双层 V_2SeTeO 中隐藏交错磁性的多场调控及其能谷与自旋劈裂*

荀威[1)†] 刘昕[1)] 张有东[1)] 周帆[1)] 陈玉凤[1)]
蒋青松[2)] 杨潇[2)] 吴银忠[3)‡]

1) (江苏电子信息职业学院电子工程学院, 淮安 223003)
2) (淮安大学电子信息工程学院, 淮安 223003)
3) (苏州科技大学物理科学与技术学院, 苏州 215009)

(2026 年 5 月 12 日收到; 2026 年 6 月 19 日收到修改稿)

隐藏交错磁性是指一类具有 PT 对称性的反铁磁体系, 整体净自旋极化为零, 但两个互为空间反演的子系统各自呈现交错磁性, 从而在实空间产生非零局域自旋极化. 本文基于第一性原理计算, 预测了具有 PT 对称性的双层 V_2SeTeO 具有隐藏交错磁性, 并进一步证明可通过层间滑移、应变与外电场解除并调控隐藏自旋极化. 研究表明, 层间滑移可有效诱导并调控能谷劈裂与自旋劈裂; 应变与垂直电场可分别调控能谷劈裂与自旋劈裂. 本工作为调控隐藏交错磁体的自旋劈裂和能谷极化提供了有效策略, 对发展下一代谷电子学与自旋电子学器件具有参考意义.

关键词: 隐藏交错磁性, 双层堆叠, 多场调控, 能谷劈裂与自旋劈裂, 反常霍尔效应, 第一性原理计算
DOI: 10.7498/aps.75.20260681 **CSTR:** 32037.14.aps.75.20260681

1 引 言

交错磁性是一种新兴的磁性相, 其在实空间具有补偿磁序 (净磁矩为零), 而在倒空间表现出非相对论性自旋劈裂, 已成为凝聚态物理与自旋电子学领域的前沿研究热点[1–9]. 交错磁体中的自旋劈裂源于磁空间群的对称性约束, 并受晶体对称性保护[1,2]. 此外, 交错磁体的自旋依赖费米面呈现出平面或体 d 波、g 波或 i 波对称性. 迄今为止, 许多交错磁体已得到理论预测与实验验证, 例如块体 $FeSb_2$, MnTe, RuO_2 和 CrSb 等[10–15].

除了电荷和自旋外, 能带结构中电子还存在一种新的内禀自由度, 称为能谷[16–19]. 能谷中不同的电子占据态可对应于“0”和“1”两种逻辑态, 使能谷成为可用于信息存储与处理的物理载体[20–22]. 近年来, 在 V_2SeXO (X = S, Se, Te), Cr_2X_2 (X = O, S, Se, Te), Fe_2MX_4 (M = Mo, W; X = S, Se, Te) 和 $A(BN)_2$ 等二维交错磁体中也提出了谷极化[23–34], 为铁谷材料家族引入了新成员, 并极大地拓展了交错磁体在自旋电子学中的应用前景.

近期, 研究者进一步提出了隐藏交错磁性[35–37], 该类磁性系统整体具有 PT 对称性 (空间反演对称性 P 与时间反演对称性 T 的联合对称操作), 净自旋极化为零. 然而, 构成体系的两个互为空间反演的子系统各自呈现交错磁性, 其中具有相反自旋的

* 国家自然科学基金 (批准号: 12404076)、江苏省青蓝工程、江苏省高校自然科学研究 (批准号: 25KJB140006) 和淮安市科技计划 (批准号: HAB2024069, HAG202405, HAB2024047, HAB2025026) 资助的课题.
† 通信作者. E-mail: wxun@jsei.edu.cn
‡ 通信作者. E-mail: yzwu@usts.edu.cn

© 2026 中国物理学会 Chinese Physical Society

磁性原子通过旋转或镜像对称性相互连接, 而非通过平移或反演操作. 这种独特的对称性设计使得系统在全局自旋简并的同时, 在实空间中产生非零的局域自旋极化, 呈现交错磁性特征. 然而, 目前针对隐藏交错磁性中能谷与自旋劈裂调控的研究仍鲜有报道, 相关物理机制亟待开展系统探究.

本工作基于第一性原理计算, 系统研究了具有 PT 对称性的双层 V_2SeTeO 的磁学与电子结构. 结果表明, 该体系能够稳定呈现隐藏交错磁性, 是研究局域自旋极化与能谷调控的理想材料. 进一步研究发现, 层间滑移可有效诱发体系的能谷劈裂与自旋劈裂, 而应变与垂直电场则可分别对能谷劈裂与自旋劈裂实现独立调控. 此外, 在考虑自旋–轨道耦合 (SOC) 时, 体系的面内本征磁化可诱导出微弱的谷极化. 上述结果为构建与调控隐藏交错磁性体系的自旋、能谷相关物理效应提供了可行途径.

2 计算细节

基于密度泛函理论 (DFT) 框架 [38,39], 采用 VASP 软件包进行结构优化, 并计算体系的磁性与电子性质 [40–42]. 势文件采用 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof), 广义梯度近似 (GGA) 描述交换关联能 [43]. 平面波基组的截断能设置为 600 eV, 布里渊区采用 21×21×1 的 Γ 中心 k 点网格计算. 沿 c 轴方向设置 30 Å的真空层, 以消除二维层状结构与其周期性镜像之间的相互作用. 体系总能与原子受力的收敛判据分别设置为 10^{-8} eV 与 0.005 eV/Å. 为合理描述 V 原子强关联 3d 电子特性, 引入 GGA+U 修正方法 [44], 有效哈伯德参数 U 取 4.0 eV. 针对双层体系的范德瓦耳斯相互作用, 采用 DFT-D3 方法进行范德瓦耳斯 (vdW) 修正 [24,25,45]. 磁取向可通过磁各向异性能确定, 其计算式为 $E_{\mathrm{MAE}} = E^{//}_{\mathrm{SOC}} - E^{\perp}_{\mathrm{SOC}}$, 其中 // 和 ⊥ 分别表示自旋位于面内和面外方向. 在施加电场的情况下, 设置参数 DIPOL = 0.5 以易于满足能量收敛标准, 并对原子位置进行弛豫.

3 结果与讨论

图 1(a) 展示了单层 Janus V_2SeTeO 的晶体结构. 该体系属于空间群 $P4mm$(第 99 号), 天然缺乏空间反演对称性. 为确定其磁基态, 构建了 2×2×1 超胞内的 4 种磁构型 (铁磁 FM, 以及 $\mathrm{AFM_{Néel}}$, $\mathrm{AFM_{Stripy}}$, $\mathrm{AFM_{Zigzag}}$), 并计算了它们的相对能量 (见图 S1(online)). 结果表明, $\mathrm{AFM_{Néel}}$构型能量最低, 即为体系的磁基态. 从图 1(b) 的自旋电荷密度分布可见, 具有相反自旋取向的两个 V 原子通过镜面 M_{xy} 对称性相互连接, 这是交错磁性的典型特征. 图 1(c) 的能带结构进一步证实了这一点: 单层 V_2SeTeO 呈现直接带隙 (0.152 eV), 价带顶与导带底均位于布里渊区的 X 和 Y 点, 且自旋相反的子晶格通过 PT C_{4z} 对称性关联. 磁各向异性计算表明, 体系的磁易轴位于面内, 磁各向异性能为 –1.16 meV/单位晶胞. 当考虑自旋-轨道耦合 (SOC) 时, 由于 M_{xy} T 对称性破缺, 沿 x 或 y 方向面内磁化的单层 V_2SeTeO 在 X 与 Y 谷之间出现微弱的谷劈裂 (见图 S2(online), ΔV = 8.9 meV, ΔC = 4.0 meV).

利用海森伯自旋模型 [46] 对 Néel 温度进行计算:

$$H_{\mathrm{ex}} = -\sum_{i\neq j} J_{ij}(S_i \cdot S_j) - k(S_i \cdot e)^2 \qquad (1)$$

其中, S_i, J_{ij} 和 k 分别表示描述局部自旋矩方向的单位矢量、原子位点 (i, j) 之间的交换相互作用以及磁各向异性能. 采用四态法计算 V 原子间的最近邻 (V1—V3)、次近邻 (V1—V3) 和第三近邻 (V1—V5) 海森伯交换耦合常数, 通过计算目标原子对 4 种共线自旋构型 (↑ ↑, ↑ ↓, ↓ ↑, ↓ ↓) 的总能量 (其余所有自旋均固定为反铁磁基态方向), 交换耦合常数可由下式求解:

$$\begin{aligned}
E_{\uparrow\uparrow} &= E_0 + E_{\mathrm{other}} + J_{ij}S^2 + S_iK_i + S_jK_j,\\
E_{\uparrow\downarrow} &= E_0 + E_{\mathrm{other}} - J_{ij}S^2 + S_iK_i - S_jK_j,\\
E_{\uparrow\downarrow} &= E_0 + E_{\mathrm{other}} - J_{ij}S^2 - S_iK_i + S_jK_j,\\
E_{\downarrow\downarrow} &= E_0 + E_{\mathrm{other}} + J_{ij}S^2 - S_iK_i - S_jK_j,\\
J_{ij} &= (E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} - E_{\downarrow\uparrow} + E_{\downarrow\downarrow})/4S^2, \qquad (2)
\end{aligned}$$

其中 E_{other} 表示除 S_i 和 S_j 之外的自旋之间相互作用的能量. 计算得到 V 原子间最近邻为–29.52 meV、次近邻为 10.15 meV、第三近邻为–6.85 meV. 采用 Metropolis 方法在具有周期性边界条件的 192×192 二维四方晶格网格上进行蒙特卡洛模拟. 图 S3 中显示了退火过程中比热随温度变化的曲线, Néel 温度为 524 K. 该结果与 Singh 等 [47] 报道的 525 K 和 Ullah 等 [48] 报道的 510 K 高度一致, 表明单层

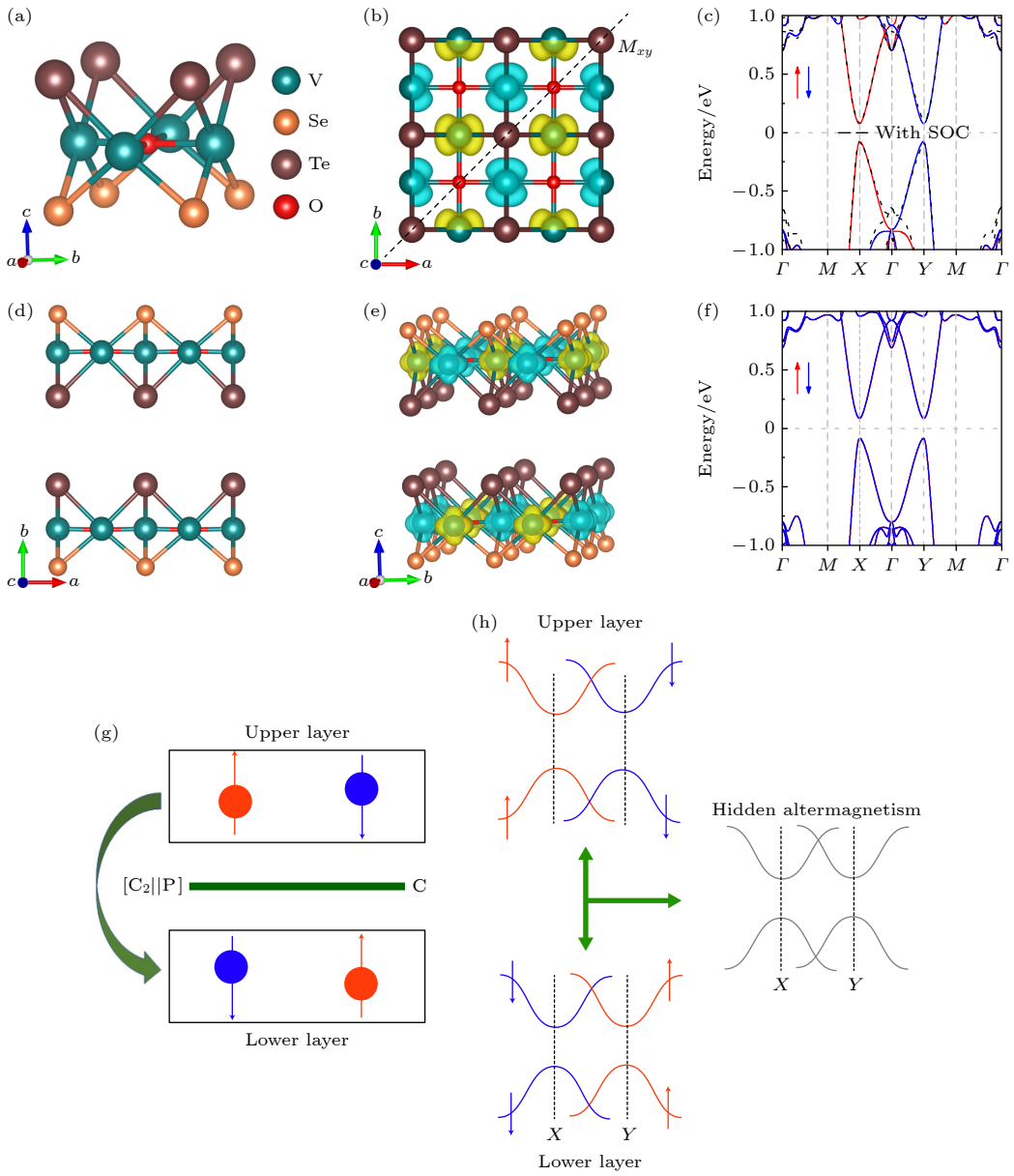

图 1 (a)—(c), (d)—(f) 分别为单层及双层 V_2SeTeO(Te-Te 界面) 的侧视图、自旋电荷密度与能带结构; (g) *PT* 对称反铁磁体示意图, 包含反演中心的 C 平面将晶胞分为上层与下层; (h) 上层与下层呈现相反的交错磁性自旋劈裂, 使得 *PT* 对称反铁磁体的能带至少具有二重简并

Fig. 1. (a)–(c), (d)–(f) The side view of the crystal structure, spin charge density, and spin-polarized band structure of monolayer and bilayer V_2SeTeO (Te -Te interface), respectively; (g) schematic illustration of a *PT*-symmetric antiferromagnet, the unit cell is divided into upper and lower layers by the C plane containing the inversion center; (h) the upper and lower layers exhibit opposite altermagnetic spin splittings, resulting in at least two-fold degenerate energy bands for the *PT*-symmetric antiferromagnet.

V_2SeTeO 具有远高于室温的磁有序温度, 为其在室温自旋电子学和谷电子学器件中的应用提供了坚实基础.

为构建具有 PT 对称性的双层体系以实现隐藏交错磁性, 我们设计了 3 种堆叠构型: Te-Te 界面、Se-Se 界面和 Te-Se 界面 (见图 S4(online)). 对称性分析表明, Se-Se 和 Te-Te 界面均保留镜面 M_z 与空间反演 P 对称性, 其能带呈现自旋简并 (见图 S4(d), (e)(online) 及图 1(f)), 符合隐藏交错磁性的全局特征; 而 Te-Se 界面打破了上述对称性, 自旋简并随之消失. 能量计算结果显示, 3 种堆叠构型的磁基态均为层内反铁磁与层间反铁磁耦合 (即图 S5(a) (online) 所示的 AFM1 构型, 见图 S6(online)). 其中, Te-Te 界面构型的总能量比 Se-Se 界面低 38.4 meV, 稳定性最高. 因此, 后续研究将聚焦于 Te-Te 界面的双层 V_2SeTeO 薄膜.

如图 1(g) 所示, 对于具有 PT 对称性的 Te-Te 界面双层 V_2SeTeO 体系, 其自旋自由度的行为受两种对称性操作的共同约束. 首先考虑单一原子层内部: 自旋相反的磁性原子之间通过 $[C_2/\!/O]$ 操作 (其中 C_2 为自旋空间中的二重旋转, O 为晶格空间中的旋转或镜像操作) 形成关联. 该磁序打破了 PT 对称性和 Ut 对称性 (U 为自旋反转操作, t 平移操作), 从而使得无论是否存在 SOC, 自旋劈裂均得以产生, 即形成所谓的"局域"交错磁性, 如图 1(e), (h) 所示. 再将视角拓展到两个原子层之间. 上下两层通过 $[C_2/\!/P]$ 操作相互耦合, 这一对称性关系使得两层的局域自旋极化方向彼此相反, 从而在整体上相互抵消, 净自旋极化为零. 从能带特征来看, 全局 PT 对称性要求 $E_{\uparrow}(k) = PTE_{\uparrow}(k) = PE_{\downarrow}(-k) = E_{\downarrow}(k)$, 这意味着整个体系的能带必须保持自旋简并, 宏观上观测不到自旋劈裂 (见图 1(f), (h)). 然而, 局域的 $[C_2/\!/O]$ 对称性又在微观层面产生了动量依赖的自旋劈裂. 这种"全局简并、局域劈裂"的矛盾统一体, 与文献 [35–37] 所报道的隐藏交错磁性的物理图象一致. 为验证隐藏交错磁性的稳健性, 我们测试了 $U = 2$—6 eV 范围内磁基态及能带结构的变化. 结果表明, 在所考虑 U 值范围内, 体系始终处于 AFM-AFM 磁基态, 能带结构规律保持一致 (详见补充材料图 S7 和图 S8 (online)), 表明本文所预测的隐藏交错磁性基态不依赖于特定 U 参数的选取, 具有高度的物理稳健性.

要解除 PT 对称磁性材料的能带简并, 需打破联合操作 PTt 对称性, 而层间滑移正是打破该对称性的有效手段 [20,28,49–51]. 如图 S9(online) 所示, 本文考虑了 4 种典型的堆叠构型: AA, AB', $A'B$ 和 AB. AA 堆叠为上层简单放置于下层之上, 因此保留了 PT 对称性; AB', $A'B$ 和 AB 堆叠则分别由 AA 堆叠沿不同方向滑移获得, 滑移矢量依次为 $t_1/\!/[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0]$, $t_1/\!/[\frac{1}{2}, 0, 0]$ 和 $t_1/\!/[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0]$. 为确定基态堆叠构型, 我们计算了沿 [100] 和 [110] 方向的滑移能垒. 如图 2(a) 所示, AB 堆叠能量最低, AA 最高. 从 AA 转变为 AB 堆叠需克服 57.79 meV 的能垒. 为探究堆叠方式对磁性的影响, 计算了层间反铁磁与铁磁态之间的能量差, 结果如图 2(b), (c) 和图 S10(online) 所示. AA 堆叠倾向于层间反铁磁耦合, 而 AB 堆叠倾向于层间铁磁耦合. 此外, AB'和 $A'B$ 堆叠附近区域仍以层间反铁磁耦合为主. 上述结果表明, 磁性与堆叠构型之间存在强关联.

当层间磁态为反铁磁耦合时, AA, AB'和 $A'B$ 堆叠的能带始终保持自旋简并, 宏观上无自旋劈裂; 而 AB 堆叠的能带出现自旋退简并, 自旋向上与自旋向下态分别位于布里渊区的 X 点和 Y 点. 有趣的是, 当层间磁态切换为铁磁耦合时, 能带行为发生显著变化: AB 堆叠恢复自旋简并, AB'堆叠出现自旋退简并, AA 堆叠产生 73.9 meV 的自旋劈裂 (见图 2(h)), 而 $A'B$ 堆叠则表现出 35.5 meV 的谷极化 (见图 2(i)). 谷劈裂定义为导带底和价带顶分别在 X 与 Y 谷之间的能量差 $\Delta C(V) = |E_{\mathrm{Xc(v)}} - E_{\mathrm{Yc(v)}}|$.

基于上述分析, 双层 V_2SeTeO 的能带行为对层间滑移方向具有高度敏感性. 当上层沿对角线方向 ($AA \rightarrow AB' \rightarrow AB$) 滑移时, 体系保持 D_{2d} 对称性, 能带呈现自旋简并态, 与单层情况类似. 当滑移方向转为沿 x 轴时, 体系进入 $A'B_1$ 堆叠, X 与 Y 谷出现不等价能隙, 产生谷极化, 其值为 35.5 meV (见图 2(i)). 若滑移方向改为沿 y 轴 ($A'B_2$ 堆叠), 谷极化极性发生反转, X 谷能隙转而大于 Y 谷. 图 S11(online) 进一步展示了 AA 堆叠下不同层的能带: 尽管整体能带仍保持自旋简并, 但上下两层的能带在 X 与 Y 谷处出现自旋劈裂, 劈裂值约为 73.9 meV. 值得注意的是, $A'B_1$ 与 $A'B_2$ 两种堆叠分别对应符号相反的谷极化, 二者可通过中间 AB 堆叠 (无自发谷极化与自旋劈裂) 实现可逆切换. 从反常谷霍尔效应的角度来看, 对于 $A'B_1$ 堆叠 (图 3(b)), Y 谷中自旋向下的空穴在外电场驱动下向右边缘积累; 而对于谷极化极性相反的 $A'B_2$ 堆叠, X 谷中自旋向上的空穴则向左边缘积累, 形成方向相反的横向电压信号.

一般而言, 能谷劈裂可源于空间反演对称 (P) 性破缺 (如铁电体系), 亦可源于时间反演对称性 (T) 破缺 (如磁性体系中的自旋-轨道耦合), 或两者的协同作用 [22–26,52–54]. 在前述层间滑移在隐藏交错磁性体系中诱导谷劈裂的基础上, 单轴应变同样可有效调控体系的谷极化行为. 具体而言, 通过打破 AA 堆叠双层 V_2SeTeO 中的 M_{xy} 对称性, 单轴应变可诱导显著的谷劈裂. 图 4(a)—(c) 及图 S12(online) 展示了在不同单轴应变 (沿 a 方向) 下 AA 堆叠双层 V_2SeTeO 的能带结构演化. 图 5(a), (b) 进一步给出了谷劈裂及带隙随应变变化的定量关系. 压应变与拉应变均能诱导 X/Y 谷劈裂, 2% 压应变下谷

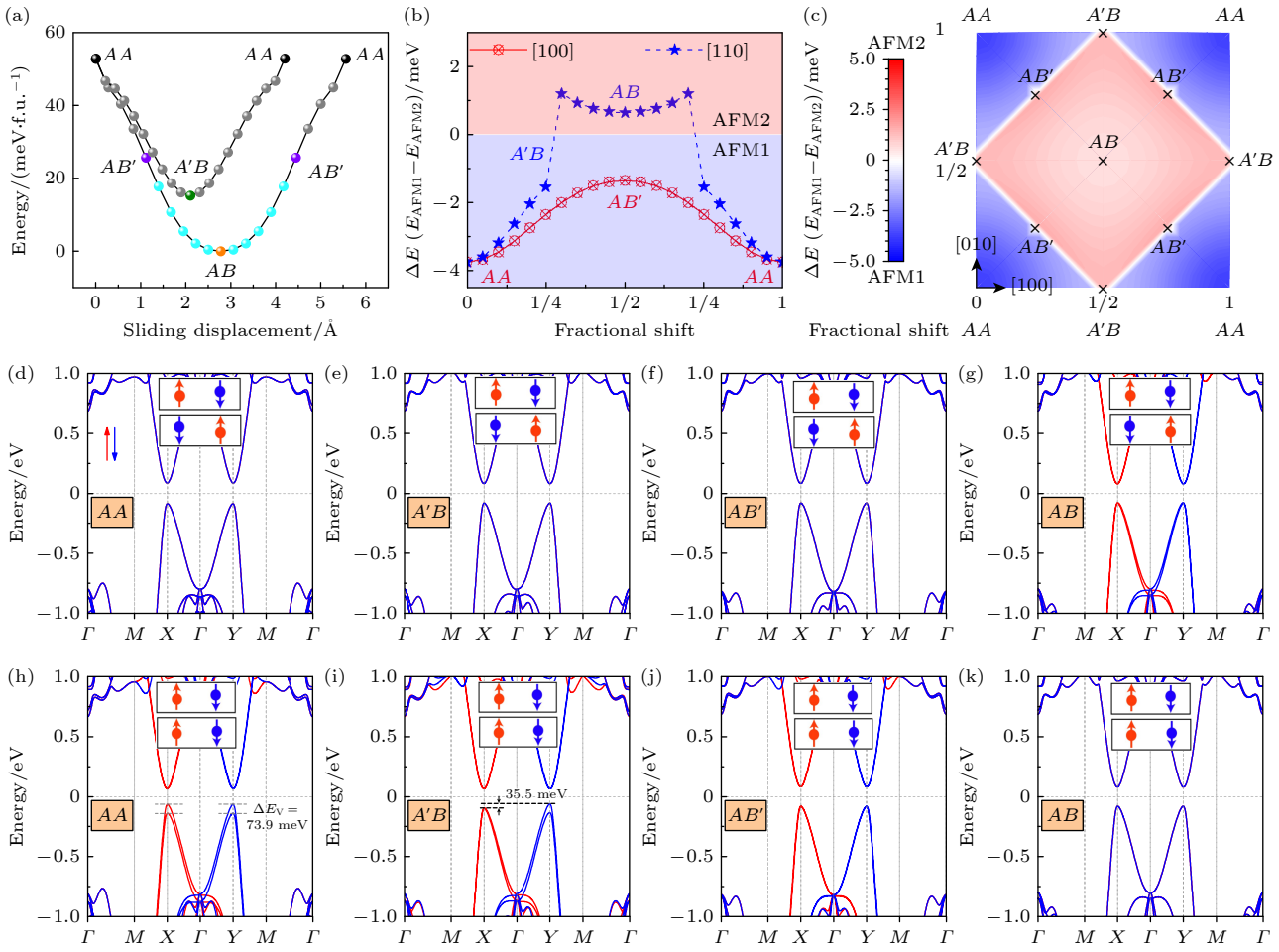

图 2 (a) *AA* 堆叠双层 V_2SeTeO 的层间滑移能垒 (灰/蓝球表征层间反铁磁/铁磁态; 橙球表征能量极小点); (b) 层间磁态能量差随滑移沿 [100](红实线) 与 [110](蓝虚线) 方向的变化; (c) 横向滑移空间分布图 (正/负值区表征层间铁磁/反铁磁态); (d)—(g) 层间反铁磁构型下 *AA*, *A′B*, *AB′*, *AB* 堆叠的能带图; (h)—(k) 层间铁磁构型下 *AA*, *A′B*, *AB′*, *AB* 堆叠的能带图

Fig. 2. (a) Sliding energy barrier of *AA*-stacked bilayer V_2SeTeO (gray/blue balls represent interlayer AFM/FM; orange represents energy minimum); (b) energy difference vs. sliding along [100] (red solid) and [110] (blue dashed); (c) lateral sliding map (positive/negative represent interlayer FM/AFM); (d)–(g) band structures for *AA*, *A′B*, *AB′*, *AB* stackings under interlayer AFM; (h)–(k) same under interlayer FM.

劈裂高达 102 meV.

除层间滑移和应变, 我们还研究了电场对隐藏交错磁性自旋极化的影响. 与谷劈裂类似, 将 X 或 Y 谷在价带顶 (导带底) 处的自旋劈裂定义为 $\Delta E_{v(c)} = |E^{\uparrow}_{v(c)} - E^{\downarrow}_{v(c)}|$. 当施加 0.06 V/Å的垂直电场时, *AA* 堆叠双层 V_2SeTeO 在 X 与 Y 谷处产生显著的自旋劈裂, 其中 ΔE_v 和 ΔE_c 分别为 77.9 meV 和 83.3 meV. 当电场方向反转时, 自旋劈裂的符号随之反转 (见图 4(d)—(f)). 图 5(c), (d) 及图 S13(online) 展示了带隙及自旋劈裂随电场强度的变化关系. 可以看出, 自旋劈裂随电场增强呈线性增长, 而带隙则线性减小直至闭合. 当电场强度增至+0.14—+0.2 V/Å范围时, 能带结构在 X, Y 点附近的费米能级处形成节点环, 且不同节点环由相反的自旋通道构成 (见图 6(d) 及图 S13(online)). 对称性分析表明, 该节点环位于 xy 平面内, 两条交叉能带具有相反的 M_z 本征值, 属于受 M_z 镜面对称性保护的稳定节点环, 并非偶然能带简并. 整体来看, 垂直电场可有效调控隐藏交错磁性体系的自旋劈裂.

需要说明的是, 为完整展现垂直电场连续变化对双层 V_2SeTeO 能带结构、自旋劈裂以及能带特征的调控全貌, 本文计算了+0.06—+0.2 V/Å 区间的高场结果, 该部分数据仅用于理论剖析极限电场下的物性演化路径, 补充完善本材料外场调控的物理规律.

对于 *AA* 堆叠双层 V_2SeTeO, SOC 效应虽非交错磁性自旋劈裂的必要条件, 本文仍对其影响进

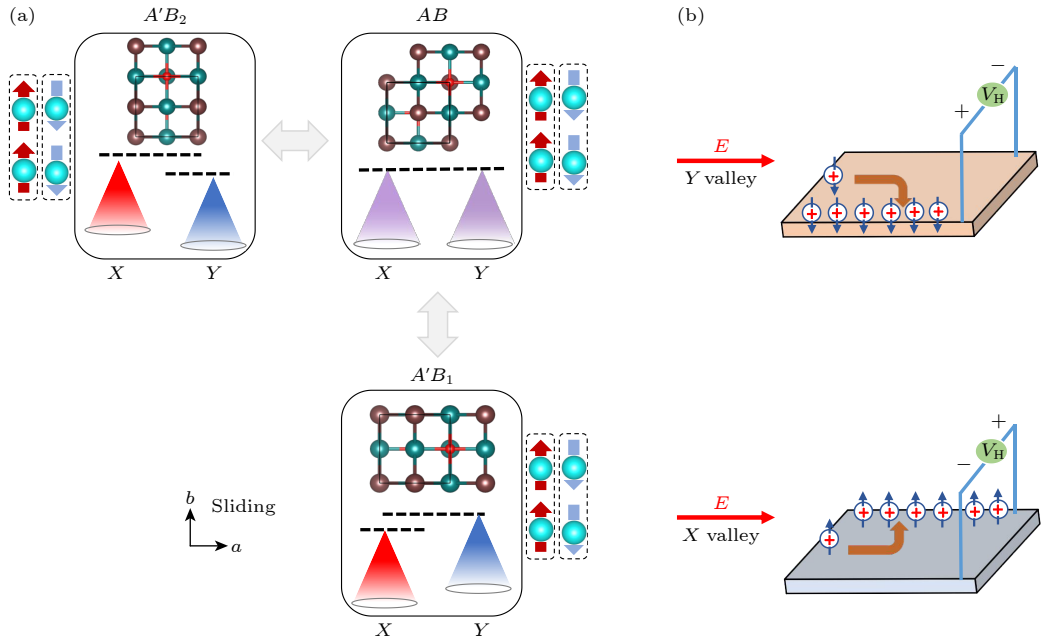

图 3 (a) 具有 AB, $A'B_1$ 和 $A'B_2$ 堆叠的 V_2SeTeO 双层结构示意图, 由 AB 堆叠沿 x 轴滑移获得 $A'B_1$ 堆叠, 沿 y 轴滑移获得 $A'B_2$ 堆叠, 这两种滑移均可诱导自发谷极化且符号相反; (b) 空穴掺杂下 $A'B_1$ 和 $A'B_2$ 堆叠双层体系中反常谷霍尔效应示意图, 空穴用“+”符号表示, 向上 (下) 箭头表示自旋向上 (下) 的载流子

Fig. 3. (a) Schematic illustration of bilayer V_2SeTeO with AB, $A'B_1$, and $A'B_2$ stackings, the $A'B_1$ and $A'B_2$ stackings are obtained by sliding the AB stacking along the x- and y-axis directions, respectively, both slides induce spontaneous valley polarization with opposite signs; (b) schematic diagram of the anomalous valley Hall effect in hole-doped $A'B_1$ and $A'B_2$ stacked bilayers, holes are denoted by the “+” symbol, and upward/downward arrows represent spin-up/spin-down carriers, respectively.

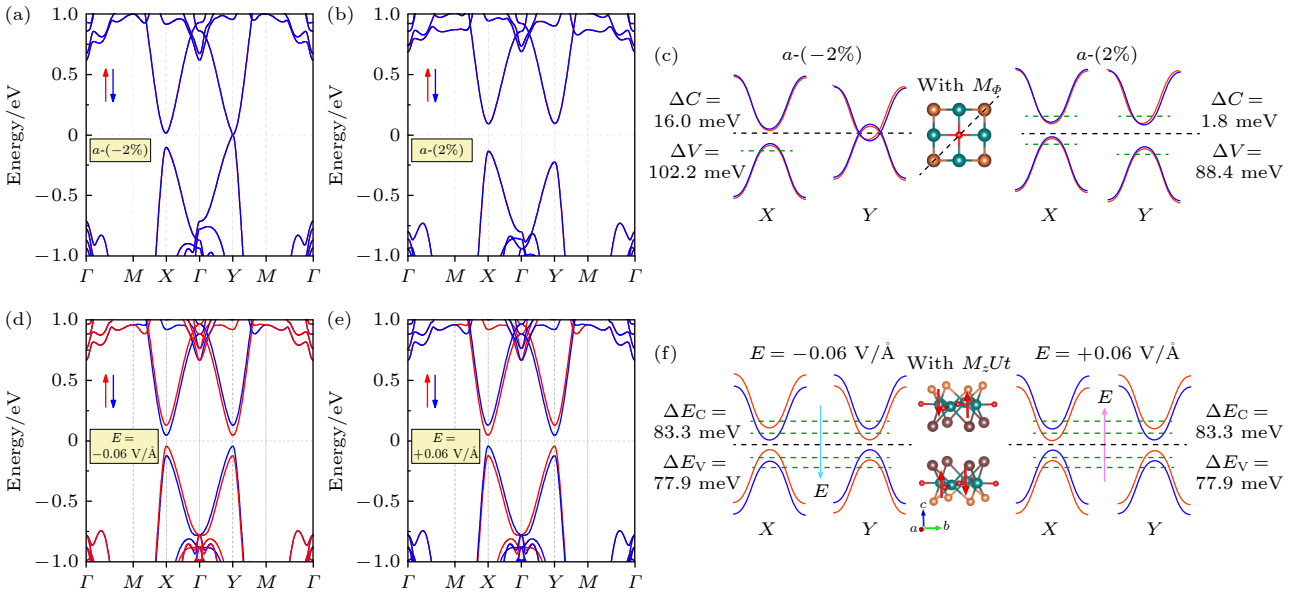

图 4 (a), (b) AA 堆叠分别在沿 a 方向–2% 与 2% 单轴应变下的能带结构; (c) 单轴应变诱导谷劈裂的示意图; (d)—(e) AA 堆叠在外电场为–0.06 V/Å与+0.06 V/Å时的能带结构; (f) AA 堆叠的原子结构及其电场诱导自旋劈裂的示意图

Fig. 4. (a), (b) Band structures of AA stacking under –2% and 2% uniaxial strain along the x-direction, respectively; (c) schematic illustration of valley splitting induced by uniaxial strain; (d), (e) band structures of AA stacking under external electric fields of –0.06 V/Å and +0.06 V/Å, respectively; (f) atomic structure of AA stacking and schematic illustration of electric-field-induced spin splitting.

行考察. 体系谷极化的出现与否, 取决于磁化方向对 $M_{xy}T$ 对称性的破缺情况: 当磁化方向位于面内 x 轴或 y 轴时, 该对称性被打破, 谷极化得以出现. 如图 6(a), (b) 所示, 在电场强度 $E = +0.06$ V/Å下,

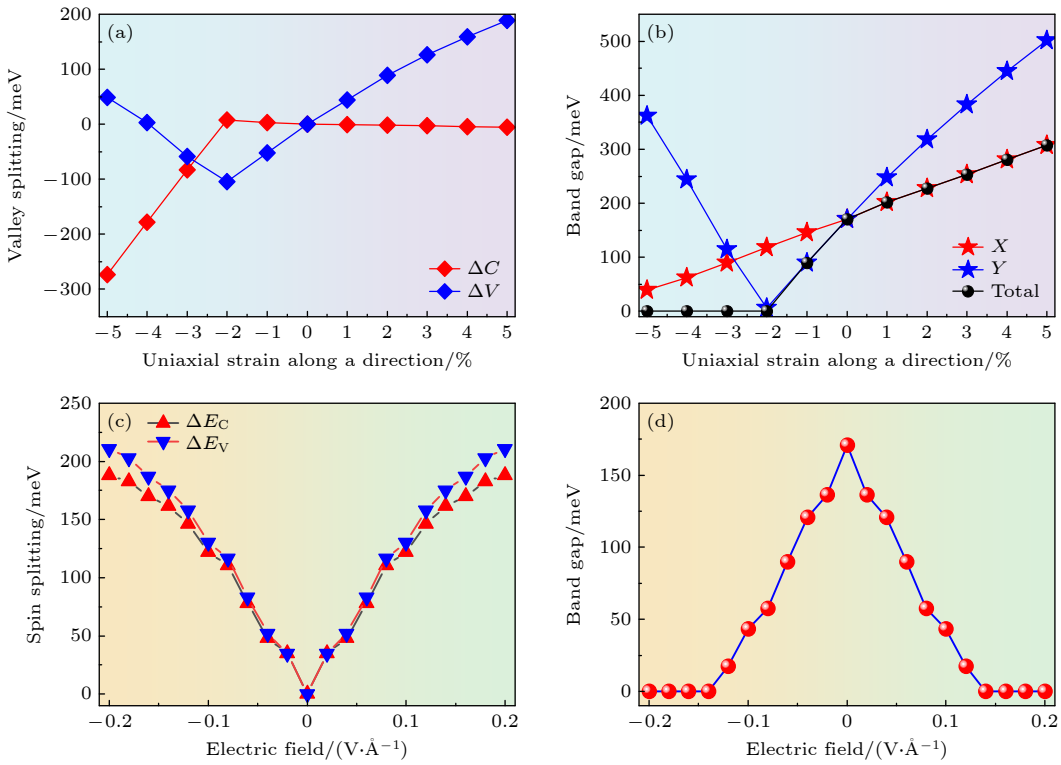

图 5 (a) *AA* 堆叠双层 V_2SeTeO 在单轴应变下的谷劈裂行为 (ΔV 为价带顶, ΔC 为导带底); (b) 体系带隙随应变的变化规律; (c) 垂直电场调控下, *AA* 堆叠在价带顶 (ΔE_v) 与导带底 (ΔE_c) 处的自旋劈裂; (d) 体系带隙随外电场的变化趋势

Fig. 5. (a) Valley splitting behavior of *AA*-stacked bilayer V_2SeTeO under uniaxial strain (ΔV represents valence band maximum, ΔC represents conduction band minimum); (b) evolution of the band gap as a function of strain; (c) spin splitting at the valence band maximum (ΔE_v) and conduction band minimum (ΔE_c) of *AA* stacking under a perpendicular electric field; (d) band gap evolution as a function of the external electric field.

X 与 *Y* 谷之间出现了明显的能量差异, 导带底与价带顶的谷劈裂分别约为 8.72 meV 与 10.49 meV. 当磁化方向在 *x* 与 *y* 轴之间转换时, 谷极化的符号随之反转 (见图 6(b) 及图 S14(b)). 图 6(c) 进一步汇总了不同电场强度下谷劈裂的变化趋势. 总体而言, 电场强度的改变对谷劈裂数值的影响并不显著. 需要说明的是, 在–5%—5% 的单轴应变和 0—0.2 V/Å的垂直电场范围内, 体系的磁基态始终保持 AFM-AFM 构型 (层内反铁磁+层间反铁磁), 未发生磁相变. 因此, 本文关于多场调控隐藏自旋极化的结论适用于整个参数范围 (详见图 S15(online)).

需要指出的是, 在真实器件输运测量中, 反常谷霍尔信号易与普通霍尔效应、平面霍尔效应、自旋霍尔效应等机制相互耦合. 为提取纯谷极化贡献, 可采用以下策略: 首先, 采用非局部 (non-local) 测量几何配置, 将电流注入端与电压测量端在空间上分离, 利用谷极化载流子的长程输运特性, 在非注入端检测纯谷电流产生的横向电压, 该方案已在过渡金属硫族化合物的谷霍尔效应实验中得到验证[18]. 其次, 利用本文特有的对称性差分信号提取法: 反常谷霍尔信号符号随层间滑移方向 ($A'B_1$ *vs.* $A'B_2$) 完全反转, 通过取两种构型的电压差 ($\Delta V = V_{A'B1} - V_{A'B2}$), 可扣除所有不随滑移反转的背景信号, 直接得到纯谷极化贡献. 这种基于对称性的差分测量方法已在近期的二维铁谷材料和交错磁体理论研究中被提出[49,51,55]. 此外, 结合交流锁相放大技术, 通过提取特定频率响应及二次谐波非线性信号, 可有效抑制直流噪声与热漂移, 进一步提高信噪比[54].

4 总 结

本文基于第一性原理计算, 系统研究了具有 *PT* 对称性的双层 V_2SeTeO 中隐藏交错磁性的多场调控及其能谷与自旋劈裂行为. 计算结果表明, 该双层薄膜在物理图像上能稳定呈现隐藏交错磁性: 即整体净自旋极化为零, 但两个互为空间反演的子系统均具有非零局域自旋极化并呈现交错磁性, 是研究相关物理效应的理想平台. 进一步发现,

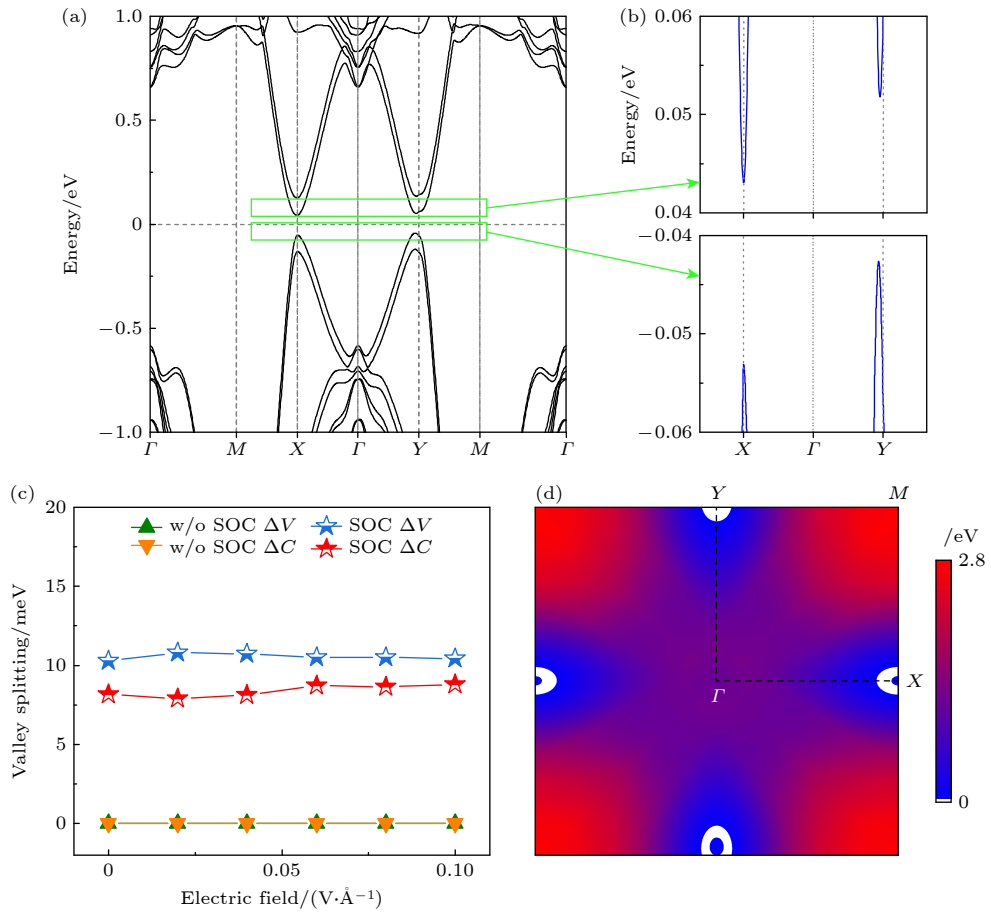

图 6 垂直电场调控下 AA 堆叠双层 V_2SeTeO 的能带结构及谷劈裂行为 (a) 考虑 SOC 且磁化方向沿面内 x 轴时, 体系在电场强度 $E = +0.06$ V/ Å 下的能带结构; (b) 对应的费米能级附近放大图; (c) 导带与价带在 X 与 Y 谷之间的谷劈裂随电场 E 的变化关系; (d) 电场强度 $E = +0.2$ V/Å 时体系中的节点环 (色标反映两能带交叉处的局域带隙分布)

Fig. 6. Band structures, valley splitting, and topological features of AA-stacked bilayer V_2SeTeO under a perpendicular electric field: (a) Band structure under an electric field of $E = +0.06$ V/Å with spin-orbit coupling considered and magnetization along the in-plane x-direction; (b) corresponding enlarged view near the Fermi level; (c) valley splitting between X and Y valleys for both conduction and valence bands as a function of electric field E; (d) the nodal loop at $E = +0.2$ V/Å (color map denotes the local band gap distribution at the crossing of two bands).

多种手段可有效调控能谷与自旋自由度. 如层间滑移不仅能显著诱导并调控能谷劈裂与自旋劈裂, 还可通过改变滑移方向实现谷极化极性的可逆切换. 另外单轴应变与垂直电场则分别可对能谷劈裂与自旋劈裂展现出独立的线性调控效果, 有趣的是在高电场下还能诱导出受镜面对称性保护的节点环. 此外, 当考虑 SOC 时, 面内磁化方向对 $M_{xy}T$ 对称性的破缺还可诱发微弱的谷极化, 虽然其强度随电场变化不明显, 但可引起极性反转, 具有潜在的应用价值.

从对称性分析的角度, 本文以双层隐藏交错磁体 V_2SeTeO 为例详细阐述了能谷与自旋劈裂的产生、调控与对称性破缺之间的内在关联: 全局 PT 对称性保证了宏观自旋简并, 而局域的 $[C_2/\!/O]$ 对称性及层间滑移、应变、电场等对特定对称性 (如 M_{xy}, M_zUt 和 PT 等) 的打破, 是实现局域自旋极化和能谷劈裂的物理起源. 本工作所提出的多场协同调控策略, 不仅为理解隐藏交错磁性的微观机制提供了清晰的物理图像, 也为低功耗、非易失性的谷电子学与自旋电子学器件设计提供了又一可能的材料与调控思路.

参考文献

[1] Šmejkal L, Sinova J, Jungwirth T 2022 *Phys. Rev. X* **12** 031042

[2] Šmejkal L, Sinova J, Jungwirth T 2022 *Phys. Rev. X* **12** 040501

[3] Jiang Y Y, Wang Z A, Samanta K, Zhang S H, Xiao R C, Lu W J, Sun Y P, Tsymbal E Y, Shao D F 2023 *Phys. Rev. B* **108** 174439

[4] Zhu Y P, Chen X B, Liu X R, Liu Y T, Liu P F, Zha H M, Qu G X, Hong C Y, Li J Y, Jiang Z C, Ma X M, Hao Y J, Zhu M Y, Liu W J, Zeng M, Jayaram S, Lenger M, Ding J Y, Mo S, Tanaka K, Arita M, Liu Z T, Ye M, Shen DW, Wrachtrup J, Huang Y B, He R H, Qiao S, Liu Q H, Liu C 2024 *Nature* **626** 523

[5] Feng X, Bai H, Fan X, Guo M, Zhang Z, Chai G, Wang T, Xue D, Song C, Fan X 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 086701

[6] Bai H, Zhang Y C, Zhou Y J, Chen P, Wan C H, Han L, Zhu W X, Liang S X, Su Y C, Han X F, Pan F, Song C 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 216701

[7] Smekal L, Marmodoro A, Ahn K H, Hernandez R G, Turek I, Mankovsky S, Ebert H, Souza S W D, Sipr O, Sinova J, Jungwirth T 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 256703

[8] Fang Y, Cano J, Ghorashi S A A 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 106701

[9] Xun W, Liu X, Zhang Y D, Wu Y Z, Li P 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 161903

[10] Mazin I I, Koepernik K, Johannes M D, Hernandez R G, Smejkal L 2021 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **118** e2108924118

[11] Lee S, Lee S, Jung S, Jung J, Kim D, Lee Y, Seok B, Kim J, Park B G, Šmejkal L, Kang C J, Kim C 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 036702

[12] Osumi T, Souma S, Aoyama T, Yamauchi K, Honma A, Nakayama K, Takahashi T, Ohgushi K, Sato T 2024 *Phys. Rev. B* **109** 115102

[13] Feng Z X, Zhou X R, Smejkal L, Wu L, Zhu Z W, Guo H X, Hernandez R G, Wang X N, Yan H, Qin P X, Zhang X, Wu H J, Chen H Y, Meng Z A, Liu L, Xia Z C, Sinova J, Jungwirth T, Liu Z Q 2022 *Nat. Electron.* **5** 735

[14] Reimers S, Odenbreit L, Šmejkal L, Strocov V N, Constantinou P, Hellenes A B, Jaeschke Ubiergo R, Campos W H, Bharadwaj V K, Chakraborty A, Denneulin T, Shi W, Dunin-Borkowski R E, Das S, Kläui M, Sinova J, Jourdan M 2024 *Nat. Commun.* **15** 2116

[15] Park I J, Kwon S, Lake R K 2020 *Phys. Rev. B* **102** 224426

[16] Shkolnikov Y P, De Poortere E P, Tutuc E, Shayegan M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 226805

[17] Cao T, Wang G, Han W P, Ye H Q, Zhu C R, Shi J R, Niu Q, Tan P H, Wang E G, Liu B L, Feng J 2012 *Nat. Commun.* **3** 887

[18] Mak K F, He K, Shan J, Heinz T F 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 494

[19] Zeng H L, Dai J F, Yao W, Xiao D, Cui X D 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 490

[20] Xun W, Wu C, Sun H B, Zhang W X, Wu Y Z, Li P 2024 *Nano Lett.* **24** 3541

[21] Li P, Wu C, Peng C, Yang M, Xun W 2023 *Phys. Rev. B* **108** 195424

[22] Li P, Yang X, Jiang Q S, Wu Y Z, Xun W 2023 *Phys. Rev. Mater.* **7** 064002

[23] Ma H Y, Hu M, Li N, Liu J, Yao W, Jia J F, Liu J 2021 *Nat. Commun.* **12** 2846

[24] Zhu Y, Chen T K, Li Y C, Qiao L, Ma X N, Liu C, Hu T, Gao H, Ren W 2024 *Nano Lett.* **24** 472

[25] Xun W, Liu X, Zhang Y D, Wu Y Z, Li P 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 161903

[26] Tian J K, Li J, Liu H B, Li Y, Liu Z, Li L Y, Li J, Liu G D, Shi J J 2025 *Phys. Rev. B* **111** 035437

[27] Li Y Q, Zhang Y K, Lu X L, Shao Y P, Bao Z Q, Zheng J D, Tong W Y, Duan C G 2025 *Nano Lett.* **25** 6032

[28] Wu Y Z, Deng L, Yin X, Tong J W, Tian F B, Zhang X M 2024 *Nano Lett.* **24** 10534

[29] Cui Q R, Zhu Y M, Yao X, Cui P, Yang H X 2023 *Phys. Rev. B* **108** 024410

[30] Ma H Y, Guan D, Wang S, Li Y, Liu C, Zheng H, Jia J F 2021 *J. Phys. : Condens. Matter* **33** 21LT01

[31] Guo P J, Liu Z X, Lu Z Y 2023 *npj Comput. Mater.* **9** 70

[32] Chen X, Wang D, Li L, Sanyal B 2023 *Appl. Phys. Lett.* **123** 022402

[33] Guo S D, Guo X S, Cheng K, Wang K, Ang Y S 2023 *Appl. Phys. Lett.* **123** 082401

[34] Zhang R W, Cui C, Li R, Duan J, Li L, Yu Z M, Yao Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 056401

[35] Matsuda J, Watanabe H, Arita R 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 226703

[36] Guo S D 2026 *Front. Phys.* **21** 025201

[37] Guo S D 2026 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28** 2188

[38] Hohenberg P, Kohn W 1964 *Phys. Rev.* **136** B864

[39] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** A1133

[40] Kresse G 1995 *J. Non-Cryst. Solids* **222** 192

[41] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Mater. Sci.* **6** 15

[42] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758

[43] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

[44] Grimme S, Antony J, Ehrlich S, Krieg H 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 154104

[45] Grimme S, Ehrlich S, Goerigk L 2011 *J. Comput. Chem.* **32** 1456

[46] Evans R F, Fan W J, Chureemart P, Ostler T A, Ellis M O, Chantrell R W 2014 *J. Phys. Condens. Matter* **26** 103202

[47] Singh S, Rout P C, Ghadiyali M, Schwingenschlogl U 2025 *Mat. Sci. Eng. R* **166** 101017

[48] Ullah A, Bezzerga D, Hong J 2024 *Materials Today Physics* **47** 101539

[49] Wu Y Z, Tong J W, Deng L, Luo F F, Tian F B, Qin G W, Zhang X M 2023 *Nano Lett.* **23** 6226

[50] Feng Y Y, Dai Y, Huang B B, Kou L Z, Ma Y D 2023 *Nano Lett.* **23** 5367

[51] Li Y Q, Zhang X, Shang X, He Q W, Tang D S, Wang X C, Duan C G 2023 *Nano Lett.* **23** 10013

[52] Shen X W, Tong W Y, Gong S J, Duan C G 2017 *2D Mater.* **5** 011001

[53] Yang G, Li J, Ma H, Yang Y, Li C, Mao X, Yin F 2018 *Phys. Rev. B* **98** 235419

[54] Tong W Y, Gong S J, Wan X, Duan C G 2016 *Nat. Commun.* **7** 13612

[55] Fang S B, Yang Z M, Wang J H, Yang X Y, Lu J, Lee C H, Wang X T, Ang Y S 2026 *Phys. Rev. B* **113** 224407

Multi-field regulation of hidden altermagnetism and the associated valley and spin splittings in bilayer V_2SeTeO*

XUN Wei [1)†] LIU Xin [1)] ZHANG Youdong [1)] ZHOU Fan [1)]
CHEN Yufeng [1)] JIANG Qingsong [2)] YANG Xiao [2)] WU Yinzhong [3)‡]

1) (*School of Electronic Engineering, Jiangsu Vocational College of Electronics and Information, Huaian* 223003, *China*)

2) (*Faculty of Electronic Information Engineering, Huai'an University, Huaian* 223003, *China*)

3) (*School of Physical Science and Technology, Suzhou University of Science and Technology, Suzhou* 215009, *China*)

(Received 12 May 2026; revised manuscript received 19 June 2026)

Abstract

Hidden altermagnetism, characterized by zero net spin polarization but non-zero local spin polarization in two subsystems related by spatial inversion, has recently emerged as a promising route for spintronic and valleytronic applications. Here, using first-principles calculations, we systematically investigate the electronic structure, magnetic properties, and multi-field tunability of hidden altermagnetism in PT -symmetric bilayer V_2SeTeO. We show that the bilayer with a Te-Te interface, possessing PT symmetry, is energetically most stable and exhibits hidden altermagnetism with an overall spin-degenerate band structure, while each individual layer displays pronounced local spin splitting. By applying interlayer sliding, we find that the $A'B_1$ and $A'B_2$ stacking configurations induce spontaneous valley polarizations with opposite signs, reaching a valley splitting of 35.5 meV at the valence band maximum, which enables a switchable anomalous valley Hall effect. Furthermore, uniaxial strain along the in-plane direction effectively tunes the valley splitting in the AA stacking, achieving a maximum of 102 meV under 2% compressive strain. In contrast, a perpendicular electric field linearly modulates the spin splitting at both the valence and conduction band edges (up to ~80 meV at 0.06 V/Å), and at higher fields (up to 0.2 V/Å) it drives the system into a nodal-loop semimetallic state protected by mirror symmetry. Additionally, when spin–orbit coupling is included, an in-plane magnetization along the x or y direction breaks the $M_{xy}T$ symmetry and induces a weak valley polarization of approximately 8–10 meV, whose sign can be reversed by switching the magnetization direction. Our results establish bilayer V_2SeTeO as a versatile platform for the multi-field control of hidden altermagnetism and provide concrete strategies for designing low-power, non-volatile valleytronic and spintronic devices.

Keywords: hidden altermagnetism, bilayer stacking, multi-field regulation, valley splitting and spin splitting, anomalous Hall effect, first-principles calculations

DOI: 10.7498/aps.75.20260681 **CSTR:** 32037.14.aps.75.20260681

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12404076), the Qing Lan Project in Jiangsu Province, China, the Natural Science Research Project of the Jiangsu Higher Education Institutions, China (Grant No. 25KJB140006), and the Huai'an Science and Technology Plan, China (Grant Nos. HAB2024069, HAG202405, HAB2024047, HAB2025026).

† Corresponding author. E-mail: wxun@jsei.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: yzwu@usts.edu.cn

物理学报 Acta Physica Sinica

Chinese Physical Society

Institute of Physics, CAS

双层V_2SeTeO中隐藏交错磁性的多场调控及其能谷与自旋劈裂

荀威 刘昕 张有东 周帆 陈玉凤 蒋青松 杨潇 吴银忠

Multi-field regulation of hidden altermagnetism and the associated valley and spin splittings in bilayer V_2SeTeO

XUN Wei LIU Xin ZHANG Youdong ZHOU Fan CHEN Yufeng JIANG Qingsong YANG Xiao WU Yinzhong

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 75, 230701 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260681
CSTR: 32037.14.aps.75.20260681
在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.75.20260681
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in