

锯齿型石墨烯纳米带边界态

胡 边, 刘 娜, 刘 红

(南京师范大学物理科学与技术学院, 江苏 南京 210023)

[摘要] 基于 Kane-Mele 紧束缚模型, 在包含自旋轨道耦合作用和塞曼作用项后, 我们又引入更为合理的自洽在位库仑相互作用, 分析研究各相互作用项对边界带的能带结构和电子分布特征的影响. 研究表明, 自旋轨道耦合作用导致自旋简并劈裂出现非常小的能隙, 自洽在位库仑相互作用可使能隙增加, 边界带范围增加, 而塞曼效应却能保护边界带原有的拓扑属性, 使边界带穿过能隙, 同时也保护边界态在局域边界的自旋极化特征; 4 个边界能带由左右两组边界子能带系构成, 各边界子能带系在费米能处形成左右能隙和费米波矢, 其自旋量子霍尔系统构型属于 B 型.

[关键词] 锯齿型石墨烯纳米带, 能带结构, 自旋轨道耦合, 边界态

[中图分类号] O469 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2018)01-0042-08

Study of Edge States in Zigzag Graphene Nanoribbon

Hu Bian, Liu Na, Liu Hong

(School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

Abstract: Based on the Kane-Mele tight binding model, including spin orbit couplings (SOCs) and Zeeman effect, we introduce a more reasonable self-consistent on-site Coulomb interactions (O-CIs) to analyze and study the band structure and the characteristics of electronic distribution for edge bands. The research results show that the SOC's can lead to spin-splitting and let a small energy gap appear, the O-CIs can increase the energy gap and enlarge the region of edge states, and the Zeeman effect can protect the original topological properties of edge bands passing through the energy gap, it also protects the spin polarization characteristics at the edge sites. The four edge bands are classified into the left and the right sets of edge sub-band, corresponding to the left and the right energy gap and Fermi wave vector. Its spin quantum Hall system belongs to the type B.

Key words: zigzag graphene nanoribbon, band structure, spin-orbit coupling, edge states

单层石墨烯的出现在科学界激起了巨大的波澜^[1], 成为凝聚态物理领域内的一个新型潜能材料. 实验上很快在单层石墨烯上进行自旋电输运测量^[2-3], 特别是量子自旋霍尔效应的测量^[4-5], 随后人们对各种石墨烯纳米带的电子能带结构和电输运性质进行了大量理论研究. 早期理论研究不含自旋劈裂因子的能带结构和量子输运, 提出了无质量 Dirac 粒子色散关系^[6-13], 发现二维窄石墨烯纳米带的能带带隙和零能边态^[14-19]. 紧接着 Son Y W 等人注意到锯齿型石墨烯纳米带的第一性原理计算能带是存在能隙的, 遂在单电子单参数的半经验紧束缚能带模型基础上引入自洽格点在位库仑能^[20-22]. 在特别低偏压低温下 Baringhaus J 等人^[23-24]精确测量不同长度和宽度的石墨烯纳米带的量子电导, 发现零偏压下量子电导的整数随着长度的增加从 2 变到 0^[23]. 低温下长度 $L = 6 \text{ nm}$ 宽度 $W = 2 \text{ nm}$ 的石墨烯纳米带中似 Farby-Perot 共振透射探测显示出 1 个 5 meV 输运能隙^[24].

另一个引起能带自旋劈裂的因素是自旋轨道耦合效应, 50 多年前人们已经知道在石墨中存在自旋轨道耦合效应^[25-26]. 在石墨烯中有两种自旋轨道耦合, 一种是来源碳原子内部的内禀自旋轨道耦合作用^[25], 另一种是外电场引起的 Rashba 自旋轨道耦合^[26]. 最近, Yao 运用紧束缚方法和第一性原理计算估

收稿日期: 2017-04-17.

基金项目: 国家自然科学基金(10947004).

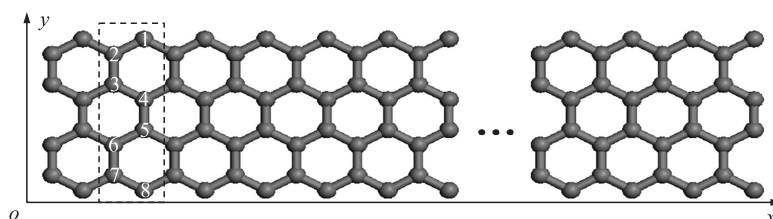
通讯联系人: 刘红, 教授, 研究方向: 低维凝聚态物理理论. E-mail: liuhong3@njnu.edu.cn

算碳原子内禀自旋轨道耦合仅有 $1 \mu\text{mV}$ ^[27]. Kane-Mele^[28-29]在紧束缚理论的基础上引入描述内禀自旋轨道耦合作用和 Rashba 自旋轨道耦合作用的作用项. 他们发现自旋轨道耦合使石墨烯能带打开一个能隙, 并且有限宽度的 Zigzag 石墨烯条带的能带结构中存在 4 条无散射的边界带和拓扑性非平庸量子自旋霍尔态. 盛利等^[30-31]从 Kane-Mele 模型出发证明在时间反演对称被破坏的情况下量子自旋霍尔体系的非平庸拓扑性质仍然存在, 提出通过人工消除边界态反演对称性, 将边界态的一般性质和体能带的拓扑性质联系起来从而实现稳定的自旋霍尔效应, 盛利研究结果表明边界带能否穿越费米能, 对应的量子霍尔体系也将不同(详见文献 31 综述). 在与石墨烯结构类似的硅烯中, 改变自旋轨道耦合强度, Ezawa^[32-34]采用 Kane-Mele 模型对硅烯纳米带受拓扑保护的边界态和量子自旋霍尔系统的相变做了详细研究. 因此, Kane-Mele 模型已成功地用于研究和分析各种自旋轨道耦合作用导致的各种新奇性质和效应, 特别是量子自旋霍尔效应. 特别是最近, Baringhaus J 等人精确测量了不同长度和宽度下石墨烯中, 低偏压和低温下的量子电导^[35-36], 在零偏压时, 量子化电导的整数随着长度的增加, 能从 2 减弱为零^[35], 探测长 6 nm 宽 2 nm 石墨烯的 Farby-Peror 类共振透射显示 1 个 5 meV 输运禁带^[36]. 但是石墨烯中自旋轨道耦合作用强度非常弱^[37-38], 新奇的自旋极化量子输运很难在锯齿型石墨烯纳米带中获得. 因此人们提出和发展了很多方法打开能隙^[13,31,33,39]和增强自旋轨道耦合强度^[40-44].

边界带能带结构对格点在位库仑作用非常敏感, 在位库仑作用引入后, 边界带的结构会发生很大的变化, 系统会从量子自旋霍尔体系转变为普通的量子霍尔体系^[13,31,33,39]. Wang^[45]等人加入格点在位能后, 边界带结构与盛利等人的研究结果有很大的差别. 许多理论工作研究了在位库仑相互作用在量子输运和能带结构上的影响, 例如掺杂格点上的库仑作用^[13]、位错晶格库仑作用^[31,33]和常数在位库仑作用^[39]. 然而, 这些类型的库仑作用都没有考虑自旋劈裂因子, 不能与第一性原理的能带结构比较^[22]. 相较而言, 自洽在位库仑作用^[23,24]能提供有带隙的合理的能带结构. 据我们所知, 还未有人将自旋轨道耦合、Zeeman 效应和自洽在位库仑作用一起考虑来研究边界态的能带结构. 在本文中我们将试图做这样一个工作, 首先在描述自旋轨道耦合的紧束缚 Kane-Mele 模型的基础上, 我们在哈密顿量中分别引入自洽格点在位库仑作用项和外加磁场导致的塞曼作用项, 并采用不同强度参数, 研究这两项在锯齿型石墨烯纳米带的电子结构中, 对边界带及其上状态电子的空间分布中的影响. 发现在系统中存在库仑作用 U 项时, 塞曼作用项在保持边界带穿过费米能和边界态自旋和边界局域化特征上具有非常重要的作用. 进一步, 我们分析认为, 在 k 空间的周期边界处的能量色散关系, 穿过费米能的两类边界带能量相等, 自旋方向不变, 但是空间分布发生相互转换, 类似于数学中的莫比乌斯(Mobius)带.

1 石墨烯纳米带的理论研究方法

石墨烯纳米带可以看作准一维材料, 我们用原胞内的原子数目表示其宽度. 本文中我们只对窄宽度为 $N=8$ 的锯齿型石墨烯纳米带进行研究, 其几何结构和原胞见图 1 所示.



虚线矩形框内区域表示原胞, 其中整数标记原胞内各格点

图 1 宽度为 8 的锯齿型石墨烯纳米带几何结构

Fig. 1 Geometric structure of ZGNRs with the width 8. The region in the dotted rectangle represents the primitive cell. The integers denote the site indices of atoms in primitive cell

基于紧束缚 Kane-Mele 模型, 本文中系统的哈密顿量表示如下^[5,12]:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (t c_i^\dagger c_j + h.c.) + H_U + H_{SO} + H_Z, \quad (1)$$

式中, H_U 、 H_{SO} 、 H_Z 的表示式如下

$$H_U = \sum_{i,\sigma} U \left(\langle n_{i\sigma} \rangle - \frac{1}{2} \right) n_{i\sigma},$$

$$\hat{H}_{SO} = iV_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger e_z \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{d}_{ij}) c_j + iV_{SO} \frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} c_i^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{d}_{kj} \times \mathbf{d}_{ik}) c_j,$$

$$H_Z = g \sum_i c_i^\dagger \sigma_z c_i.$$

其中第一项表示最近邻格点之间的跃迁项, H_U 表示自洽在位库仑能. H_{SO} 表示内禀自旋轨道耦合项和 Rashba 自旋轨道耦合项 (SOCs), H_Z 可以理解为外加磁场引起的塞曼 (Zeeman) 效应, g 是该效应强度参数. $\sum_{\langle i,j \rangle}$ 表示对最近邻格点求和, $c_i = (c_{i\uparrow} \ c_{i\downarrow})^T$ 表示第 i 个格点上 π 电子的湮灭算符, t 表示最近邻格点间的跃迁系数, 在本文中取为 $t = -2.6$ eV. $\sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}$ 表示对次近邻格点求和, \mathbf{d}_{kj} 表示位置 j 到位置 k 的矢量, $\boldsymbol{\sigma}$ 是泡利矩阵. V_{SO} 和 V_R 分别是内禀自旋轨道耦合和 Rashba 自旋轨道耦合的强度参数, 本文中取 $V_{SO} = 0.02t$, $V_R = 0.01t$ ^[31], 而我们先根据参考文献选取 $g = 0.02$ eV^[30-31], 为突出显示塞曼效应的影响, 本文中我们又取较大值 $g = 5$ eV 来进行比较分析.

特别要说一下, 自洽在位库仑相互作用项 H_U 中的粒子数算符 $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ 表示在原胞中第 i 个格点上 π 轨道自旋为 σ 粒子数. $U \approx 2.75$ eV^[23-24] 是根据自旋不受约束的局域密度泛函计算得到的结果. $\langle n_{i\uparrow(\downarrow)} \rangle$ 是用自洽的方法来计算, 方法如下:

$$\langle n_{i\uparrow(\downarrow)} \rangle = \int dE g_{i\uparrow(\downarrow)}(E) f(E - E_F), \quad (2)$$

式中, $g_{i\uparrow(\downarrow)}(E)$ 表示能量为 E 的态在格点 i 处其自旋向上 (向下) 占据几率, $f(E - E_F)$ 是费米分布函数, 其中 E_F 费米能. 公式 (2) 是 Fujita 等人^[46] 研究 Zigzag 石墨烯时, 根据 Hartree-Fock 近似和 Hubbard 模型^[47] 而引入的在位电子库仑相互作用项. 本文中取 $U = 0$ 和 4 eV 两个值分析在位库仑作用对边界带的影响.

2 结果与讨论

首先我们计算哈密顿量分别含有公式 (1) 中各项时, 及不同强度下的能带结构, 见图 2 所示. 只含动能项的哈密顿系统的能带结构前人已做了很详细的研究^[6-10,48]. 在图 3 中, 我们画出图 2 中对应能带结构中在费米能附近 4 个边界带上各态电子在空间格点的占据几率.

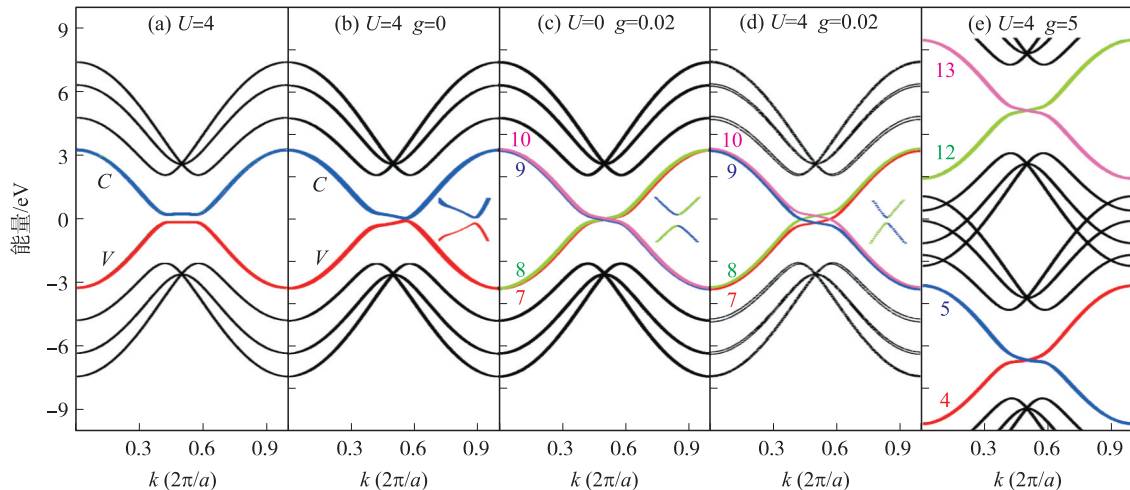


图 2 锯齿型石墨烯纳米带在各种哈密顿系统下的能带结构. (b-e) 含自旋轨道耦合, 参数都为 $V_{SO} = 0.02t$, $V_R = 0.01t$. (a) 含 $U = 4$ eV, 但是不含自旋轨道耦合和塞曼效应项, (b) $U + SO$, $U = 4$ eV, 不含塞曼 (Z) 项, (c) $SO + Z$, 且 $g = 0.02$ eV, 但是不含 U , (d) $SO + U + Z$, 其中 $U = 4$ eV, $g = 0.02$ eV. (e) $SO + U + Z$, 塞曼效应增强 $g = 5$ eV. 图中曲线表示边界带, 整数表示边界带指标

Fig. 2 The band structure of zigzag graphene nanoribbon in various Hamiltonian systems. (b-e) Involving the SOCs, the parameters of two SOIs are $V_{SO} = 0.02t$, $V_R = 0.01t$. (a) With the U term, but without the SO terms and the Zeeman term. (b) With the U and the SO terms, but without Zeeman term. (c) With the SO terms and the Zeeman term, but without the U term. (d) With all terms in Eq.(1). (e) Based on the (d), the strength of Zeeman effect is larger $g = 5$ eV. The curves and the integers denote the edge bands' indices for comparison

在没有自旋轨道耦合作用情况下,自洽在位库仑相互作用确实打开了能隙,见图 2(a). 能带相对 0.5 是对称的,有两个费米波矢 $k=0.43$ 和 $k=0.57$,能隙为 $\Delta=0.410$ eV,而在 $k=0.5$ 处时,能带劈裂 $\Delta_0 \approx 0.416$ eV,与第一性原理计算的能带结构一致^[22]. 加入自旋轨道耦合作用后,能隙由 410 meV 减小为 97 meV,见图 2(b),另一个显著不同是能带不对称,说明不仅自旋简并被破坏,而且时间反演对称性也被破坏,只有 1 个费米波矢 $k=0.56$. 相对应的电子空间分布图 3(a1)和(a2)中,导带上电子主要分布在边界格点 1 上,而价带电子则主要分布在相反边界格点 8 上,呈现出非常清晰的边界局域特征,特别是在 $k=0.56$ 处两个自旋向上和向下简并的导带和价带的边界态电子 100%地集中在同一边界处. 在本文中,电子 50%以上是分布在边界格点 1 或 8 上的态,我们称为边界态.

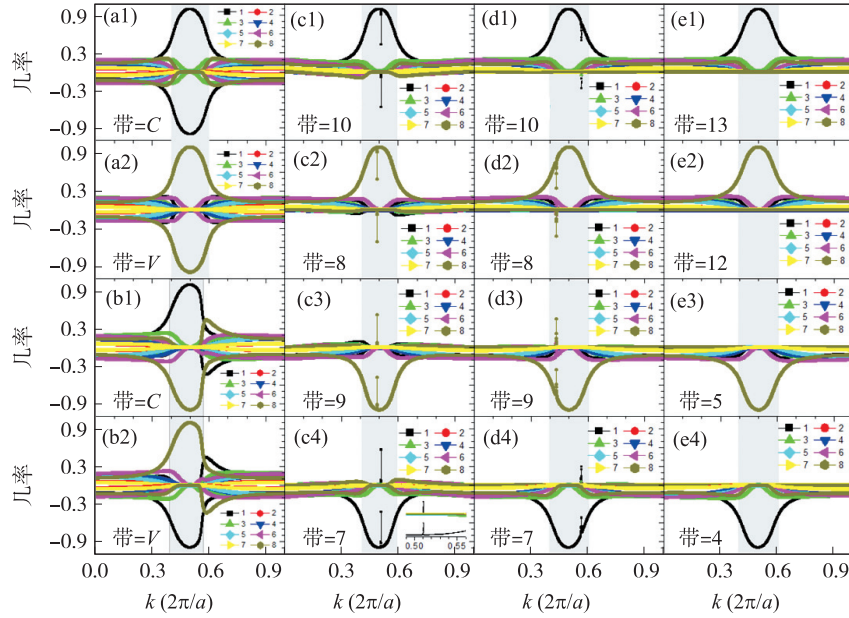


图 3 图 2 中 4 个边界带上各态电子在空间格点的占据几率。(a1~a2)含 $U=4$ eV,但是不含 $SO+Z$,导带和价带上各态电子的空间分布几率 (b1~b2)含 $U+SO$,不含塞曼项时,导带和价带上各态电子的空间分布几率。(c1~c4)含 $SO+Z$,且 $g=0.02$ eV,但是不含 U 时。(d1~d4) $SO+Z+U$, $g=0.02$ eV。(e1~e4) $SO+Z+U$,但塞曼效应作用强度为 $g=5$ eV。图中正负值表示自旋向上/向下的占据几率,其中整数表示纳米带原胞中格点的指标

Fig 3 The occupied probability at spacial sites of electrons in the states belonging to the four edge bands in Fig. 2. (a1~a2) with the U term, but without the $SO+Z$, the occupied probability of electron in the conduction and valence bands. (b1~b2) with the $U+SO$, but without Zeeman term, the occupied probability of electron in the conduction and valence bands. (c1~c4) with the $SO+Z$, $g=0.02$ eV, but without the U term. (d1~d4) with all terms $SO+U+Z$ in Eq. (1), $g=0.02$ eV. (e1~e4) with all terms $SO+U+Z$, the strength of Zeeman effect is $g=5$ eV. The positive/negative values denote as the spin-up/spin-down occupied probability at sites, respectively. The integer numbers express the site indices in primitive cell

图 3(b1)和(b2)与图 3(a1~a2)完全不同,加入自旋轨道耦合作用后,除能带结构的变化之外,电子的空间分布也发生了很大的变化. 在小于费米波矢 $k=0.56$ 的区域,导带中电子分布不再局域一个边界,而是根据电子自旋不同分别局域在两个边界上,两个边界上电子之间呈反铁磁耦合特征,而同一边界上的电子间是铁磁耦合. 在大于费米波矢 $k=0.56$ 的区域,特别是导带底和价带顶附近,边界态的自旋和局域分布都开始发生混合,边界态特征消失,说明库仑作用 U 破坏了原有边界态特点,因此我们认为该系统的边界带不能穿越费米能.

紧接着我们来看图 2(c)和 3(c1~c4),含自旋轨道耦合和塞曼作用项,而不含在位库仑相互作用时,系统的能带结构图 2(c)与盛利等人的研究结果一致^[30-31],盛利等人已对该系统的能带结构做过大量研究. 能带是对称的,有两个费米波矢 $k=0.48985$ 和 0.51015 ,能隙非常小为 0.4 meV,是图 2(a)中能隙的千分之一. 在费米波矢处,边界能带色散关系是线性的. 根据图 3(c1~c4),费米能附近的 4 个边界带 7~10 的空间几率分布,我们认为可以根据自旋不同分成两个子能带系:分别局域在 1 和 8 格点的 7 带和 9 带自旋向下,相交在费米能下面的 -20 meV 处,而自旋向上的 8 带和 10 带相交于费米能上面的 20 meV 处. 在 0.5 波矢处,能量位于 20 meV 的两个自旋向上的边界态电子 100%地位于相反的两个边界格点上,且群速

度大小相等,但是方向相反,这将导致在该能量处,自旋向上的两个边界态电子输运贡献总和为零,即没有自旋向上电子输运,系统的总电导几乎少一个单位的 e^2/h ,边界态区域的波矢范围为 $k \in [0.404, 0.596]$.

但是我们也发现根据局域边界格点不同,而分成两个相对于 0.5 波矢对称的子边界能带系:自旋相反的 7 带和 10 带上的边界态电子主要分布在边界格点 1 上;而自旋相反的 8 带和 9 带上的边界态电子主要分布在相反边界格点 8 上. 进一步,局域在同一边界格点的两个自旋相反的边界带在费米波矢处因强烈的库仑排斥,而发生自旋混合,自旋简并破坏,而打开 1 个很小的能隙,这个自旋混合态出现的波矢区域很窄,很快恢复为纯自旋态. 见图 3(c1~c4) 所示,电子几率在费米波矢处发生部分反转后很快恢复,因此,虽有能隙,我们认为该系统的 4 个边界带仍然是穿过费米能的能带.

我们在图 2(c) 的研究基础上,加入自洽在位库仑相互作用 U 项, SO 各参数同前所述,其中 $U=4$ eV, $g=0.02$ eV, 能带结构和各边界带对应电子态上电子的空间分布见图 2(d) 和 3(d1~d4). 与图 2(c) 比较,图 2(d) 能带结构中的费米能在零以下,而且随 k 增大,能带的自旋劈裂程度增加,在 $k=0.5$ 处达到最大,然后随 k 增加又逐渐减小,在费米波矢 $k=0.4348$ 和 0.5652 处能量随波矢的变化不再是清晰的线性关系,在费米波矢处能隙为 $\Delta E \approx 5.4$ meV, 比图 2(c) 中的能隙大 10 倍. 比较图 3(d1~d4) 与图 3(c1~c4), 两种情况下的边界态电子空间分布变化不大,只是自旋混合态所对应的费米波矢更远离 0.5. 两个子能带系中,有一组自旋相反的两个边界带 7 和 10 的电子主要分布在边界格点 8 上,而另一组 8 和 9 带电子主要分布在相反的边界处. 在费米波矢处,出现电子自旋方向反转的现象,在同一边界格点处两个自旋相反的边界态出现混合,打开了能隙,但是混合程度和变化速度都减弱. 我们认为能带虽有能隙,但是这些边界带仍然穿越了费米能,该系统仍然具有较高的电迁移率. $k \in [0.396, 0.604]$ 都属于边界态. 量子电导的计算结果显示,在 0.5 波矢处,能量位于 0.15 meV 的两个自旋向上的边界态电子 100% 地位于相反的两个边界格点上,且群速度大小相等,但是方向相反,这将导致在该能量处,自旋向上的两个边界态电子输运贡献总和为零,即没有自旋向上电子输运,系统的总电导几乎少 1 个单位的 e^2/h ,而且沿两个边界相反方向传导的电子会产生磁矩,同样在 -0.17 eV 处,沿两个边界相反方向传导的自旋向下电子输运相消,而且产生相反方向的磁矩^[49].

最后,我们加大塞曼作用项的强度,能带中不同自旋方向的能带线性地朝能量的不同方向移动,自旋向上/向下的能带向上/向下移动,取 $g=5$ eV,使得 4 个边界带远离费米能,而且自旋向上/向下的边界带高于/低于相反自旋的能带,边界态处于无其他本征体态区域,见图 2(e) 中的能带图,且没有了原导带与价带在费米能处的自旋简并,也就没有了自旋混合的边界态,见图 3(e1~e4). 虽然增加塞曼作用强度能获得更大范围的纯自旋边界态,但是实际应用中塞曼效应很难达到这样的强度.

根据以上研究的能带结构,我们注意到边界能带在倒格子空间的周期边界处的连续性特点与体能带不同. 图 2(c)~(e) 中每个边界带在一维 k 空间周期的两个边界处,能量一正一负,因此,在边界处每个边界带并不能按周期连续重合. 为了说明这点,也为了搞清楚边界带在 k 空间的周期特征,我们特意绘制了两个周期 $k \in [0, 2]$ 的边界能带结构,见图 4 所示. 因能带结构在 k 空间具有周期性特征,在 $k=1.0$ 处能量本征值的连续性,自旋向下的 7 带与 9 带的本征能量相等,自旋向上的 8 带与 10 带的本征能量相等. 显然在周期边界处,自旋向下的 7 带与 9 带互换,而自旋向上的 8 带与 10 带互换.

如果我们从前面能带结构分析来看,能带由两个子能带系构成:局域在边界格点 1 上的 7 带和 10 带,局域在另一边界格点 8 上的 8 带和 9 带. 显然,在 k 空间周期边界处,两个局域在不同边界的子能带系之间发生交换. 以 7 带转换 9 带为例,将 7 带在边界 $k=1.0$ 处的电子空间分布,与 9 带在 $k=0.0$ 处的电子空间分布比较,整个电子在各格点的占据几率都转换为相反边界格点对应的边界态上. 由图 4 所示,在 $k=1.0$ 处,空间分布转换突然发生,这种空间转换类似于数学中莫比乌斯带 (Möbius)^[50], 将一个带的首尾两头反转 180° 粘接. 但是能量连续变化,即随 k 的增加,自旋方向不变的情况下,电子可以不需要任何能量从一个边界转换到另一边界上.

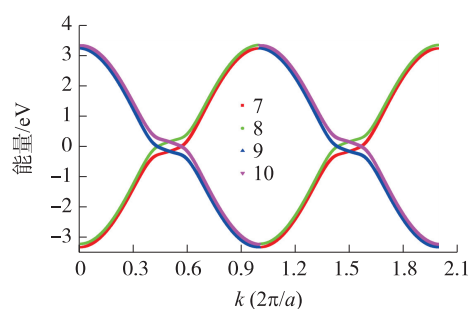


图 4 在两倍周期 k 空间,图 2(d) 的 4 个边界带的色散曲线
Fig. 4 k space having two periodic lengths, with the structure of four edge bands in Figure 2(d)

3 总结

上述各种哈密顿系统下的能带结构和边界态的空间电子分布的计算结果和讨论说明,在只有动能项的基础上,虽增加 1 个很小的自旋轨道耦合相互作用项或者在位库仑相互作用项,边界态的能带结构和空间分布都会发生巨大变化,同时所对应的量子霍尔效应也不同. 特别是在描述 SO 自旋轨道耦合的紧束缚 Kane-Mele 模型基础上,再引入自洽在位库仑相互作用项和塞曼效应作用项,自洽在位库仑相互作用破坏了原来由 SO 自旋轨道耦合产生的穿过费米能的边界带^[31],打开较大的能隙^[51],而塞曼效应的加入却重新恢复了边界带穿过费米能的特性,显示外加磁场引起的塞曼效应作用在保护边界带穿过费米能的性质上有着非常重要的作用. 对该系统的 4 个边界能带进行分析,我们认为 4 个边界带是由两个分别位于不同边界的边界子能带系构成,每个子能带系由自旋相反的两个边界带组成. 每组边界子能带系在各自的费米波矢处自旋状态混合,打破自旋简并,出现 1 个很小的能隙. 边界态上电子空间分布随 k 变化的分析结果揭示此微小能隙并不能改变边界带穿过费米能. 最后,在 k 空间周期边界处,两个子能带系中具有相同自旋方向的子能带相互转换,其电子的空间分布也相应地转变到相反的边界格点上,即随 k 增加而流动的电子自旋方向是不变的,不需要任何能量,从一个边界态的空间分布转换到另一边界态的空间分布.

在仅考虑直接跃迁的光学偶极跃迁研究中,对于两个子能带系,子能带系内的 7 带和 10 带间的电子激发而产生的电子-空穴激发对会形成自旋单重的电子激发对态,即电子和空穴的自旋方向向下,而且都位于同一个边界格点 1,因此这种激子尺寸小,束缚能大,这与文献报道是一致的^[52]. 而从另一个子能带系内的 8 带和 9 带间激发的激子也是自旋向上单重激子态,却局域在相反的边界处. 这两个子能带系内激发的自旋相反的单重激子态是自旋简并的,分别处在不同的边界上,两个自旋简并激子态间的干涉会减弱. 因此,在激子其主要作用的光学激发材料中,特别是低维的石墨烯类材料中的光致能量输运研究中,显然这种激子的边界局域分布会提高光致激发的激子能量输运效率.

[参考文献]

- [1] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. *Science*, 2004, 306: 666–669.
- [2] TOMBROS N, JOZSA C, POPINCIUC M, et al. Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature[J]. *Nature*, 2007, 448: 571–574.
- [3] WILLIAMS J R, DICARLO L, MARCUS C M. Quantum Hall effect in a gate-controlled p–n junction of graphene[J]. *Science*, 2007, 317: 638–641.
- [4] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene[J]. *Nature*, 2005, 438: 197–200.
- [5] PUREWAL M S, ZHANG Y, KIM P. Unusual transport properties in carbon based nanoscaled materials: nanotubes and graphene[J]. *Physica status solidi*, 2006, 243(13): 3 418–3 422.
- [6] NETO A H C. The electronic properties of graphene[J]. *Vacuum*, 2008, 83(10): 1 248–1 252.
- [7] NAKADA K, FUJITA M, DRESSELHAUS G, et al. Edge state in graphene ribbons: nanometer size effect and edge shape dependence[J]. *Phys Rev B*, 1996, 54(24): 17 954–17 961.
- [8] SON Y W, COHEN M L, LOUIE S G. Erratum: energy gaps in graphene nanoribbons[J]. *Phys Rev Lett*, 2006, 97, 216 803–216 806.
- [9] PERES N M R, NETO A H C, GUINEA F. Erratum: Conductance quantization in mesoscopic graphene[J]. *Phys Rev B*, 2006, 73(23): 1 469–1 475.
- [10] GUO G P, LIN Z R, TU T, et al. Quantum computation with graphene nanoribbon[J]. *New journal of physics*, 2008, 11(12): 2 910–2 915.
- [11] BERAHMAN M, SHEIKHI M H. Transport properties of zigzag graphene nanoribbon decorated with copper clusters[J]. *Journal of applied physics*, 2014, 116: 093701–1–093701–8.
- [12] LIBISCH F, ROTTER S, BURGDÖRFER J. Coherent transport through graphene nanoribbons in the presence of edge disorder[J]. *New journal of physics*, 2012, 14(12): 1 367–2 630.

- [13] PI S T, DOU K P, TANG C S, et al. Site-dependent doping effects on quantum transport in zigzag graphene nanoribbons[J]. Carbon, 2015, 94: 196–201.
- [14] EZAWA M. Peculiar width dependence of the electronic property of carbon nanoribbons[J]. Physics, 2006, 73(4): 5 432–5 440.
- [15] FUJITA M, WAKABAYASHI K, NAKADA K, et al. Peculiar localized state at zigzag graphite edge[J]. Journal of the physical society of Japan, 2013, 65: 1 920–1 923.
- [16] NAKADA K, FUJITA M, DRESSELHAUS G, et al. Edge state in graphene ribbons: nanometer size effect and edge shape dependence[J]. Phys Rev B, 1997, 54(24): 17 954–17 961.
- [17] YANG L, COHEN M L, LOUIE S G. Magnetic edge-state excitons in zigzag graphene nanoribbons[J]. Phys Rev Lett, 2008, 101(18): 186 401–186 404.
- [18] WAKABAYASHI K. 12-electronic and magnetic properties of nanographites[J]. Phys Rev B, 1999, 59(12): 279–304.
- [19] YAO W, YANG S A, NIU Q. Edge states in graphene: from gapped flat-band to gapless chiral modes[J]. Phys Rev Lett, 2009, 102: 096801–096804.
- [20] SON Y W, COHEN M L, LOUIE S G. Half-metallic graphene nanoribbons[J]. Nature, 2006, 444: 347–349.
- [21] GUO J, GUNLYCKE D, WHITE C T. Field effect on spin-polarized transport in graphene nanoribbons[J]. Applied physics letters, 2008, 92(16): 163 109–163 111.
- [22] GUNLYCKE D, ARESHKIN D A, LI J, et al. Graphene nanostrip digital memory device[J]. Nano letters, 2008, 7(12): 3 608–3 611.
- [23] BARINGHAUS J, MING R, EDLER F, et al. Exceptional ballistic transport in epitaxial graphene nanoribbons[J]. Nature, 2014, 506: 349–354.
- [24] BARINGHAUS J, SETTNER M, APROJANZ J, et al. Electron interference in ballistic graphene nanoconstrictions[J]. Phys Rev Lett, 2016, 116(18): 186 602–186 606.
- [25] DRESSELHAUS G F, DRESSELHAUS M S. Spin-orbit interaction in graphite[J]. Phys Rev, 1965, 140(A401): 433–440.
- [26] BYCHKOV Y A, RASHBA E I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers[J]. Journal of physics C solid state physics, 1984, 17(33): 6 039–6 045.
- [27] YAO Y, YE F, QI X L, et al. Spin-orbit gap of graphene: first-principles calculations[J]. Phys Rev B, 2007, 75(4): 041401–041404.
- [28] KANE C L, MELE E J. Quantum spin Hall effect in graphene[J]. Phys Rev Lett, 2005, 95(22): 226 801–226 804.
- [29] KANE C L, MELE E J. Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect[J]. Phys Rev Lett, 2005, 95(14): 6 802–6 805.
- [30] LI H, SHENG L, XING D Y. Connection of edge states to bulk topological invariance in a quantum spin Hall state[J]. Phys Rev Lett, 2012, 108(19): 196 806–196 810.
- [31] 盛利. 自旋陈数理论和时间反演对称破缺的量子自旋霍尔效应[J]. 物理学进展, 2014(1): 10–27.
- [32] EZAWA M. Valley-polarized metals and quantum anomalous Hall effect in silicene[J]. Phys Rev Lett, 2012, 109(5): 515–565.
- [33] EZAWA M. Quantized conductance and field-effect topological quantum transistor in silicene nanoribbons[J]. Applied physics letters, 2013, 102(17): 172 103–172 107.
- [34] KIKUTAKE K, EZAWA M, NAGAOSA N. Edge states in silicene nanodisks[J]. Phys Rev B, 2013, 88: 4 629–4 638.
- [35] BARINGHAUS J, MING R, EDLER F, et al. Exceptional ballistic transport in epitaxial graphene nanoribbons[J]. Nature, 2014, 506(7488): 349–354.
- [36] BARINGHAUS J, SETTNER M, APROJANZ J, et al. Electron interference in ballistic graphene nanoconstrictions[J]. Phys Rev Lett, 2016, 116(18): 186 602–186 606.
- [37] DROTH M, BURKARD G. Electron spin relaxation in graphene nanoribbon quantum dots[J]. Phys Rev B, 2013, 87(20): 205 432–205 442.
- [38] HUERTAS H D, GUINEA F, BRATAAS A. Spin-orbit coupling in curved graphene, fullerenes, nanotubes, and nanotube caps[J]. Phys Rev B, 2006, 74(15): 2 952–2 961.
- [39] WANG Z, HAO N, ZHANG P. Topological winding properties of spin edge states in Kane-Mele graphene model[J]. Phys Rev B, 2009, 80(11): 754–758.
- [40] QIAO Z, TSE W K, JIANG H, et al. Two-dimensional topological insulator state and topological phase transition in bilayer

- graphene[J]. Phys Rev Lett,2011,107(25):1-9.
- [41] HU J,ALICEA J,WU R,et al. Giant topological insulator gap in graphene with 5d adatoms[J]. Phys Rev Lett,2012,109(26):266 801-266 805.
- [42] CASTRO NETO A H, GUINEA F. Impurity-induced spin-orbit coupling in graphene.[J]. Phys Rev Lett,2009,103(2):026804-026807.
- [43] WANG H,PI S T,KIM J,et al. Possibility of realizing quantum spin Hall effect at room temperature in stanene/ $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ [J]. Phys Rev B,2016,94(3):035112-035126.
- [44] MA Y,DAI Y,NIU C,et al. Halogenated two-dimensional germanium;candidate materials for being of quantum spin Hall state[J]. Journal of materials chemistry,2012,22(25):12 587-12 591.
- [45] WANG Y,SHENG Y,YANG A,et al. Edge states in graphene:from gapped flat-band to gapless chiral modes[J]. Phys Rev Lett,2008,102(102):096801-096804.
- [46] FUJITA M,NAKADA K,WAKABAYASHI K,et al. Peculiar electronic state on graphite edge;finite size effect on graphite[C]// Meeting of the Physical Society of Japan. The Physical Society of Japan. Japan,1996.
- [47] HUBBARD J. Electron correlations in narrow energy bands[J]. Proc R Soc London A,1963,276:238-257.
- [48] 王雪梅,刘红. 锯齿型石墨烯纳米带的能带研究[J]. 物理学报,2011,60(4):047102-047112.
- [49] LIU H,HU B,LIU N. The opposite induced magnetic moment in narrow zigzag graphene nanoribbons[J]. Phys Lett A,2016,380(44):3 738-3 742.
- [50] STAROSTIN E L,GH V D H. The shape of a Möbius strip[J]. Nature material,2007,6(8):563-567.
- [51] LU Y,ZHAO S,ZHANG Y,et al. Valley-polarized insulating states in zigzag silicene nanoribbons[J]. Materials research express,2014,1(4):045009-045019.
- [52] LU Y,LU W,LIANG W,et al. Energy splitting and optical activation of triplet excitons in zigzag-edged graphene nanoribbons[J]. Phys Rev B,2013,88(16):608-613.

[责任编辑:顾晓天]

(上接第 41 页)

- [24] ZHOU Y,WANG J,SUN X,et al. Transducer selection and application in magnetoacoustic tomography with magnetic induction[J]. Journal of applied physics,2016,119(9):094903.
- [25] TAKEGAMI K,KANEKO Y,WATANABE T,et al. Polyacrylamide gel containing egg white as new model for irradiation experiments using focused ultrasound[J]. Ultrasound in medicine and biology,2004,30(10):1 419-1 422.
- [26] WANG J,ZHOU Y,SUN X,et al. Acoustic source analysis of magnetoacoustic tomography with magnetic induction for conductivity gradual-varying tissues[J]. IEEE transactions on biomedical engineering,2016,63(4):758-764.

[责任编辑:顾晓天]