zigzag edges) (b) and its zoom in the vicinity of K' valley, and (c) in the vicinity of K valley, and (d) for lead 2 (with armchair edges) with electric field defined as described in Fig. 1. The green circles in (b) and (c) indicate the modes outgoing from lead 1.

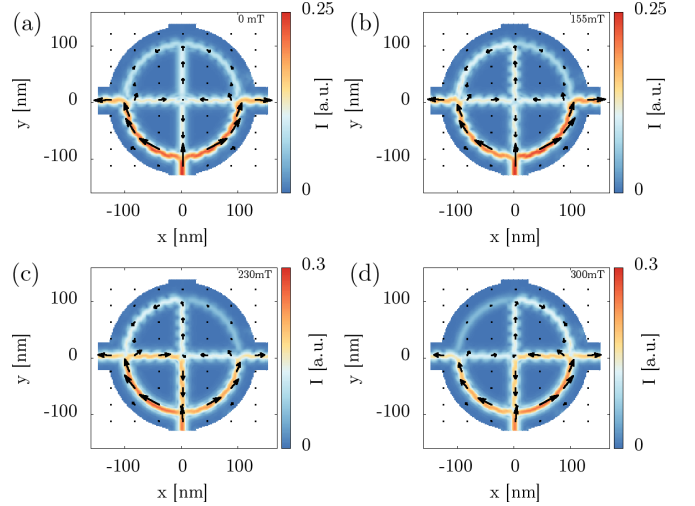


FIG. 14. Current distribution maps in bilayer graphene ring at $E_F = 50$ meV for different magnetic field magnitudes: (a) 0 mT, (b) 155 mT, (c) 230 mT, and (d) 300 mT. For each map the color indicates the averaged current amplitude I , and black arrows present the direction of this current.

$2\pi/f_B$) $\Delta B = \{495 \text{ mT}, 263 \text{ mT}, 173 \text{ mT}, 128 \text{ mT}\}$, respectively. These correspond roughly to the area of one, two, three, or four quarters of the ring, respectively.

V. SUMMARY AND CONCLUSIONS

We have studied Aharonov-Bohm interferometers with chiral channels defined by inversion of the vertical electric field in silicene and bilayer graphene. The valley protected channels induced by inhomogeneous electric field in silicene and bilayer graphene in clean conditions, i.e., without the backscattering (due to the intervalley transitions) can serve for the observation of the Aharonov-Bohm oscillations provided that four (instead of two) terminals are attached to the system. The Aharonov-Bohm oscillations of four-probe

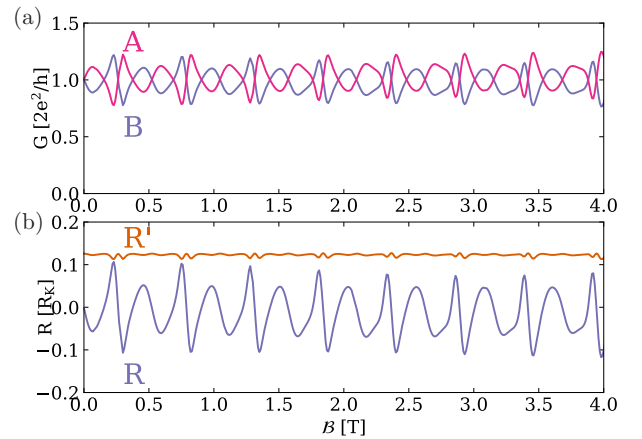


FIG. 15. (a) Conductance plot for simplified conductance matrix elements (Eq. 7) for the bilayer graphene system in external magnetic field at fixed Fermi level $E_F = 50$ meV. (b) Resistance R' for the case in Fig. 4(a) and R [case Fig. 4(b)] in units of the von Klitzing constant R_K .

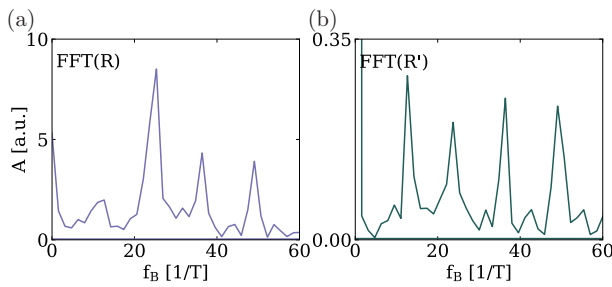


FIG. 16. Fourier transform of (a) the R and (b) the R' signal of Fig. 15 in the bilayer graphene system.

resistance with large visibility are observed when a direct electron transfer between terminals (chosen as the current

probes) is forbidden. The fundamental period of the resistance oscillations corresponds to a quarter of the ring, or to the smallest loop that a chiral current encircles within the structure.

ACKNOWLEDGMENTS

B.R. is supported by the Polish government budget for science in 2017-2021 as a research project under the program "Diamantowy Grant" (Grant No. 0045/DIA/2017/46), by the EU Project POWR.03.02.00-00-I004/16 and NCN Grant No. UMO-2019/32T/ST3/00044. A.M-K. is supported with the "Diamantowy Grant" (Grant No. 0045/DIA/2017/46). The calculations were performed on PL-Grid Infrastructure on Rackserver Zeus and Prometheus at ACK-AGH Cyfronet.

- [1] E. Strambini, V. Piazza, G. Biasiol, L. Sorba, and F. Beltram, *Phys. Rev. B* **79**, 195443 (2009).
- [2] A. Fuhrer, S. Lüscher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, and M. Bichler, *Nature (London)* **413**, 822 (2001).
- [3] D. Cabosart, S. Faniel, F. Martins, B. Brun, A. Felten, V. Bayot, and B. Hackens, *Phys. Rev. B* **90**, 205433 (2014).
- [4] B. Szafran and M. R. Poniedzialek, *Phys. Rev. B* **80**, 155334 (2009).
- [5] M. Katsnelson, K. Novoselov, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [6] A. H. Castro Neto, Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [7] Y. K. Wakabayashi, Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist, *New J. Phys.* **11**, 095016 (2009).
- [8] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [9] K. Wakabayashi, *Phys. Rev. B* **64**, 125428 (2001).
- [10] N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **73**, 195411 (2006).
- [11] W. Yao, S. A. Yang, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 096801 (2009).
- [12] S.-g. Cheng, H. Liu, H. Jiang, Q.-F. Sun, and X. C. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 156801 (2018).
- [13] B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Léandri, B. Ealet, and G. L. Lay, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 183102 (2010).
- [14] C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
- [15] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [16] S. Chowdhury and D. Jana, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 126501 (2016).
- [17] A. Molle, J. Goldberger, M. Houssa, Y. Xu, S.-C. Zhang, and D. Akinwande, *Nat. Mater.* **16**, 163 (2017).
- [18] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, and S. Ciraci, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 236804 (2009).
- [19] Y. Xu, B. Yan, H.-J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 136804 (2013).
- [20] M. Ezawa, *New J. Phys.* **14**, 033003 (2012).
- [21] B. Szafran, B. Rzeszutarski, and A. Mreńca-Kolasińska, *Phys. Rev. B* **100**, 085306 (2019).
- [22] I. Martin, Y. M. Blanter, and A. F. Morpurgo, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 036804 (2008).
- [23] Z. Qiao, J. Jung, Q. Niu, and A. MacDonald, *Nano Lett.* **11**, 3453 (2011).
- [24] M. Zarenia, J. M. Pereira, Jr., G.A. Farias, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **84**, 125451 (2011).
- [25] L. Ju, Z. Shi, N. Nair, Y. Lv, C. Jin, J. Velasco Jr, C. Ojeda-Aristizabal, H. Bechtel, M. Martin, A. Zettl, J. Analytis, and F. Wang, *Nature (London)* **520**, 650 (2015).
- [26] J. Li, K. Wang, K. McFaul, Z. Zern, Y. Ren, K. Watanabe, T. Taniguchi, Z. Qiao, and J. Zhu, *Nat. Nanotechnol.* **11**, 1060 (2016).
- [27] A. Vaezi, Y. Liang, D. H. Ngai, L. Yang, and E.-A. Kim, *Phys. Rev. X* **3**, 021018 (2013).
- [28] R. Bistritzer and A. H. MacDonald, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108**, 12233 (2011).
- [29] S. G. Xu, A. I. Berdyugin, P. Kumaravadivel, F. Guinea, R. Krishna Kumar, D. A. Bandurin, S. Morozov, W. Kuang, B. Tsim, S. Liu, J. Edgar, I. Grigorieva, V. I. Fal'ko, M. Kim, and A. K. Geim, *Nat. Commun.* **10**, 4008 (2019).
- [30] D. K. Efimkin and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **98**, 035404 (2018).
- [31] P. Rickhaus, J. Wallbank, S. Slizovskiy, R. Pisoni, H. Overweg, Y. Lee, M. Eich, M.-H. Liu, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Ihn, and K. Ensslin, *Nano Lett.* **18**, 6725 (2018).
- [32] M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055502 (2012).
- [33] S. Soleimanikahnoj and I. Knezevic, *Phys. Rev. Appl.* **8**, 064021 (2017).
- [34] V. Tayari, N. Hemsworth, O. Cyr-Choinière, W. Dickerson, G. Gervais, and T. Szkopek, *Phys. Rev. Appl.* **5**, 064004 (2016).
- [35] S. K. Banerjee, L. F. Register, E. Tutuc, and A. H. Macdonald, *IEEE Electron Device Lett.* **30**, 158 (2009).
- [36] B. Partoens and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **74**, 075404 (2006).
- [37] K. Kolasinski, B. Szafran, B. Brun, and H. Sellier, *Phys. Rev. B* **94**, 075301 (2016).
- [38] B. Rzeszutarski and B. Szafran, *Phys. Rev. B* **98**, 075417 (2018).
- [39] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [40] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, *Nano Lett.* **12**, 113 (2011).
- [41] Y. Zhang, T. Tang, G. C. Z. Hao, M. C. Martin, Z. A., M. Crommie, Y. Shen, and F. Wang, *Nature (London)* **459**, 820 (2009).

Effective Landé factors for an electrostatically defined quantum point contact in silicene

Bartłomiej Rzeszutarski,¹ Alina Mreńca-Kolasińska,^{1,2} François M. Peeters,³ and Bartłomiej Szafran¹

¹*AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science,
al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Poland*

²*Department of Physics, National Cheng Kung University, Tainan 70101, Taiwan*

³*Universiteit Antwerpen, Departement Fysica, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerpen, Belgium*

The transconductance and effective Landé g^* factors for a quantum point contact defined in silicene by the electric field of a split gate is investigated. The strong spin-orbit coupling in buckled silicene reduces the g^* factor for in-plane magnetic field from the nominal value 2 to around 1.2 for the first- to 0.45 for the third conduction subband. However, for perpendicular magnetic field we observe an enhancement of g^* factors for the first subband to 5.8 in nanoribbon with zigzag and to 2.5 with armchair edge. The main contribution to the Zeeman splitting comes from the intrinsic spin-orbit coupling defined by the Kane-Mele form of interaction.

I. INTRODUCTION

Quantum point contacts (QPC) in spin-orbit-coupled semiconductors are elementary elements in the construction of spin-active devices due to their ability to enhance the effective Landé factor g^* [1]. In the absence of external magnetic field QPC system with strong spin-orbit interaction can work as a spin filter [2–6]. Spin orbit interactions due to the crystal lattice asymmetry and external electric fields introduce effective magnetic fields [7–9] for the flowing electrons. The orientation of an external magnetic field (in-plane or out-of-plane) has a strong impact on conductance due to the spin spatial anisotropy of the spin-orbit field [10–12] which has been observed experimentally [13, 14] by splitting the transconductance lines. In systems with strong spin orbit interaction the anisotropy is very strong, e.g. in InSb QPCs [15] the in-plane $|g^*| = 26$ and out-of-plane is two times higher, $|g^*| = 52$ for the lowest conducting subband. On the other hand in materials with low intrinsic spin-orbit coupling such as pristine graphene, the g^* value is $\simeq 2$ as for free electrons [16–18]. In bilayer graphene (BLG) structures quantum point contacts can be formed electrostatically [19–23] due to the opening of a band gap that can be tuned by a perpendicular electric field [24–28]. The spin g^* is still $\simeq 2$ in bilayer graphene QPC [22], however the valley g factor can be tuned and used as an additional degree of freedom. In the silicene [29–32], a graphene-like honeycomb structure, two sublattices displaced in z direction introduce strong intrinsic spin orbit interaction [33]. Additionally, the band gap in silicene can be electrostatically modified by external gates [34–37] that makes it a good candidate for a spin-active device.

In this paper we present a numerical calculation of the effective Landé g^* factors for silicene using the transconductance lines according to a standard experimental procedure of determining the g^* values [13, 14, 38–40]. We test the g^* anisotropy by dependence on the orientation of the external magnetic field. We discuss impact of the SO interaction on g^* value for in-plane and out-of-plane magnetic field.

II. THEORY

We consider a device with a quantum point contact defined in silicene nanoribbon [Fig. 1]. The QPC profile is defined by external split gates at voltages $\pm V_g/(-e)$ which induce a potential V_{ex} at both sublattices equally forming QPC profile. In our calculations we assume a model potential profile given by a Gaussian [41]

$$V_{Gauss}(x, y; x_0, y_0, \Delta x, \Delta y) = V_g e^{-\frac{(x-x_0)^2}{(2\Delta x)^2}} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{(2\Delta y)^2}} \quad (1)$$

and model the QPC with

$$V_{ex} = V_{Gauss}(x, y; 165 \text{ nm}, 0 \text{ nm}, 40 \text{ nm}, 40 \text{ nm}) + V_{Gauss}(x, y; 165 \text{ nm}, 200 \text{ nm}, 40 \text{ nm}, 40 \text{ nm}). \quad (2)$$

The higher the applied gate voltage, the narrower the conductive channel in the center of the QPC. Figure 2 presents example of gate energy distribution within silicene for the specific case where $V_g = 0.5$ eV [Fig. 2(a)], and the profile of the potential [Fig. 2(b)].

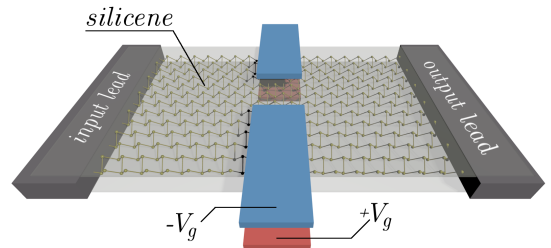


FIG. 1. Schematic view of the system. A silicene nanoribbon is sandwiched between dielectric layers. Two pairs of external gates provides electric potential V_g equalizing the effective energy on both sublattices

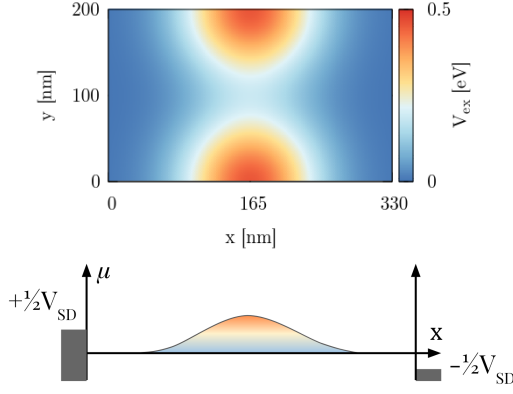


FIG. 2. (a) Map of the external electric potential for $V_g = 0.5$ eV, in the system of size 200 nm by 330 nm. Two Gaussian 2D potentials are used to form the quantum point contact in the middle of the silicene nanoribbon. (b) Profile of the QPC. The occupied states below chemical potential ($\pm V_{SD}/2$) are marked on both sides by rectangles with the assumption of a symmetric drop along the device.

A. Hamiltonian

We use the tight-binding Hamiltonian [42]:

$$H_{eff} = -t \sum_{\langle k,j \rangle, \chi} c_{k\chi}^\dagger c_{j\chi} + e\mathbb{E}_z \sum_{k,\chi} \gamma_k c_{k,\chi}^\dagger c_{k,\chi}, \\ + \frac{1}{2}g\mu_B \sum_{k,\chi,\varrho} c_{k,\chi}^\dagger c_{k,\varrho} (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{\chi\varrho} + H_{SO}, \quad (3)$$

where we use creation ($c_{k\chi}^\dagger$) and annihilation ($c_{k\chi}$) operators for an electron on site k with spin χ . Ions in the nearest neighborhood are specified by $\langle k, j \rangle$. $t = 1.6$ eV is the hopping parameter [33, 42] and e is the elementary electric charge. The \mathbb{E}_z term describes external perpendicular electric field with a factor $\gamma_k = \frac{1}{2} \cdot 0.46$ Å that determines the offset in the sublattices. The penultimate term introduces the external magnetic field $\mathbf{B} = [b_x, b_y, b_z]$ to the system, where $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z]$ is a vector of Pauli matrices. We use the Landé factor $g = 2$ for electrons in silicene along with Bohr magneton constant μ_B . The last term describes the spin-orbit part of the effective Hamiltonian H_{eff} :

$$H_{SO} = t_{KM} \sum_{\langle \langle k,j \rangle \rangle, \chi, \varrho} \nu_{kj} c_{k\chi}^\dagger \sigma_{\chi, \varrho}^z c_{j\varrho} \\ + t_R \sum_{\langle \langle k,j \rangle \rangle, \chi, \varrho} \mu_{kj} c_{k\chi}^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{d}_{kj})_{\chi\varrho}^z c_{j\varrho}, \quad (4)$$

where the first part describes the intrinsic spin-orbit coupling in Kane-Mele (KM) form [8, 43] with $t_{KM} = i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}}$ and $\lambda_{SO} = 3.9$ meV, while the second term is an intrinsic Rashba spin-orbit interaction $t_R = -i \frac{2}{3} \lambda_R$ with $\lambda_R = 0.7$ meV [33, 42]. The summation in both cases runs over next-nearest neighbor ions $\langle \langle k, j \rangle \rangle$, where μ_{kj} is +1 or -1

for sublattice A and B , respectively. The $\nu_{kj} = +1$ (-1) for the counterclockwise (clockwise) hopping from j to k ion, where \mathbf{d}_{kj} is a vector pointing from ion k to ion j . The lattice constant $a = 3.86$ Å. To calculate the total conductance we use the Landauer formalism

$$G = \frac{e^2}{h} T_{total}(E_F) = \frac{e^2}{h} \sum_m^N T_m, \quad (5)$$

where N is the total number of propagating modes and T_m is the transmission probability of the m th mode from the input to the output lead. We use quantum transmitting boundary method to solve the scattering problem [40]. For finite potentials of source and drain the current is calculated as follows:

$$I(V_{SD}; T=0) = \frac{e}{h} \int_{-e \frac{V_{SD}}{2}}^{+e \frac{V_{SD}}{2}} T_{total}(E_F + E) dE, \quad (6)$$

with the assumption of a drop of the potential along the device for nonequivalent chemical potential of the leads [Fig. 2(b)]. With a nonzero bias, we use the formula for the conductance

$$G = \frac{dI(V_{SD})}{dV_{SD}} \quad (7)$$

and we define the transconductance dG/dV_g as a second mixed derivative of the current,

$$\frac{dG}{dV_g} = \frac{d^2 I(V_{SD})}{dV_{SD} dV_g}. \quad (8)$$

The classical procedure of calculating the effective Landé g^* factors from transconductance is based on compensation of the Zeeman splitting by application of source-drain bias into the system along with energy modulation from the gate potential [13, 14, 38, 39]. The gate-to-energy conversion factor can be determined for each subband from the slope of the transconductance lines in $B = 0$ according to the formula:

$$\xi_m = \frac{1}{2} \frac{dV_{SD}}{dV_g} \quad (9)$$

where the $1/2$ factor results of source-drain potential shift that is equal to half of the applied bias: $1/2 V_{SD}$. The final step in the procedure of finding g^* factors is to evaluate the transconductance as a function of magnetic field B , and for each subband to find the susceptibility as the derivative $\frac{d(\Delta V_g(B))}{dB}$. Then the effective Landé factor for m th subband is given by

$$g_m^* = \frac{1}{\mu_B} \frac{d(\Delta V_g(B))}{dB} \xi_m. \quad (10)$$

III. RESULTS

To reduce the numerical cost of the calculations we use the scaling method [30] with a scaling factor $s_f = 4$, that gives new crystal lattice constant $a_s = a \cdot s_f$ along with new hopping parameter $t_s = \frac{t}{s_f}$. We replace a to a_s and t to t_s in Hamiltonian (4). All the results below are presented for the Fermi energy $E_F = 0.07$ eV, if not stated otherwise.

A. Band structure

For the constriction center of the QPC we calculate the band structure for two different edge types: armchair and zigzag. In the zigzag case when spin-orbit interactions are omitted ($H_{SO} = 0$) we observe spin-degenerate subbands at $\mathbf{B} = 0$ [Fig. 3(a)] for both valleys K' and K , while this degeneracy is lifted upon applying an external magnetic field perpendicular to the sample [Fig. 3(c) for $B_z = 2$ T] that slightly splits the spin-states and shifts the subbands higher for K and lower for K' . When all spin-orbital interactions are included ($H_{SO} \neq 0$) then degeneracy is lifted even at $\mathbf{B} = 0$, since the Zeeman-like SO interaction in KM interaction [8, 43] introduces an effective magnetic field with an amplitude along the z axis that splits the spin-states in the subbands [Fig. 3(b)]. Up (\uparrow) spin states decrease their energy in the K valley and increase in the K' valley, while down (\downarrow) spin states shift in an opposite way. Applying an external perpendicular magnetic field in the case with SO interactions taken into account changes the energy gap in the same manner as with SO interactions omitted [Fig. 3(d)]. We observe an analogous behavior for the armchair type of edges [Fig. 4].

B. Conversion factors

We calculate the transconductance with a bias V_{SD} applied using Eqs. (6-8). Fig. 6 presents maps of transconductance for armchair and zigzag edges for the cases – with spin-orbit interactions included or neglected in the Hamiltonian. The dependence of the compensation of the Zeeman splitting by source-drain bias V_{SD} on the gate voltage V_G are marked by straight dashed lines for each subband with $H_{SO} = 0$ [Fig. 6(c,d)]. For each subband we calculate the conversion factors (Eq. 9) from the slope of the corresponding line $\frac{dV_{SD}}{dV_G}$ for both types of nanoribbons: armchair and zigzag. Results are presented in Tab. I.

In the case with spin-orbit interactions taken into consideration [Fig. 6(a,b)] we observe twice more subbands that emerge from splitting caused by the Zeeman-like part of the intrinsic SO coupling.

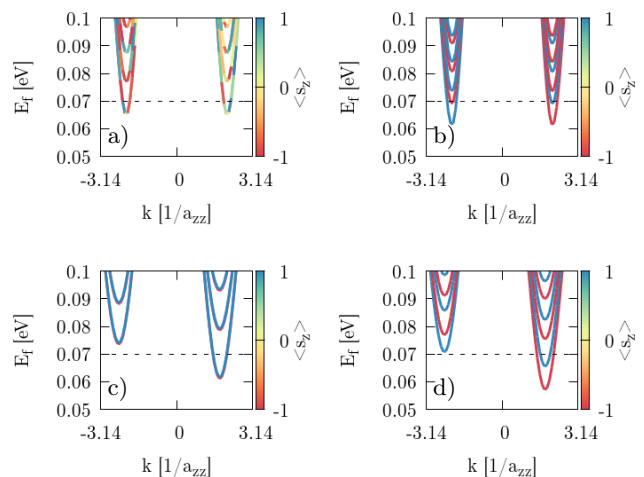


FIG. 3. Band structure of silicene nanoribbon with zigzag edges calculated for the center of the QPC constriction with $V_g = 0.15$ eV, with spin-orbit interactions neglected (a,c) and included (b,d). Magnetic field is equal to $B_z = 0$ (a,b) and $B_z = 2$ T (c,d). Black dashed line denotes the Fermi energy $E_F = 0.07$ eV. The color bar indicates the mean value of the spin projection along z axis. The $a_{zz} = 3a_s$ is the zigzag lattice constant.

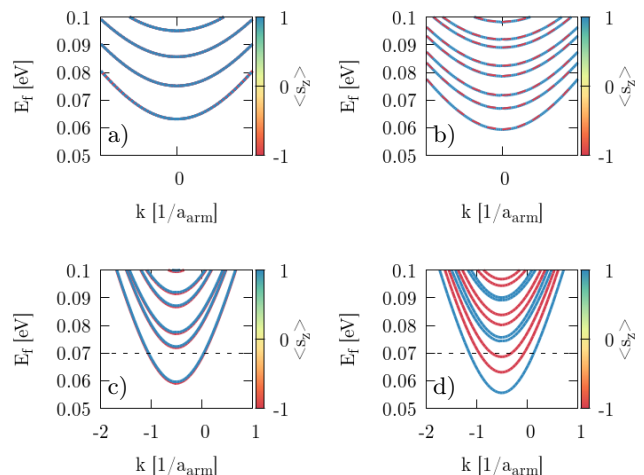


FIG. 4. Same as Fig. 3 but for a nanoribbon with armchair edges. Armchair lattice period is equal to $a_{arm} = \frac{6a_s}{\sqrt{3}}$.

C. Effective Landé factors

We calculate the transconductance by taking the derivative of the G maps with respect to V_g . First we consider perpendicular magnetic field $B_\perp = \mathbf{B} = (0, 0, B_z)$. We present results for $H_{SO} = 0$ [Fig. 7] only for the zigzag nanoribbon since for the armchair system similar results are obtained. The two separate spin-states cannot be distinguished from the transconductance map so the calculation of the effective Landé factor is not possible in the standard way. However, we are able to identify val-

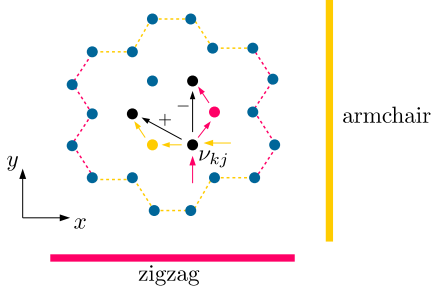


FIG. 5. Schematic view of the ν_{kj} (Eq. 4) sign for two different edge types of silicene. For the same considered atom j paths to the next-nearest neighbor k differ in zigzag and armchair configuration and produce opposite sign of the local effective magnetic field resulting from KM term. This will produce mirrored image of spin signs in subband structures for armchair and zigzag.

TABLE I. Conversion factors for the first three subbands calculated from the transconductance (Fig. 6) without spin-orbit interaction.

	ξ_1	ξ_2	ξ_3
armchair	0.40	0.42	0.47
zigzag	0.41	0.44	0.49

ley and spin-state from the band structure in Fig. 7(b). Upon subtraction of the energies at different B_z/V_g values we find $g^* = 2.0$, which agrees with the expected value $g = 2$ for electrons in silicene.

For nonzero H_{SO} in the Hamiltonian (3) the intrinsic SO interaction in the Zeeman-like form separates the

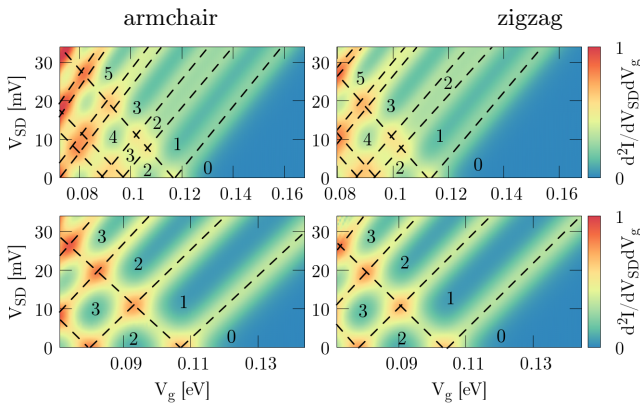


FIG. 6. The transconductance $d^2I/dV_{SD}dV_g = \frac{dG}{dV_g}$ for armchair (left column) and zigzag (right column) nanoribbons with SO interactions (top row) and without (SO interactions neglected). Dashed lines denote the conductance levels (marked by numbers) and are used to calculate gate-voltage to energy conversion factors.

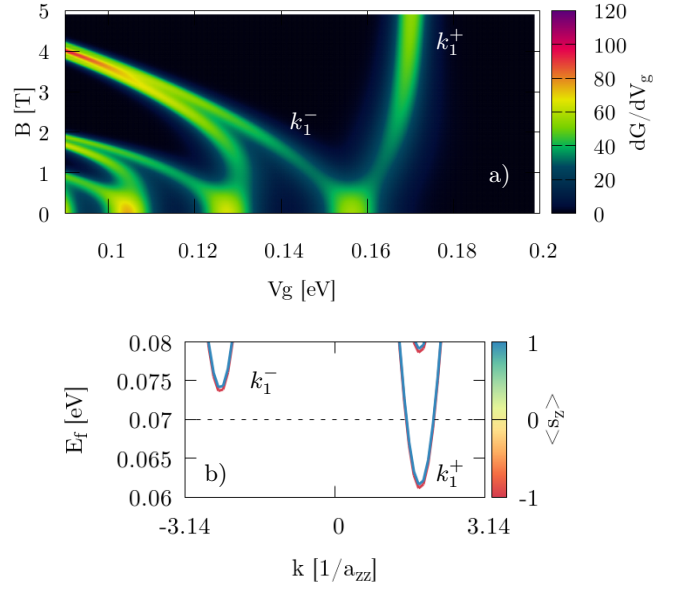


FIG. 7. (a) Transconductance for the perpendicular $B \perp$ orientation of the magnetic field with SO interactions neglected ($H_{SO} = 0$). Smooth transconductance peaks correspond to new conductive states in the subbands (two first marked as k_1^+ and k_1^-). Each subband includes two opposite spin states which are close enough not to be seen as separate peak [see zoom in plot (b)]. Results are for zigzag edges.

spin states and now they can be easily distinguished in the transconductance map [Fig. 8] when external magnetic field B_z is applied. Identification of the subband and valley number comes from the band structure of the zigzag nanoribbon [Fig. 3]. Calculating the slope of $d(\Delta V_g(B))/dB$ (marked by dashed lines) and using Eq. (10) with conversion factors [Tab. I] we obtain $g_1^* = 5.8$, $g_2^* = 13.3$ for the case with zigzag edges and $g_1^* = 2.5$, $g_2^* = 14.0$ for armchair edges [Tab. II]. The difference comes directly from the geometry (Fig. 5) where ν_{kj} in KM term defines the sign of an additional energy to spin states. Applying external magnetic field compensates this energy if its direction agrees with the emerged local magnetic field $\left[\frac{d(\Delta V_g(B))}{dB} > 0 \text{ for } K' (k > 0) \text{ in zigzag}\right]$, or forfeit for the opposite directions $\left[\frac{d(\Delta V_g(B))}{dB} < 0 \text{ for } K (k < 0) \text{ in zigzag}\right]$. We obtain mirrored behavior in armchair nanoribbons due to the ν_{kj} sign. In Fig. 10(c,d) we see that the slope for the first subband (N_1) is positive in the zigzag structure and negative in the armchair. Small difference in g_2^* (slopes N_2 in Fig. 10(c,d)) for armchair and zigzag comes from the fact that deeper conductive bands have higher energy and additional fraction that comes from KM term is less significant in this scenario.

The second case concerns an in-plane magnetic field B_{\parallel} . We present the transconductance for the zigzag nanoribbon for $\mathbf{B} = [0, B_y, 0]$ [Fig. 9(a,b)] and we ob-

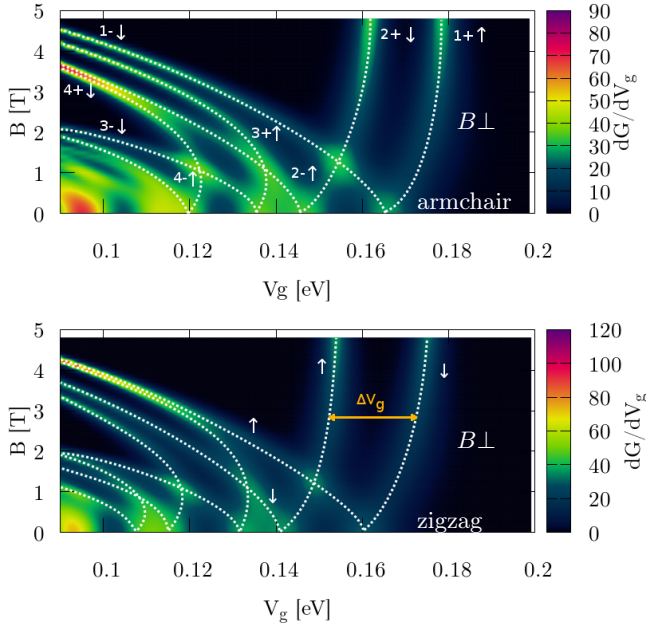


FIG. 8. Transconductance for perpendicular $\mathbf{B} = [0, 0, B_z]$ orientation of external magnetic field applied to the system with active SO (nonzero terms in Hamiltonian). Numbers denote the subband index in $k > 0$ valley (+) and $k < 0$ (-) with spin \uparrow (\downarrow) marked by white dotted lines. The ΔV_g term is calculated between two spin-correlated subbands within the same valley band.

tain similar results for $\mathbf{B} = [B_x, 0, 0]$ fields (not shown). For the armchair structure in B_{\parallel} transconductance plots looks similar (not shown) and g^* were calculated separately. The new states that enhance the conductance at E_F come in pairs of the same spin-type for $B_y > 0$ [Fig. 9(c-f)]. Again, the splitting at $B_y = 0$ is an effect of SO in KM form, but contrary to Fig. 7(a) this time we can calculate g^* from transconductance even if double-states are visible – the valley number in this case is not important. Slope of ΔV_g over B_y is calculated from the fit (Fig. 10) to the dashed lines in Fig. 9(a,b). Results are presented in Tab. II. Spin of an electron is strongly aligned along the z axis when SO interaction is taken into account, hence the impact of external in-plane magnetic field is suppressed and we observe decreased $g^* < 2$ values.

TABLE II. Effective Landé factors g^* .

SO off	g_1^*	g_2^*	g_3^*	SO on		
				$B_{\parallel zz}$	$B_{\parallel \alpha}$	$B_{\perp \alpha}$
B_{\parallel}	2.1	2.2	2.1	1.2	1.17	5.8
B_{\perp}	2.0	2.0	2.0	0.78	0.92	13.3
				0.45	0.32	-
						2.5
						14.0
						-

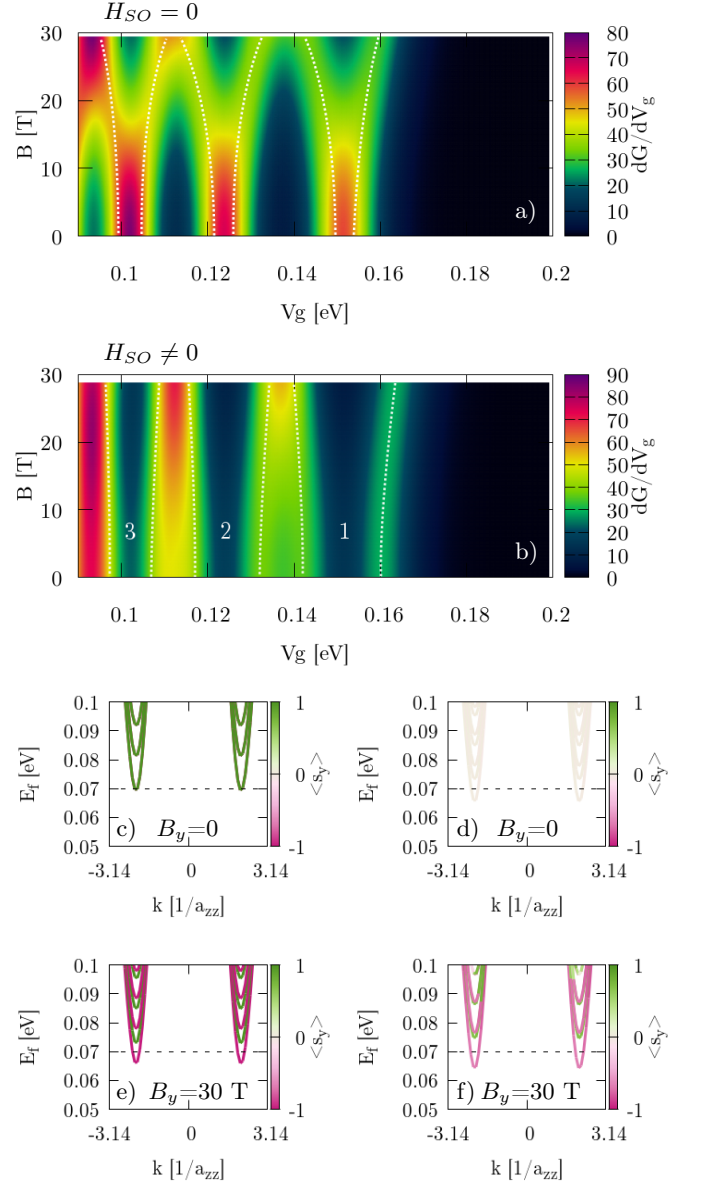


FIG. 9. (a,b) Transconductance for the in-plane $\mathbf{B} = [0, B_y, 0]$ orientation of the magnetic field for zigzag edges. Double-spin states (of the same sign from both valleys) at E_F that enhance the conductance are marked by white dashed lines along the peaks. (c-f) Band structure for the center of the constriction. Colorbar indicates expected value of the spin projected to the y axis. Left column (a,c,e) corresponds to calculations with neglected SO part of the Hamiltonian, while right column (b,d,f) are with included SO part, respectively.

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

We studied the effective g^* factors in electrostatic quantum point contacts defined in silicene using the tight-binding Hamiltonian by solving the scattering problem using the quantum transmitting boundary method.

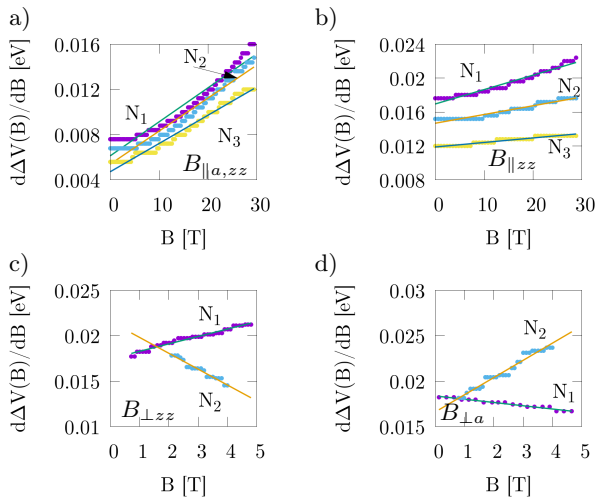


FIG. 10. The splitting of the transconductance for parallel magnetic field B_{\parallel} (a) without SO and (b) with SO term active. For perpendicular B_{\perp} (c) in zigzag and (d) in armchair nanoribbon. The slope of the fitted line for each split in the transconductance [see Fig. 9(a,b)] is equal to $d(\Delta V_g(B))/dB$.

The spin-orbit coupling radically changes the values of the Landé factors. We showed that Zeeman splitting in magnetic field oriented parallel to the plane of the silicene lattice is isotropic and does not depend strongly on the edge type. Zeeman splitting from an external magnetic field is strongly suppressed by the intrinsic SO interaction in Kane-Mele form that introduces a Zeeman-like effec-

tive magnetic field perpendicular to the silicene plane. The spin-orbit interaction for the in-plane magnetic field decreases the effective g^* factor to $g_1^* = 1.2$ in the first subband, and $g_2^* = 0.78$, $g_3^* = 0.48$ for the next two in the zigzag structure, respectively. In armchair nanoribbon we obtain similar results for g^* : $g_1^* = 1.17$, moved slightly down/up/down $(-0.02, +0.14, -0.13)$ compared to zigzag for the 3 first subbands, due to the mirrored ν_{kj} sign that adds a local magnetic field energy in KM form.

For the perpendicular orientation of the magnetic field we obtain effective Landé factor $g_1^* = 5.8$ for the first subband and $g_2^* = 13.3$ for the second in a zigzag nanoribbon, and $g_1^* = 2.5$, $g_2^* = 14.0$ for the armchair edge type. Reasoning remains the same as in parallel case but now the interaction of SO coupling is more visible in the g^* factor for the first subbands, where local magnetic field significantly changes its value.

ACKNOWLEDGMENTS

B.R. is supported by Polish government budget for science in 2017-2021 as a research project under the program "Diamantowy Grant" (Grant No. 0045/DIA/2017/46), by the EU Project POWR.03.02.00-00-I004/16 and NCN grant UMO2019/32T/ST3/00044. A.M-K. is supported with "Diamantowy Grant" (Grant No. 0045/DIA/2017/46). The calculations were performed on PL-Grid Infrastructure on Prometheus at ACK-AGH Cyfronet.

-
- [1] K. J. Thomas, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, M. Pepper, D. R. Mace, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 135 (1996).
 - [2] N. Bhandari, M. Dutta, J. Charles, R. S. Newrock, M. Cahay, and S. T. Herbert, *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology* **4**, 013002 (2013).
 - [3] M. P. Nowak and B. Szafran, *Applied Physics Letters* **103**, 202404 (2013).
 - [4] S. Kim, Y. Hashimoto, Y. Iye, and S. Katsumoto, *Journal of the Physical Society of Japan* **81**, 054706 (2012).
 - [5] A. Aharony, O. Entin-Wohlman, Y. Tokura, and S. Katsumoto, *Physical Review B* **78** (2008), 10.1103/physrevb.78.125328.
 - [6] M. Eto, T. Hayashi, and Y. Kurotani, *Journal of the Physical Society of Japan* **74**, 1934 (2005).
 - [7] L. Meier, G. Salis, I. Shorubalko, E. Gini, S. Schön, and K. Ensslin, *Nature Physics* **3**, 650 (2007).
 - [8] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
 - [9] A. W. Cummings, J. H. Garcia, J. Fabian, and S. Roche, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 206601 (2017).
 - [10] O. Gouko, F. Bauer, J. Heyder, and J. von Delft, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 266402 (2014).
 - [11] Y. V. Pershin, J. A. Nesteroff, and V. Privman, *Physical Review B* **69** (2004), 10.1103/physrevb.69.121306.
 - [12] M. Scheid, M. Kohda, Y. Kunihashi, K. Richter, and J. Nitta, *Physical Review Letters* **101** (2008), 10.1103/physrevlett.101.266401.
 - [13] T. P. Martin, A. Szorkovszky, A. P. Micolich, A. R. Hamilton, C. A. Marlow, R. P. Taylor, H. Linke, and H. Q. Xu, *Phys. Rev. B* **81**, 041303 (2010).
 - [14] F. Lu, N. Tang, S. Huang, M. Larsson, I. Maximov, M. Graczyk, J. Duan, S. Liu, W. Ge, F. Xu, and B. Shen, *Nano Letters* **13**, 4654 (2013).
 - [15] F. Qu, J. van Veen, F. K. de Vries, A. J. A. Beukman, M. Wimmer, W. Yi, A. A. Kiselev, B.-M. Nguyen, M. Sokolich, M. J. Manfra, F. Nichele, C. M. Marcus, and L. P. Kouwenhoven, *Nano Letters* **16**, 7509 (2016), pMID: 27805409, <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b03297>.
 - [16] J. Sichau, M. Prada, T. Anlauf, T. J. Lyon, B. Bosnjak, L. Tiemann, and R. H. Blick, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 046403 (2019).
 - [17] T. J. Lyon, J. Sichau, A. Dorn, A. Centeno, A. Pesquera, A. Zurutuza, and R. H. Blick, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 066802 (2017).
 - [18] R. G. Mani, J. Hankinson, C. Berger, and W. A. de Heer, *Nature Communications* **3** (2012), 10.1038/ncomms1986.
 - [19] H. Overweg, H. Eggimann, X. Chen, S. Slizovskiy, M. Eich, R. Pisoni, Y. Lee, P. Rickhaus, K. Watanabe, T. Taniguchi, V. Fal'ko, T. Ihn, and K. Ensslin, *Nano*

- Letters **18**, 553 (2017).
- [20] H. Overweg, A. Knothe, T. Fabian, L. Linhart, P. Rickhaus, L. Wernli, K. Watanabe, T. Taniguchi, D. Sánchez, J. Burgdörfer, F. Libisch, V. I. Fal'ko, K. Ensslin, and T. Ihn, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 257702 (2018).
 - [21] L. Banszerus, B. Frohn, T. Fabian, S. Somanchi, A. Epping, M. Müller, D. Neumaier, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. Libisch, B. Beschoten, F. Hassler, and C. Stampfer, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 177701 (2020).
 - [22] Y. Lee, A. Knothe, H. Overweg, M. Eich, C. Gold, A. Kurzmam, V. Klasovika, T. Taniguchi, K. Wantanabe, V. Fal'ko, T. Ihn, K. Ensslin, and P. Rickhaus, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 126802 (2020).
 - [23] R. Kraft, I. V. Krainov, V. Gall, A. P. Dmitriev, R. Krupke, I. V. Gornyi, and R. Danneau, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 257703 (2018).
 - [24] Y. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, *Nature* **459**, 820 (2009).
 - [25] J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu, A. F. Morpurgo, and L. M. K. Vandersypen, *Nature Materials* **7**, 151 (2007).
 - [26] E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. M. B. L. dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim, and A. H. C. Neto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
 - [27] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, *Science* **313**, 951 (2006).
 - [28] K. F. Mak, C. H. Lui, J. Shan, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 256405 (2009).
 - [29] C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
 - [30] M.-H. Liu, P. Rickhaus, P. Makk, E. Tóvári, R. Maurand, F. Tkatschenko, M. Weiss, C. Schönenberger, and K. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 036601 (2015).
 - [31] S. Chowdhury and D. Jana, *Reports on Progress in Physics* **79**, 126501 (2016).
 - [32] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, and D. Akinwande, *Nature Nanotechnology* **10**, 227 (2015).
 - [33] M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055502 (2012).
 - [34] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
 - [35] W.-F. Tsai, C.-Y. Huang, T.-R. Chang, H. Lin, H.-T. Jeng, and A. Bansil, *Nature Communications* **4**, 1500 EP (2013), article.
 - [36] K. Shakouri, H. Simchi, M. Esmaeilzadeh, H. Mazidabadi, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **92**, 035413 (2015).
 - [37] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, *Nano Letters* **12**, 113 (2011).
 - [38] R. Danneau, O. Klochan, W. R. Clarke, L. H. Ho, A. P. Micolich, M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, M. Pepper, D. A. Ritchie, and U. Zülicke, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 026403 (2006).
 - [39] T. P. Martin, A. Szorkovszky, A. P. Micolich, A. R. Hamilton, C. A. Marlow, H. Linke, R. P. Taylor, and L. Samuelson, *Applied Physics Letters* **93**, 012105 (2008).
 - [40] K. Kolasiński, A. Mreńca-Kolasińska, and B. Szafran, *Phys. Rev. B* **93**, 035304 (2016).
 - [41] M. D. Petrović and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **91**, 035444 (2015).
 - [42] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
 - [43] M. Laubach, J. Reuther, R. Thomale, and S. Rachel, *Phys. Rev. B* **90**, 165136 (2014).

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Kraków dn. 7.05.2021r.

Oświadczenie o współautorstwie

Jestem współautorem czterech artykułów wchodzących w skład rozprawy doktorskiej mgr. inż. Bartłomieja Rzeszotarskiego pt. „Transport ładunku i spinu w nanoukładach na bazie silicenu”

A1 Bartłomiej Rzeszotarski, Bartłomiej Szafran, Electron spin inversion in gated silicene nanoribbons, Phys. Rev. B 98, 075417 (2018)

A2. Bartłomiej Rzeszotarski, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, Electron interferometry and quantum spin Hall phase in silicene, Phys. Rev. B 99, 165426 (2019),

A3. Bartłomiej Szafran, Bartłomiej Rzeszotarski, Alina Mreńca-Kolasińska, Topologically protected wave packets and quantum rings in silicene, Phys. Rev. B 100, 085306 (2019),

A4. Bartłomiej Rzeszotarski, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, Aharonov-Bohm oscillations of four-probe resistance in topological quantum rings in silicene and bilayer graphene, Phys. Rev. B 101, 115308 (2020).

Mój wkład do tych prac polegał na współpracy w planowaniu badań, selekcji wyników do publikacji oraz redagowaniu tekstu. Wyniki w pracy A3 w części dotyczącej ruchu pakietów falowych na złączu n-p w ujęciu zależnym od czasu pochodzą z moich obliczeń.



prof. Bartłomiej Szafran

Katedra Informatyki Stosowanej i Fizyki Komputerowej

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH

Oświadczenie o współautorstwie

Jestem współautorką trzech artykułów wchodzących w skład rozprawy doktorskiej mgr. Bartłomieja Rzeszotarskiego pt. „Transport ładunku i spinu w nanoukładach na bazie silicenu”

1. Bartłomiej Rzeszotarski, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Electron interferometry and quantum spin Hall phase in silicene*, **Phys. Rev. B** **99**, 165426 (2019),
2. Bartłomiej Szafran, Bartłomiej Rzeszotarski, Alina Mreńca-Kolasińska, *Topologically protected wave packets and quantum rings in silicene*, **Phys. Rev. B** **100**, 085306 (2019),
3. Bartłomiej Rzeszotarski, Alina Mreńca-Kolasińska, Bartłomiej Szafran, *Aharonov-Bohm oscillations of four-probe resistance in topological quantum rings in silicene and bilayer graphene*, **Phys. Rev. B** **101**, 115308 (2020).

Mój wkład w pierwszej pracy polegał na wsparciu obliczeń w układach wielokońcówkowych.

W drugim i trzecim artykule dokonałam obliczeń transportu w układzie opartym na dwuwarstwowym grafenie.

W każdej z prac uczestniczyłam w redakcji manuskryptu oraz opracowaniu części grafik.

Alina Mreńca-Kolasińska

6.05.2021, Tainan, Taiwan

Alina Mreńca-Kolasińska