物理学报 Acta Physica Sinica



磁性硅烯超晶格中电场调制的谷极化和自旋极化

侯海燕 姚慧 李志坚 聂一行

Valley and spin polarization manipulated by electric field in magnetic silicene superlattice

Hou Hai-Yan Yao Hui Li Zhi-Jian Nie Yi-Hang

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 67, 086801 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180080 在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180080 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I8

您可能感兴趣的其他文章 Articles you may be interested in

多端口石墨烯系统中的非局域电阻

Nonlocal resistance in multi-terminal graphene system 物理学报.2017, 66(21): 217201 http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.217201

超晶格和层状结构传热特性的连续模型及其在能源材料设计中的应用

Continuum modeling of thermal transport in superlattices and layered materials for new energy matierlas 物理学报.2016, 65(11): 116802 http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.116802

自旋轨道耦合作用下石墨烯pn结的电子输运性质

Electronic transport properties of graphene pn junctions with spin-orbit coupling 物理学报.2015, 64(9): 097201 http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097201

栅极电势对强光场下石墨烯场效应管中电子隧穿的影响

The influence of gate voltage on electron transport in the graphene field-effect transistor under strong laser field

物理学报.2012, 61(17): 177202 http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.177202

锯齿型石墨纳米带叠层复合结的电子输运

Electronic transport in hybrid contact of doubly-stacked zigzag graphene nanoribbons 物理学报.2012, 61(7): 077201 http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.077201

磁性硅烯超晶格中电场调制的谷极化和自旋极化*

侯海燕¹⁾ 姚慧¹⁾ 李志坚¹⁾²⁾ 聂一行^{1)2)†}

1)(山西大学理论物理研究所,量子光学与光量子器件国家重点实验室,太原 030006)

2) (山西大学极端光学协同创新中心,太原 030006)

(2018年1月11日收到;2018年2月2日收到修改稿)

研究了基于硅烯的静电势超晶格、铁磁超晶格、反铁磁超晶格中谷极化、自旋极化以及赝自旋极化的输运 性质,分析了铁磁交换场、反铁磁交换场以及化学势对输运性质的影响,讨论了电场对谷极化、自旋极化以及 赝自旋极化的调控作用.结果表明:当3种超晶格的晶格数达到10以上时,在硅烯超晶格中很容易实现100% 的谷极化、自旋极化和赝自旋极化,而且通过调节超晶格上的外加电场可以使极化方向发生翻转,从而在硅烯 超晶格中实现外电场对谷自由度、自旋自由度以及赝自旋自由度的操控.

关键词: 硅烯超晶格, 电场调制, 谷极化, 自旋极化 **PACS:** 68.65.Cd, 72.80.Vp, 72.25.-b

DOI: 10.7498/aps.67.20180080

1引言

自实验室成功制备硅烯以来^[1,2],其理论和实验研究引起了人们极大的兴趣^[3,4].硅烯的晶体结构是由单层硅原子合成的二维蜂窝状,与石墨烯的六角蜂窝状结构十分类似,且硅与合成石墨烯的碳又为同主族元素,因此硅烯几乎具有石墨烯所有的物理性质和量子现象.但与石墨烯相比,硅烯的晶体结构为非共面的翘曲结构,这使得硅烯还具备许多优于石墨烯的物理性能.例如,硅烯具有较强的自旋轨道耦合能和外场可调的能隙^[5],在硅烯系统中通过外电场的调节可以实现能带绝缘体和拓扑绝缘体之间的拓扑相变^[6]及各种量子自旋霍尔效应^[7]等.另外,硅烯更容易与硅基半导体电子技术相结合^[8].

在二维六角晶格材料中,电子除了电荷和自旋 自由度外,还具有谷自由度^[9]和晶格赝自旋自由 度^[10].所谓谷就是能谷,即固体材料中能带结构的 极值点.在硅烯中,谷为六角布里渊区*K*和*K*′点 处两个不等价的狄拉克锥,与石墨烯中谷的定义类 似. 与电子的自旋自由度类似,也可以利用电子的 谷自由度作为信息载体,通过对谷自由度的调控进 行信息处理、设计相关的谷电子功能器件、实现量 子计算和量子通讯^[11,12]等. 对电子谷自由度的相 关研究称为谷电子学^[9,13]. 赝自旋实际上起源于二 维六角结构中的两种子晶格, 赝自旋的极化代表电 子在A子晶格中运动或B子晶格中运动^[14].

自超晶格的概念提出以来,其结构在控制二 维半导体中电流的输运性能方面表现得非常成 功^[15-19].目前,有关石墨烯超晶格的理论研究已 经非常成熟^[15],且实验室已经成功合成石墨烯超 晶格^[16].然而,鲜有关于硅烯超晶格中的电子、自 旋、谷和赝自旋的输运性质以及极化调控的理论和 实验研究^[17-19].最近,理论预言可以利用磁性超 晶格的相关参数调控热电输运性质,提高自旋依赖 和谷依赖的塞贝克系数^[20].文献[21]利用磁矢势 在硅烯上形成磁超晶格,研究了其中的自旋和谷输 运性质,以及自旋-谷退耦合机理.本文考虑一个磁 性硅烯超晶格系统,研究了交换场、化学势和外加 电场对谷极化、自旋极化以及赝自旋极化输运的影

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274208) 和山西省 "1331" 工程 (批准号: 201542030) 资助的课题.

© 2018 中国物理学会 Chinese Physical Society

[†]通信作者. E-mail: nieyh@sxu.edu.cn

响.结果表明,在超晶格中可以通过调控电场实现 谷极化、自旋极化以及赝自旋极化,只要超晶格中 的晶格数超过10,就可以实现完全极化,并且通过 改变电场的方向和大小实现极化翻转.

2 哈密顿量及计算

如图1所示,本文研究的模型是处于*x-y*平面的一个具有周期性磁场调制的二维硅烯超晶格,该模型可以看作由长度为L的磁性硅烯区域和长度为D的正常硅烯区域依次排列,最后连接两个半无限的正常硅烯电极. 假设硅烯超晶格有N个周期,则超晶格中共有N个磁性硅烯区域、(N-1)个正常硅烯区域和两个半无限的正常硅烯电极. 图1中 h₁和h₂为硅烯片上表面和下表面的磁性绝缘膜, E_Z为外电场.

硅烯超晶格中电子的低能有效哈密顿量可以 表示为^[5,7,22-24]

 $H_{\eta\sigma} = \hbar v_{\rm F} \left(k_x \boldsymbol{\tau}_x - \eta k_y \boldsymbol{\tau}_y \right) - \Delta_{\eta\sigma} \boldsymbol{\tau}_z - \mu_{\sigma}, \quad (1)$

式中 $\mu_{\sigma} = \mu + \delta_{\sigma}h_{\rm F}$ 为自旋依赖的化学势, μ 为 由门电压引起的化学势, $\delta_{\uparrow(\downarrow)} = \pm 1$ 对应于自 旋向上(向下); $k_x \, \pi k_y \, \beta$ 别为超晶格中电子的 动量波矢在x轴和y轴的分量; $\tau_x, \tau_y \, \eta \tau_z$ 为晶 格赝自旋空间中的泡利矩阵; \hbar 为普朗克常数; $v_{\rm F} \approx 5.5 \times 10^5$ m/s为狄拉克点附近电子的费米 速度; $\Delta_{\eta\sigma} = \eta \delta_{\sigma} \Delta_{\rm SO} - \Delta_Z + \delta_{\sigma} h_{\rm AF}$,其中 $\Delta_{\rm SO}$ 为 硅烯固有的自旋-轨道耦合能, $\Delta_Z = edE_Z$ 为垂 直于硅烯片的外电场在A和B子格之间诱导的电 势差,可通过外电场 E_Z 进行调控,2d为A和B子 格所在平面的垂直间隔距离; $\eta = \pm 1$ 对应于K谷 和K'谷; $h_{\rm F}/h_{\rm AF}$ 为超晶格中磁性区域的铁磁/反 铁磁交换场,其中磁性区域的磁交换场由位于硅 烯片上表面和下表面磁性绝缘膜的近邻效应所引 起^[25],而磁性区域的铁磁/反铁磁性由磁性绝缘 膜的磁化方向平行/反平行决定.在正常硅烯区 域, $\Delta_Z = h_F = h_{AF} = \mu = 0$;在铁磁区, $h_F \neq 0$, $h_{AF} = 0$;对于反铁磁情况, $h_F = 0$, $h_{AF} \neq 0$.

在正常区域和磁性区域哈密顿量的能量本征 值分别为:

$$E_{\rm N} = \pm \sqrt{\left(\hbar v_{\rm F} \boldsymbol{k}\right)^2 + \left(\Delta_{\rm N}\right)^2} \quad ({\rm E} \,\ddot{\rm R} \,{\rm E} \,{\rm i} \,{\rm j}), \quad (2a)$$
$$E_{\rm M} = \pm \sqrt{\left(\hbar v_{\rm F} \boldsymbol{k}'\right)^2 + \left(\Delta_{\rm M}\right)^2} + \mu_{\sigma} \quad ({\rm i} \,{\rm k} \,{\rm E} \,{\rm i} \,{\rm i} \,{\rm j}), \quad (2b)$$

式中 $\Delta_{\rm N} = \eta \delta_{\sigma} \Delta_{\rm SO}$ 为正常区的能隙, $\Delta_{\rm M} = \eta \delta_{\sigma} \Delta_{\rm SO} - \Delta_Z + \delta_{\sigma} h_{\rm AF}$ 为磁性区的能隙,二者都 依赖于自旋和谷.如果类比于相对论性的质量, $\Delta_{\rm M}$ 等价于硅烯超晶格中电子在磁性区的自旋和谷 依赖的狄拉克质量^[24],而且此质量可以通过电场 和交换场调控. $k \, n \, k' \,$ 分别为正常区域和磁性区域 的动量波矢.设定 x 轴垂直于分界面且电子沿 x 轴 方向运动,在 y 轴方向上电子的动量保持不变.当 左侧电极注入能量为 E、谷和自旋分别为 $\eta \, n \sigma$ 的 电子时,电子经中间区域透射到右侧电极,根据狄 拉克方程 $H_{\eta\sigma} \Psi = E \Psi$,可以得到左侧电极、中间磁 性区域、中间正常区域和右侧电极中电子的波函数 的矩阵形式分别为:

$$\boldsymbol{\Psi}_{\mathrm{L}} = \boldsymbol{A}_{\mathrm{W}} \boldsymbol{B}_{\mathrm{W}}(x) \begin{pmatrix} 1 \\ r_{\eta\sigma} \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{y}y} \quad (\underline{\Sigma} \boldsymbol{\emptyset} = \boldsymbol{W}, \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\Psi}_{\mathrm{M}} = \boldsymbol{A}_{\mathrm{M}} \boldsymbol{B}_{\mathrm{M}}(x) \begin{pmatrix} a_{\eta\sigma} \\ b_{\eta\sigma} \end{pmatrix} e^{\mathrm{i}k_{y}y} \quad (\mathbf{p} \, \mathbf{m} \, \mathbf{a} \, \mathbf{t} \, \mathbf{X} \, \mathbf{x}),$$

$$(4)$$

$$\boldsymbol{\Psi}_{\mathrm{N}} = \boldsymbol{A}_{\mathrm{W}} \boldsymbol{B}_{\mathrm{W}}(x) \begin{pmatrix} c_{\eta\sigma} \\ d_{\eta\sigma} \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{y}y} \quad (中间正常区域),$$
(5)

$$\boldsymbol{\varPsi}_{\mathrm{R}} = \boldsymbol{A}_{\mathrm{W}}\boldsymbol{B}_{\mathrm{W}}(x) \begin{pmatrix} t_{\eta\sigma} \\ 0 \end{pmatrix} e^{\mathrm{i}k_{y}y} \quad (\boldsymbol{\Xi} \boldsymbol{\emptyset} = \boldsymbol{W} \boldsymbol{\emptyset}). \quad (6)$$



图1 磁性硅烯超晶格的示意图

Fig. 1. Schematic diagram of a magnetic silicene superlattice.

086801-2

 $\langle \mathbf{o} \rangle$

其中

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{\pm} &= k_x \pm \mathrm{i}\eta k_y, \quad \mathbf{k}'_{\pm} = k'_x \pm \mathrm{i}\eta k_y, \\ k_x &= \sqrt{E^2 - (\Delta_{\mathrm{N}})^2 \cos\theta/\hbar v_{\mathrm{F}}}, \\ k'_x &= \sqrt{(E + \mu_{\sigma})^2 - (\Delta_{\mathrm{M}})^2 - (\hbar v_{\mathrm{F}} k_y)^2}/\hbar v_{\mathrm{F}}, \end{aligned}$$

 $r_{\eta\sigma}$ 和 $t_{\eta\sigma}$ 分别为反射系数和透射系数.

波函数在分界面处的连续性给出

$$\begin{pmatrix} t_{\eta\sigma} \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{B}_{\mathrm{W}}(L+D)^{-N} \left[\boldsymbol{B}_{\mathrm{W}}(L+D)\boldsymbol{U} \right]^{N} \begin{pmatrix} 1 \\ r_{\eta\sigma} \end{pmatrix},$$
(7)

其中 $U = B_W(L)^{-1}A_W^{-1}A_MB_M(L)A_M^{-1}A_W$,谷自 由度为 η 、自旋为 σ 的电子透射率 $T_{\eta\sigma} = |t_{\eta\sigma}|^2$.

根据 Landauer-Buttier 公式并考虑各种可能的入射方向,谷自由度为 η 、自旋为 σ 的电子在零温下的输运电导 $G_{\eta\sigma}$ 可以表示为:

$$G_{\eta\sigma} = G_0 g_{\eta\sigma},\tag{8}$$

$$g_{\eta\sigma} = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T_{\eta\sigma} \cos\theta \mathrm{d}\theta, \qquad (9)$$

式中 θ 为电子的入射方向与x轴之间的夹角; $G_0 = \frac{e^2 W \mathbf{k}_{\rm F}}{\pi^2 \hbar}$ 为单位电导, $g_{\eta\sigma}$ 为无量纲的电导, W为硅烯片的宽度, $\mathbf{k}_{\rm F}$ 为费米波矢.利用(9)式, 可以定义谷电导 $g_{K(K')} = \frac{g_{+(-)\uparrow} + g_{+(-)\downarrow}}{2}$ 和自旋 依赖的电导 $g_{\uparrow(\downarrow)} = \frac{g_{+\uparrow(\downarrow)} + g_{-\uparrow(\downarrow)}}{2}$,于是谷极化率 $P_{\rm V}$ 和自旋极化率 $P_{\rm S}$ 分别定义为:

$$P_{\rm V} = \frac{g_K - g_{K'}}{q_K + q_{K'}},\tag{10}$$

$$P_{\rm S} = \frac{g_{\uparrow} - g_{\downarrow}}{g_{\uparrow} + g_{\downarrow}}.\tag{11}$$

赝自旋 $\frac{\hbar}{2}$ τ 在 *E* → Δ_{SO} 的条件下是极化的^[14], 即 $\left\langle \frac{\hbar}{2} \tau \right\rangle$ → -ηδ_σ $\frac{\hbar}{2} \hat{e}_z$, τ 为赝自旋空间中的泡利算 符.于是可以将 *g*_↑ = *g*_{+↓} + *g*_{−↑}称为赝自旋↑的电 导 (电子在 A 子晶格中的电导), *g*_↓ = *g*_{+↑} + *g*_{−↓}称 为赝自旋↓的电导 (电子在 B 子晶格中的电导), 赝 自旋极化率可以定义为

$$P_{\rm PS} = \frac{g_{\uparrow\uparrow} - g_{\downarrow}}{g_{\uparrow\uparrow} + g_{\downarrow}}.$$
 (12)

借助于(12)式可以描述赝自旋极化的量子输运.

3 数值结果与分析

3.1 静电势超晶格

首先考虑硅烯超晶格中 $h_{\rm F} = h_{\rm AF} = 0$ 的情况,只有电场 E_Z 存在,即超晶格是由垂直于晶格平面的N个电场区和N-1个无场区组成. 硅烯中的自旋轨道耦合能^[3,6] $\Delta_{\rm SO} = 3.9$ meV,设L = D = 50 nm. 当 $h_{\rm F} = h_{\rm AF} = 0$ 时,不存在自旋极化和谷极化的情况. 但是,如果电子入射能量取为E = 4 meV,由于 $E \rightarrow \Delta_{\rm SO}$,晶格赝自旋是极化的. 图2给出了对于几种不同的晶格数,赝自旋极化的电导和赝自旋极化率对电势差 Δ_Z 的依赖. 在图2(a)中赝自旋极化的电导劈裂成两个峰,这是由于对于给定的 Δ_Z ,A和B两个子晶格中的电子感受的静电势不同,于是当电子隧穿超晶格时,共振隧穿发生在不同的 Δ_Z (势能)处. 共振峰的位置由 $d_{g_{\eta\sigma}}/d\Delta_Z = 0$ 决定,即

$$\Delta_Z = -\eta \delta_\sigma \mu + \eta \delta_\sigma (E - \Delta_{\rm SO}) \sim -\eta \delta_\sigma \mu, \quad (13)$$

对于赝自旋 $\uparrow(\downarrow)$, 赝自旋极化的电导峰位于 $\Delta_Z \sim \mu(-\mu)$ 附近,两个峰关于 $\Delta_Z = 0$ 是对称 的, 赝自旋极化的电导峰劈裂宽度为2 μ . 随着晶格 数增加 (N = 1, N = 2, N = 5, N = 10), 类似于多 光束干涉, 赝自旋极化的电导峰变得越来越尖锐, 使赝自旋极化的电导 g_{\uparrow} 和 g_{\downarrow} 的峰完全分开. 硅烯 超晶格的这种透射性质可以用于赝自旋选择器, 通 过调节外电场 E_Z 选择透射出来的赝自旋. 赝自旋 极化率 P_{PS} 随电势差 Δ_Z 的变化如图 2 (b) 所示, 超 晶格的输运特性使得赝自旋极化在零场处发生翻 转,晶格数越多翻转越明显,而且在零场两侧附近 很宽的范围内赝自旋是完全极化的.



图 2 (a) 赝自旋极化电导 g_{\uparrow} (实线) 和 g_{\downarrow} (虚线) 随电势差 Δ_Z 的变化关系; (b) 赝自旋极化率 $P_{\rm PS}$ 随电势差 Δ_Z 的变化关系. 参数选取 $\Delta_{\rm SO}/E = 0.975$, L/l = 0.53, $\mu/E = 1.8$, $h_{\rm F}/E = h_{\rm AF}/E = 0$ Fig. 2. (a) Pseudospin polarized conductance g_{\uparrow} (solid line) and g_{\downarrow} (dashed line); (b) pseudospin polarization $P_{\rm PS}$ as a function of the on-site potential difference Δ_Z . Parameters are $\Delta_{\rm SO}/E = 0.975$, L/l = 0.53, $\mu/E = 1.8$, $h_{\rm F}/E = h_{\rm AF}/E = 0$.

3.2 铁磁硅烯超晶格

对于铁磁硅烯超晶格, 即 $h_{\rm F} \neq 0$, $h_{\rm AF} = 0$. 磁场的存在不仅可使自旋依赖的电导峰劈裂,也可以使谷电导劈裂. 图3给出了 $h_{\rm F}/E = 1.25$, $h_{\rm AF}/E = 0$, $\mu/E = 0$ 时,谷电导以及谷极化率随 电势差 Δ_Z 的变化(此时不存在自旋极化和赝自旋 极化).谷电导是由自旋向上和自旋向下的电子电 导组成的,于是磁场的存在也可以使谷电导劈裂, 如图3(a)所示.此时谷电导峰的位置由

 $\Delta_{Z} = -\eta h_{\rm F} + \eta \delta_{\sigma} (E - \Delta_{\rm SO}) \sim -\eta h_{\rm F}$ (14) 决定. 谷电导峰关于 $\Delta_{Z} = 0$ 也是对称的, 劈裂的 宽度为 $2h_{\rm F}$, 而且随着晶格数增加, 谷电导峰变得 越来越尖锐, 谷电导 $g_K \ n g_{K'}$ 的峰完全分开. 这种透射性质可以用于选择电子的谷自由度, 即基于磁性硅烯超晶格通过调节外电场 E_Z 选择透射出来的电子的谷自由度. 谷极化率 P_V 随电势差 Δ_Z 的变化如图 3 (b) 所示, 随着晶格数增加, 谷极化率接近100%, 这是由于超晶格增强了谷电导的共振透射特性. 从图 3 (a) 可以发现, 随着晶格数增加, g_K 和 $g_{K'}$ 的峰重叠范围越来越小, 当晶格数达到10时, $g_K \ n g_{K'}$ 的峰在 $\Delta_Z = 0$ 附近已经完全分开, 不再重叠. 因此在零场两侧谷自由度完全极化, 即在零场两侧谷极化率 $P_V = \pm 1$. 如果用谷自由度存储信息, 这种谷极化率随着外场电场反向而翻转的特性非常有利于信息的存储与读取.



图 3 (a) 谷电导 g_K (实线) 和 $g_{K'}$ (虚线) 随电势差 Δ_Z 的变化; (b) 谷极化率 P_V 随电势差 Δ_Z 的变化; 参数 $\mu/E = 0$, $h_F/E = 1.25$, $h_{AF}/E = 0$, 其他参数与图 2 中的相同

Fig. 3. (a) Valley conductance g_K (solid line) and $g_{K'}$ (dashed line); (b) valley polarization P_V as a function of the on-site potential difference Δ_Z . Parameters are $\mu/E = 0$, $h_F/E = 1.25$, $h_{AF}/E = 0$, other parameters are the same as in Fig.2.

谷电导实际上来自同一谷中不同自旋电子的 贡献. 当磁性超晶格中磁场和化学势同时存在时, 即 $h_{\rm F} \neq 0, \mu \neq 0$ 时,电导 $g_{\eta\sigma}$ 的峰位于

$$\Delta_Z = -\eta h_{\rm F} - \eta \delta_\sigma \mu + \eta \delta_\sigma \left(E - \Delta_{\rm SO} \right)$$

$$\sim -\eta h_{\rm F} - \eta \delta_\sigma \mu, \qquad (15)$$

可见电导峰的位置不仅是谷依赖的,而且是自旋 依赖的.因此,不仅谷电导 g_K 与 $g_{K'}$ 分裂开,而且 同一谷中的电导也会劈裂为两个峰. g_K 的两个峰 位于 $\Delta_Z \sim -h_F - \mu$ (K谷中自旋↑的电子的贡献) 和 $\Delta_Z \sim -h_F + \mu$ (K谷中自旋↓的电子的贡献); $g_{K'}$ 的两个峰位于 $\Delta_Z \sim h_F + \mu$ (K'谷中自旋↑的 电子的贡献)和 $\Delta_Z \sim h_F - \mu$ (K'谷中自旋↓的电 子的贡献). 图 4 给出了 $h_{\rm F}/E = 1.25$, $h_{\rm AF}/E = 0$, $\mu/E = 2.5$ 时,谷电导和自旋依赖的电导随电势 差 Δ_Z 的变化. 在图 4 (a)中,实线和虚线分别代表 $K \pi K'$ 谷电导,每一类谷电导中包含相距 2 μ 的 两个峰. 随着晶格数的增加,这些电导峰变得越 来越尖锐. 图 4 (b)为谷极化率 P_V 随电势差 Δ_Z 的 变化,随着晶格数的增加,谷极化增强,当晶格数 达到 10 时,谷极化率可以达到 100%. 由于 $\mu \neq 0$, 谷电导劈裂为双峰结构,而且只要 $\mu \neq h_{\rm F}$,两种 谷电导峰就不会重合,结果当 Δ_Z 从负到正逐渐 增加时,谷极化率发生 3次翻转,其极化的顺序为 $K \to K' \to K \to K'$.



图4 (a) 谷电导 $g_K($ 实线) 和 $g_{K'}$ (虛线) 和 (c) 自旋依赖电导 g_{\uparrow} (实线) 和 g_{\downarrow} (虛线) 随电势差 Δ_Z 的变化; (b) 谷极化率 P_V 和 (d) 自旋极化率 P_S 随电势差 Δ_Z 的变化; $\delta_X \mu/E = 2.5$, $h_F/E = 1.25$, $h_{AF}/E = 0$, 其他参数与图 2 中的相同 Fig. 4. (a) Valley conductance g_K (solid line) and $g_{K'}$ (dashed line) and (c) spin resolved conductance g_{\uparrow} (solid line) and g_{\downarrow} (dashed line) as a function of the on-site potential difference Δ_Z ; (b) Valley polarization P_V and (d) spin polarization P_S as a function of the on-site potential difference Δ_Z . Parameters are $\mu/E = 2.5$, $h_F/E = 1.25$, $h_{AF}/E = 0$, other parameters are the same as in Fig. 2.

自旋依赖的电导来自不同谷中自旋相同电子 的贡献. 从 (15) 式可以发现,自旋依赖的电导也 有两个峰,而且关于零场对称, g_{\uparrow} 的两个峰位于 $\Delta_Z \sim -h_F - \mu$ (K谷中自旋↑的电子的贡献)和 $\Delta_Z \sim h_{\rm F} + \mu (K'谷中自旋↑的电子的贡献); g_↓$ 的两个峰位于 $\Delta_Z \sim -h_{\rm F} + \mu (K谷中自旋↓ 的$ $电子的贡献)和<math>\Delta_Z \sim h_{\rm F} - \mu (K'谷中自旋↓的电$ 子的贡献). 图4(c)中, 实线和虚线分别代表自旋 ↑和↓的电导. 自旋↑的两个自旋依赖电导峰间距 为2 $|h_F + \mu|$, 自旋↓的两个自旋依赖电导峰间距 为2 $|\mu - h_F|$, 而且它们关于 $\Delta_Z = 0$ 都是对称的. 图4(d)是自旋极化率随电势差 Δ_Z 的变化, 对于10 个周期的铁磁硅烯超晶格, 很容易达到100%的自 旋极化, 随着 Δ_Z 从负到正的逐渐增加, 自旋极化 率发生4次翻转, 其极化的顺序为↑→↓→↑→↓→↑.

3.3 反铁磁硅烯超晶格

当磁性区的两个磁场方向相反时,即 $h_{\rm F} = 0$, $h_{\rm AF} \neq 0$,称为反铁磁硅烯超晶格.在这种情况下, K谷电导峰与K'谷电导峰重合,没有谷极化,但 输运电子的自旋是极化的.图5给出了 $h_{\rm F}/E = 0$, $h_{\rm AF}/E = 1.25$, $\mu/E = 0$ 时,自旋依赖的电导以及 自旋极化率随电势差 Δ_Z 的变化.自旋依赖的电导 只有一个峰,其位置由

$$\Delta_Z = \delta_\sigma h_{\rm AF} + \eta \delta_\sigma \left(E - \Delta_{\rm SO} \right) \sim \delta_\sigma h_{\rm AF} \quad (16)$$

决定, g_{\uparrow} 和 g_{\downarrow} 的峰距为 $2h_{AF}$, 如图 5 (a) 所示. 反铁 磁硅烯超晶格中自旋依赖电导峰的劈裂, 是由电子 在铁磁区的类狄拉克质量 Δ_{M} 中自旋依赖的 $\delta_{\sigma}h_{AF}$ 项引起的. 随着晶格数的增加, 自旋极化更加完美, 图 5 (b) 给出了自旋极化率随电势差 Δ_{Z} 的变化, 当 晶格数 N = 10 时, 零场两边 $P_{S} = \pm 1$.

当 $h_{AF} \neq 0, \mu \neq 0$ 时,反铁磁硅烯超晶格中可 以同时出现自旋极化和谷极化,而且自旋依赖的电 导和谷电导都劈裂为双峰结构,峰的位置由

$$\Delta_Z = \delta_\sigma h_{\rm AF} - \eta \delta_\sigma \mu + \eta \delta_\sigma \left(E - \Delta_{\rm SO} \right)$$

$$\sim \delta_{\sigma} h_{\rm AF} - \eta \delta_{\sigma} \mu$$
 (17)

決定. 图6给出了 $h_F/E = 0$, $h_{AF}/E = 1.25$, $\mu/E = 2.5$ 时, 自旋依赖的电导和谷电导以及自 旋极化率和谷极化率随电势差 Δ_Z 的变化. 图6 (a) 为自旋依赖的电导随电势差 Δ_Z 的变化, g_{\uparrow} 的两个 峰位于 $\Delta_Z \sim h_{AF} - \mu$ (K谷中自旋↑的电子的贡 献)和 $\Delta_Z \sim h_{AF} + \mu$ (K谷中自旋↑的电子的贡 献); g_{\downarrow} 的两个峰位于 $\Delta_Z \sim -h_{AF} + \mu$ (K谷中自旋 ↓的电子的贡献)和 $\Delta_Z \sim -h_{AF} - \mu$ (K谷中自旋 ↓的电子的贡献)和 $\Delta_Z \sim -h_{AF} - \mu$ (K谷中自旋 ↓的电子的贡献). 当晶格数达到10时, g_{\uparrow} 和 g_{\downarrow} 的 峰已经完全分开,因此当电势差 Δ_Z 从负到正逐渐 增加时,自旋极化率可以发生3次翻转,如图6 (b) 所示,自旋极化的顺序为↓→↑→↓→↑.

反铁磁硅烯超晶格中谷极化的情况与铁磁 硅烯超晶格中自旋极化类似,除了 $g_K ext{ } g_{K'} ext{ } 分裂$ 开,同一谷中的电导也会对称地分裂为两个峰. 如图6(c)所示, g_K 的两个峰位于 $\Delta_Z \sim h_{AF} - \mu$ (K谷中自旋↑的电子的贡献)和 $\Delta_Z \sim -h_{AF} + \mu$ (K谷中自旋↓的电子的贡献); $g_{K'}$ 的两个峰位于 $\Delta_Z \sim h_{AF} + \mu$ (K'谷中自旋↑的电子的贡献)和 $\Delta_Z \sim -h_{AF} - \mu$ (K'谷中自旋↓的电子的贡献).超 晶格的干涉特性可以使这些电导峰完全分开,从 而使谷极化率达到100%(见图6(d)).当电势差 Δ_Z 从负到正逐渐增加时,谷极化率经过两次翻转,其 极化的顺序为 $K' \to K \to K'$,与铁磁半导体超晶 格的情况完全不同.



Fig. 5. (a) Spin resolved conductance g_{\uparrow} (solid line) and g_{\downarrow} (dashed line) and (b) spin polarization $P_{\rm S}$ as a function of the on-site potential difference Δ_Z . Parameters are $\mu/E = 0$, $h_{\rm F}/E = 0$, $h_{\rm AF}/E = 1.25$, other parameters are the same as in Fig. 2.



图 6 (a) 自旋依赖电导 g_{\uparrow} (实线) 和 g_{\downarrow} (虚线) 和 (c) 谷电导 g_K (实线) 和 $g_{K'}$ (虚线) 随电势差 Δ_Z 的变化; (b) 自旋极化 率 P_S 和 (d) 谷极化率 P_V 随电势差 Δ_Z 的变化; 参数 $\mu/E = 2.5$, $h_F/E = 0$, $h_{AF}/E = 1.25$, 其他参数与图 2 中的相同 Fig. 6. (a) Spin resolved conductance g_{\uparrow} (solid line) and g_{\downarrow} (dashed line) and (c) valley conductance g_K (solid line) and $g_{K'}$ (dashed line) as a function of the on-site potential difference Δ_Z ; (b) spin polarization P_S and (d) valley polarization P_V as a function of the on-site potential difference Δ_Z . Parameters are $\mu/E = 2.5$, $h_F/E = 0$, $h_{AF}/E = 1.25$, other parameters are the same as in Fig. 2.

4 结 论

研究了3种硅烯超晶格中谷极化、自旋极化以 及赝自旋极化的输运性质,分析了基于硅烯超晶格 的电场调控机理与优势.铁磁硅烯超晶格会导致磁 性区的化学势依赖于铁磁交换场,而反铁磁硅烯超 晶格中磁性区电子的类狄拉克质量依赖于反铁磁 交换场和自旋.本文考虑了入射电子能量接近于 自旋轨道耦合能(硅烯的固有能隙)的情况下,外电 场对3种极化的调控.对于静电势超晶格,只有赝 自旋极化,不存在自旋极化和谷极化,赝自旋↑和 ↓的电导峰完全分开,赝自旋极化率在零场附近发 生从-1到+1的翻转,在零场两侧附近很宽的范围 内赝自旋是完全极化的.对于铁磁硅烯超晶格,铁 磁交换场和化学势导致谷极化和自旋极化同时存 在,而且谷电导和自旋依赖的电导随电势差变化出 现4个峰.不仅K谷和K'谷的电导峰完全分开,而

且每一个谷电导又劈裂为自旋依赖的两个峰. 类似 地,不仅自旋↑和↓的电导峰完全分开,而且每一种 电导峰又劈裂成谷依赖的两个峰. 通过调节外电 场可以实现谷极化率(或自旋极化率)从-1到+1 的翻转. 当电势差从负到正逐渐变化时, 谷极化的 顺序是 $K \to K' \to K \to K'$,自旋极化的顺序是 ↑→↓→↑→↓→↑. 对于反铁磁硅烯超晶格,反铁磁 交换场和化学势也可以导致谷极化和自旋极化,谷 电导和自旋依赖的电导类似于铁磁硅烯超晶格,也 都劈裂成4个峰,而且通过调节外电场也可以实现 谷极化率(或自旋极化率)从-1到+1的翻转.但 是,当电势差从负到正逐渐变化时,谷极化和自旋 极化的顺序与铁磁硅烯超晶格不同,谷极化的顺序 $\mathcal{L} K' \to K \to K'$, 自旋极化的顺序是 $\downarrow \to \uparrow \to \downarrow \to \uparrow$. 硅烯超晶格使自旋极化、谷极化以及赝自旋极化很 容易达到100%,而且利用外加电场就可以操控极 化的翻转,这为硅烯在信息存储与读取方面提供了 十分有利的条件.

参考文献

- de Padova P, Quaresima C, Ottaviani C, Sheverdyaeva P M, Moras P, Carbone C, Topwal D, Olivieri B, Kara A, Oughaddou H, Aufray B, Lay G L 2010 *Appl. Phys. Lett.* 96 261905
- [2] Vogt P, de Padova P, Quaresima C, Avila J, Frantzeskakis E, Asensio M C, Resta A, Ealet B, Lay G L 2012 *Phys. Rev. Lett.* 108 155501
- [3] Liu C C, Jiang H, Yao Y 2011 Phys. Rev. B 84 195430
- [4] Chen L, Liu C C, Feng B, He X, Cheng P, Ding Z, Meng
 S, Yao Y, Wu K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 056804
- [5] Ezawa M 2012 New J. Phys. 14 033003
 [6] Ezawa M 2012 Phys. Rev. Lett. 109 055502
- [7] Ezawa M 2013 Phys. Rev. B 87 155415
- [8] Fleurence A, Friedlein R, Ozaki T, Kawai H, Wang Y, Yamada-Takamura Y 2012 Phys. Rev. Lett. 108 245501
- [9] Rycerz A, Tworzydo J, Beenakker C 2007 Nat. Phys. 3 172
- [10] Xu X D, Yao W, Xiao D, Heinz T F 2014 Nat. Phys. 10 343
- [11] Tikhonenko F V, Horsell D W, Gorbachev R V, Savchenko A K 2008 Phys. Rev. Lett. 100 056802
- [12] Wu G Y, Lue N Y, Chen Y C 2013 Phys. Rev. B 88 125422

- [13] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* 81 109
- [14] Chantngarm P, Yamada K, Soodchomshom B 2016 Superlattices and Microstructures 94 13
- [15] Pham C H, Nguyen V L 2015 J. Phys: Condens. Matter 27 095302
- [16] Meyer J C, Girit C O, Crommie M F, Zettl A 2008 Appl. Phys. Lett. 92 123110
- [17] Zhang Q, Chen K S, Li J 2016 Sci. Rep. 6 33701
- [18] Missault N, Vasilopoulos P, Vargiamidis V, Peeters F M, Duppen B V 2015 Phys. Rev. B 92 195423
- [19] Missault N, Vasilopoulos P, Peeters F M, Duppen B V 2016 Phys. Rev. B 93 125425
- [20] Niu Z P, Zhang Y M, Dong S H 2015 New J. Phys. 17 073026
- [21] Zhang Y, Sun J, Guo Y 2018 J. Phys. D: Appl. Phys. 51 045303
- [22] Yokoyama T 2013 Phys. Rev. B 87 241409
- [23] Yokoyama T 2014 New J. Phys. 16 085005
- [24] Soodchomshom B 2014 J. Appl. Phys. 115 023706
- [25] Haugen H, Daniel H H, Arne B 2008 Phys. Rev. B 77 115406

Valley and spin polarization manipulated by electric field in magnetic silicene superlattice^{*}

Hou Hai-Yan¹⁾ Yao Hui¹⁾ Li Zhi-Jian¹⁾²⁾ Nie Yi-Hang^{1)2)†}

 (State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices, Institute of Theoretical Physics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China)

2) (Collaborative Innovation Center of Extreme Optics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China)

(Received 11 January 2018; revised manuscript received 2 February 2018)

Abstract

Silicene is a close relative of graphene with a honeycomb lattice structure. However, silicene is unlike the strictly two-dimensional graphene and it has a buckled structure, i.e., the A and B atoms form two sublattice planes with a small vertical separation distance in between. Thus a perpendicular electric field applied to silicene can induce a staggered sublattice potential and different onsite energies in the A and B sublattices. As a result, silicene has a large spin-orbit gap compared with graphene. In addition, the mass of Dirac electrons in silicone is controllable by an external electric field, which leads to several controllable polarized transports in the silicene junction, including valley-, spinand pseudospin-polarization transport. However, in a single silicone junction the manipulations of polarizations are not ideal. In this work, we consider several silicene-based superlattices in order to effectively control the properties of polarization transport. Using the transfer matrix method, we study valley-, spin- and pseudospin-polarization transport in silicene-based electrostatic potential, ferromagnetic and antiferromagnetic superlattices. The effects of ferromagnetic exchange field, antiferromagnetic exchange field and chemical potential on transport properties are analyzed and the roles of electrostatic field in regulating valley-, spin- and pseudospin-polarization are discussed. The ferromagnetic superlattices result in spin-dependent chemical potential in ferromagnetic regime, while Dirac-like mass depends on the antiferromagnetic exchange field and spin. For electrostatic potential superlattice, the pseudospin-polarization occurs and there is no spin-polarization nor valley-polarization. The peaks of both the pseudospin conductances are completely separated from each other and the pseudospin is completely polarized in the wide range of the zero field for both sides. For ferromagnetic superlattice, the ferromagnetic exchange field and chemical potential lead to the concurrences of spinand valley-polarizations. The spin- and valley-polarizations can realize a sudden reversal from -1 to +1 by adjusting the electric field. For antiferromagnetic superlattice, the similar properties of spin- and valley-polarizations are observed. Comparing with the ferromagnetic superlattice, only the polarization order is different when the same change is made in the electric field.

These results indicate that when the number of lattices in the superlattice is more than 10, the valley-, spin- and pseudospin-polarization reach 100% easily in silicene-based superlattice. The polarization direction can be reversed by adjusting the electric field, which is helpful in manipulating the freedom degrees of valley, spin and pseudospin in silicene superlattice.

Keywords: silicene superlattice, electric field manipulation, valley polarization, spin polarizationPACS: 68.65.Cd, 72.80.Vp, 72.25.-bDOI: 10.7498/aps.67.20180080

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274208) and the Shanxi "1331 Project", China (Grant No. 201542030).

[†] Corresponding author. E-mail: nieyh@sxu.edu.cn