



不同方向局域交换场对锡烯自旋运输的影响

郑军 马力 相阳 李春雷 袁瑞阳 陈菁

Effects of local exchange field in different directions on spin transport of stanene

Zheng Jun Ma Li Xiang Yang Li Chun-Lei Yuan Rui-Yang Chen Jing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 147201 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220277

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220277>

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

局域交换场和电场调控的锗烯纳米带自旋过滤效应

Spin filter effect of germanene nanoribbon controlled by local exchange field and electric field

物理学报. 2019, 68(18): 187302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190817>

高性能太赫兹发射: 从拓扑绝缘体到拓扑自旋电子

High-performance THz emission: From topological insulator to topological spintronics

物理学报. 2020, 69(20): 200704 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200680>

拓扑绝缘体中的超快电荷自旋动力学

Ultrafast charge and spin dynamics on topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191433>

三维拓扑绝缘体antidot阵列结构中的磁致输运研究

Magnetotransport in antidot arrays of three-dimensional topological insulators

物理学报. 2018, 67(4): 047301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172346>

强三维拓扑绝缘体与磁性拓扑绝缘体的角分辨光电子能谱学研究进展

Angle resolved photoemission spectroscopy studies on three dimensional strong topological insulators and magnetic topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191450>

基于蜂窝晶格声子晶体的双频带声拓扑绝缘体

Dual-band acoustic topological insulator based on honeycomb lattice sonic crystal

物理学报. 2019, 68(22): 224301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190951>

不同方向局域交换场对锡烯自旋运输的影响*

郑军^{1)†} 马力¹⁾ 相阳¹⁾ 李春雷^{2)‡} 袁瑞昉³⁾ 陈箐³⁾

1) (渤海大学物理科学与技术学院, 锦州 121013)

2) (首都师范大学初等教育学院, 北京 100048)

3) (首都师范大学物理系, 北京 100048)

(2022年2月14日收到; 2022年3月17日收到修改稿)

利用非平衡格林函数方法, 理论研究了多种组合形式的局域交换场对锡烯纳米带自旋输运性质的影响. 研究表明锡烯自旋相关电导、边缘态和体能带都显著地依赖于不同区域交换场的方向和强度. 在 [I: $\pm Y$, II: $+Z$, III: $\pm Y$] 方向交换场的共同作用下, 边缘态受 Y 方向交换场影响形成带隙, 禁带宽度与交换场强度 M 成正比, 在 $-M < E < M$ 能量范围电导值为 0. 对上下边缘区域同时施加 $+Z$ 或 $-Z$ 方向的交换场时, 边缘态和体能带都发生较强的自旋劈裂, 自旋向上和向下能带沿相反方向向高能量区域移动, 增大交换场的强度电导自旋极化的范围将从高能量扩展到低能量区域. 当交换场方向为 [I: $\mp Z$, II: $\pm Y$, III: $\pm Z$] 时, 低能区自旋相关的电导保持电子空穴对称性, 不同交换场强度条件下, 自旋相关电导都在相同的能量范围 $-\lambda_{so} < E < \lambda_{so}$ 保持电导平台 $G_{\sigma} = e^2/h$.

关键词: 自旋运输, 局域交换场, 拓扑绝缘体

PACS: 72.25.-b, 73.63.-b

DOI: 10.7498/aps.71.20220277

1 引言

自石墨烯在 2004 年被成功制备以来^[1,2], 伴随着体系维度降低所带来的新奇特性, 长程有序的二维纳米材料引起科研人员广泛关注^[3]. 锡烯是锡原子以蜂窝状翘曲结构排列而成的二维单原子层薄膜. 2009 年 Cahangirov 等^[4] 利用第一性原理计算明确了原子之间较大的成键间距会削弱 π 电子交叠, 具有 D_{3d} 点群对称性的六角蜂窝状翘曲结构在能量上最稳定. 同年 Sahin 等^[5] 理论研究了锡烯的晶格结构特征, 研究发现锡原子可形成稳定的低翘曲蜂窝状结构. 2011 年 Liu 等^[6] 的理论计算结果表明 sp^2 和 sp^3 杂化轨道混合构成的低翘曲结构可

增强自旋-轨道耦合, 锡烯具有非平庸的拓扑特性^[7]. 2013 年 Xu 等^[8] 通过第一性原理计算研究了应变和边缘修饰对锡烯拓扑能隙的影响, 发现通过化学修饰可以调控锡烯拓扑态的自由度, 锡烯的拓扑能隙可以达到 300 meV. 较大的体能隙使得基于锡烯等类石墨烯结构可以用于较高温度条件下的二进制逻辑操作, 实现“开”与“关”两种状态, 多种基于 IV 主族拓扑绝缘体的晶体管模型已被提出并得到研究^[9-16].

块体锡材料中的原子是以 sp^3 杂化的金刚石结构排序, 原子之间的共价键很难被破坏, 无法通过简单的机械剥离方法获得单原子层锡薄膜. 超高真空环境下, 在衬底上利用分子束外延生长是制备锡烯采用的主要方法. 2015 年 Zhu 等^[17] 在 Bi_2Te_3

* 国家自然科学基金 (批准号: 12174038, 11604021)、辽宁省“兴辽英才”青年拔尖人才项目 (批准号: XLYC2007141) 和北京市教育委员会科技计划面上项目 (批准号: KM201810028022) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhengjun@bhu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: licl@cmu.edu.cn

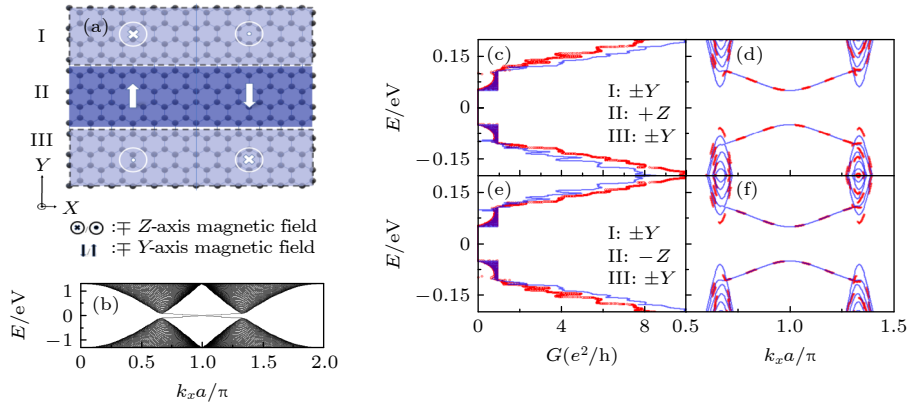


图 1 (a) 交换场作用下的锡烯纳米带俯视图. 图中沿 Y 轴方向将锡烯等分为 I, II, III 3 个区域, 并分别对这 3 个区域施加 [I: $+Z$, II: $+Y$, III: $-Z$] 和 [I: $-Z$, II: $-Y$, III: $+Z$] 方向组合的交换场; (b) 无外场作用时锡烯的电子能带结构; 铁磁交换场按照 (c) [I: $\pm Y$, II: $+Z$, III: $\pm Y$] 和 (e) [I: $\pm Y$, II: $-Z$, III: $\pm Y$] 分布时自旋相关电导随费米能 E 的变化; (d) 交换场强度为 $M = \lambda_{so}/2$, 方向为 (d) [I: $\pm Y$, II: $+Z$, III: $\pm Y$] 及 (f) [I: $\pm Y$, II: $-Z$, III: $\pm Y$] 时的电子能带结构, 图中红色圈线和蓝色实线分别对应自旋向上和自旋向下的电子

Fig. 1. (a) Top view of a stanene nanoribbon with local exchange field, where stanene is equally divided into three regions, (i.e., I, II, and III) along the Y -axis, and exchange fields in the directions of [I: $+Z$, II: $+Y$, III: $-Z$] and [I: $-Z$, II: $-Y$, III: $+Z$] are applied to these three regions respectively. (b) Energy-band diagram of stanene without external field. Spin dependent conductance G_σ as a function of the Fermi energy E with the ferromagnetic exchange fields distributed according to (c) [I: $\pm Y$, II: $+Z$, III: $\pm Y$] and (e) [I: $\pm Y$, II: $-Z$, III: $\pm Y$]. Energy-band diagram of stanene with the strength of external field $M = \lambda_{so}/2$, the exchange field directions are (d) [I: $\pm Y$, II: $+Z$, III: $\pm Y$] and (f) [I: $\pm Y$, II: $-Z$, III: $\pm Y$]. The red circle-lines and blue solid-lines correspond to spin-up and spin-down electrons, respectively.

(111) 衬底上成功制备了锡烯. 2017 年 Gou 等^[18] 在 Sb(111) 表面实现了锡烯的制备. 2018 年基于 PbTe(111), InSb(111), Ag(111) 以及 Cu(111) 衬底, Zang 等^[19]、Xu 等^[20]、Yuhara 等^[21]、Deng 等^[22] 相继成功制备了翘曲和平面结构的锡烯. 目前科研人员已经在不同的金属和半导体表面实现了锡烯的生长制备^[23–26], 尽管耦合相互作用以及能带杂化引起了不同周期的结构重构, 但实验结果依然在一定程度上证实了理论上所预言的拓扑绝缘体本征物性.

近些年, 人们对锡烯的电学^[27–34]、光学^[15,35–37]、磁学^[38–42] 以及热学^[43–47] 性质进行了一系列研究. 本文从理论上研究局域铁磁交换场对锡烯纳米带边缘态和体能带自旋输运性质的影响. 如图 1(a) 所示, 将锡烯纳米带的中间区域分成上 (I)、中 (II)、下 (III) 3 个区域, 对 3 个区域分别施加 Y 和 Z 轴方向的交换场, 重点讨论不同方向局域交换场的组合形式和强度对电导和能带的调控.

2 研究方法

在紧束缚近似下, 基于 Kane-Mele 模型在 3 个区域分别施加 $\pm Y$ 轴和 $\pm Z$ 轴方向交换场的锡

烯哈密顿量可以表示为^[7,48–51]

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + i \frac{\lambda_{so}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma \bar{\sigma}} v_{ij} c_{i\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma \bar{\sigma}}^z c_{j\bar{\sigma}} \\
 & + M \sum_{i=1}^{N_y/3} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger (+\sigma_y) c_{i\sigma} \\
 & + M \sum_{i=N_y/3+1}^{2N_y/3} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger (-\sigma_z) c_{i\sigma} \\
 & + M \sum_{i=2N_y/3+1}^{N_y} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger (-\sigma_y) c_{i\sigma}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

式中前两项表示未受外场作用的锡烯, t 和 λ_{so} 为最近邻锡原子之间的电子跃迁能和有效自旋轨道耦合强度; $c_{i\sigma}^\dagger$ 和 $c_{j\sigma}$ 分别为电子的产生和湮灭算符, $c_{i\sigma}^\dagger (c_{j\bar{\sigma}})$ 表示在第 $i(j)$ 个晶格格点产生 (湮灭) 一个自旋向上 $\sigma = +1$ (向下 $\sigma = -1$) 的电子; $\langle ij \rangle$ 和 $\langle\langle ij \rangle\rangle$ 表示求和遍布所有最近邻和次近邻格点; 符号函数 v_{ij} 是与位置相关的 Haldane 相因子^[52,53], 在数值计算中当次近邻相互作用沿顺时针方向时 $v_{ij} = +1$, 反之 $v_{ij} = -1$. (1) 式中的第 3–5 项分别表示对上 ($i \in [1, N_y/3]$), 中 ($i \in [N_y/3 + 1, 2N_y/3]$), 下 ($i \in [2N_y/3 + 1, N_y]$) 3 个区域分别施加方向为

+Y, -Z 和 -Y, 强度为 M 的铁磁交换场, 其中 N_y 为纳米带边界沿 Y 轴方向的锡原子数, σ_y 和 σ_z 为 σ_z 表象的泡利矩阵. 局部交换场可以通过铁磁体的邻近效应引入^[54], 如 I 区域的交换场, 可以通过将 Fe 原子沉积到硅烯纳米带上边缘的表面或将硅烯纳米带部分沉积到铁磁绝缘衬底上, 交换场的方向可通过外场调节. 利用 Bloch-Wannier 变换将 (1) 式中的产生和湮灭算符变换到 Bloch 表象, $c_{j_y\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{k \in BZ} c_{k\sigma}^\dagger e^{ikj_y}$, $c_{j_y\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{k \in BZ} c_{k\sigma} e^{-ikj_y}$, 其中 j_y 对应 Y 轴方向的晶格格点位置. 通过求解本征值方程可以计算得到不同方向铁磁交换场条件下的锡烯电子能带结构.

利用非平衡格林函数和 Landauer-Buttiker 公式, 零温度条件下与半无限长锡烯导线耦合的锡烯纳米带自旋相关电导可以表示为^[55,56]

$$G_\sigma(E) = \frac{e^2}{h} \text{Tr}[\Gamma_{L\sigma}(E)G_\sigma^r(E)\Gamma_{R\sigma}(E)G_\sigma^a(E)], \quad (2)$$

式中 $\Gamma_{\alpha\sigma}(E) = i[\Sigma_{\alpha\sigma}^r(E) - \Sigma_{\alpha\sigma}^a(E)]$ 为线宽函数, $\alpha = L, R$ 分别对应左右导线区域. 自能函数 $\Sigma_{\alpha\sigma}^{r(a)}(E) = H_{\alpha\alpha}g_{\alpha\sigma}^{r(a)}(E)H_{\alpha\alpha}$ 可以在求解表面格林函数 $g_{\alpha\sigma}^{r(a)}(E)$ 的基础上计算得出. 在计算表面格林函数时, 本文假定导线半无限长且具有周期性, 将导线沿着 Y 轴方向划分成层. 与器件相连的导线末端锡原子层的哈密顿量用矩阵 \mathbf{H}_{00} 表示, 用矩阵 \mathbf{H}_{01} 表示层间耦合的哈密顿量, 并以此构造一个 $2N \times 2N$ 的矩阵 $\begin{bmatrix} \mathbf{H}_{01}^{-1}(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{00}) & -\mathbf{H}_{01}^{-1}\mathbf{H}_{01}^\dagger \\ \mathbf{I} & 0 \end{bmatrix}$, 求解矩阵的本征值和本征矢量, 并按本征值绝对值从小到大排列本征矢 $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_{2N}) = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & \mathbf{S}_2 \\ \mathbf{S}_3 & \mathbf{S}_4 \end{bmatrix}$, 则表面格林函数可表示为 $g_{\alpha\sigma}^r(E) = [(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{00}) - \mathbf{H}_{01}\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2^{-1}]^{-1}$ ^[57-59], 式中 \mathbf{I} 为单位矩阵. (2) 式中的 $G_\sigma^r(E) = [G_\sigma^a(E)]^\dagger = [E\mathbf{I} - \mathbf{H} - \Sigma_{L\sigma}^r - \Sigma_{R\sigma}^r]^{-1}$ 为整个系统对应的推迟格林函数, \mathbf{H} 为 (1) 式给出的不同方向交换场作用区域的哈密顿量矩阵.

3 结果与讨论

在数值计算中交换场作用区域的 X 轴方向和 Y 轴方向的锡原子数固定为 $N_x = N_y = 256$. 最近邻锡原子之间的电子跃迁能和有效自旋轨道耦合强度分别为 $t = 1.3$ eV 和 $\lambda_{so} = 100$ meV^[7,8]. 不同方向交换场的强度和系统温度分别为 $M = \lambda_{so}/2 =$

50 meV 和 $T = 0$ K.

首先讨论 I (III) 区域施加沿 Y 轴方向, II 区域施加沿 Z 轴方向的交换场对自旋相关电导和电子能带结构的影响. 图 1(c) 和图 1(e) 分别给出了中间区域交换场沿着 +Z 和 -Z 两种情况下自旋相关电导随费米能 E 的变化. 通过两幅图的对比可以看出, 当费米能 E 位于 $-M$ 至 $+M$ 窗口时, 自旋向上和向下电导值都为 0, 此时的锡烯可以看成禁带宽度为 $2M$ 的半导体. 能量 $E > +M$ 的范围内 σ 方向自旋电导 G_σ 与能量 $E < -M$ 的范围内 $\bar{\sigma}$ 方向自旋电导 $G_{\bar{\sigma}}$ 都关于能量 $E = 0$ 对称, 虽然局域交换场按照 $[\pm Y, +Z, \pm Y]$ 和 $[\pm Y, -Z, \pm Y]$ 两种组合形式分布时总电导 $G = G_\uparrow + G_\downarrow$ 始终保持电子空穴对称 $G(-E) = G(E)$, 但是深能级区域相同能量条件下的自旋相关电导明显不同. 当交换场按照 $[\pm Y, +Z, \pm Y]$ 分布时, $E > M$ ($E < -M$) 区域的自旋极化率为 $P = (G_\uparrow - G_\downarrow)/(G_\uparrow + G_\downarrow) > 0$ ($P < 0$). 交换场方向为 [I: $\pm Y$, II: $-Z$, III: $\pm Y$] 时, $E > 0$ 能量范围的极化率与 [I: $\pm Y$, II: $+Z$, III: $\pm Y$] 条件下 $E < 0$ 能量范围的极化率相同.

为了更好地理解图 1(c) 和图 1(e) 中电子自旋的输运特性, 图 1(b)、图 1(d) 和图 1(f) 分别给出了不受外场作用的锡烯电极和施加交换场的中心区域的电子能带图. 从图 1(b) 可以看出, 不受外场影响时, 电子能带在 Dirac 点 K 和 K' 处形成宽度为 $2\lambda_{so}$ 的体带隙, 体带隙内的边缘态自旋简并, 并在 $(\pi, 0)$ 点相交. 在局域交换场作用下, 电子的能带结构发生显著改变, 图 1(b) 和图 1(c) 分别对应交换场按照 $[\pm Y, +Z, \pm Y]$ 和 $[\pm Y, -Z, \pm Y]$ 分布时锡烯的能带图. 磁化矢量方向垂直于纳米带的反铁磁交换场, 能够破坏时间反演对称性, 当仅有中间 (II) 区域存在交换场时, 体能带受到 +Z 方向交换场影响发生劈裂, 但边缘态不受外场影响保持自旋简并. Y 轴方向的铁磁交换场不仅可以破坏时间反演对称性, 还可以破坏自旋对称性, 在 I 和 III 区域引入 Y 轴方向的交换场并不会破坏电子能级的二重简并, 但是可以使边缘态在体带隙内打开宽度为 $2M$ 的带隙. 因为 $\pm Y$ 轴方向外场对能带的作用没有区别, 所以 $[+Y, +Z, +Y]$, $[+Y, +Z, -Y]$, $[-Y, +Z, +Y]$, $[-Y, +Z, -Y]$ 4 种外场组合形式的能带结构是等价的. 在对图 1(a) 所示的 I—III 3 个区域施加 $[\pm Y, +Z, \pm Y]$ 或 $[\pm Y, -Z, \pm Y]$ 方向的交换场时体能带发生自旋劈裂, 边缘态保持简

并形成大小为 $2M$ 的能隙 (如图 1(b) 和图 1(c) 所示). 因此当能量处于 $-M < E < +M$ 时电子无法通过纳米带, 自旋相关电导 $G_\sigma = 0$. 当 $E > M$ 或 $E < -M$ 时, $G_\uparrow \neq G_\downarrow$, 并且由于导线区域 (图 1(b)) 与交换场作用区域 (图 1(b) 和图 1(c)) 能带不匹配, 阶梯状电导平台退变成一系列共振峰.

接下来讨论在 I (III) 区域引入沿 $\pm Z$ 轴方向, II 区域引入沿 Y 轴方向交换场对电导和能带的影响. 图 2(a) 为交换场按照 $[+Z, \pm Y, +Z]$ 或 $[-Z, \pm Y, -Z]$ 分布时锡烯的能带图. 通过与图 1(d) 和图 1(f) 比较易见, I (III) 与 II 区域交换场互换方向后, 边缘态和体能带都将发生自旋劈裂. 当 I (III) 区域交换场为 $+Z$ 方向时自旋向上电子形成的能带整体上移, 边缘态交叉点由 $(\pi, 0)$ 移动到 (π, M) , 而自旋向下电子对应的能带整体向下移动, 边缘态交叉点由 $(\pi, 0)$ 移动到 $(\pi, -M)$. 虽然边缘态发生自旋劈裂, 但是在体带隙范围依然存在自旋向上和自旋向下的边缘态, 因此图 2(c) 中 $-M < E < M$ 能量窗口出现 $G_\uparrow = G_\downarrow = e^2/h$ 与 $G = G_\uparrow + G_\downarrow = 2e^2/h$ 的电导平台. 通过调整交换场的方向可以改变电子

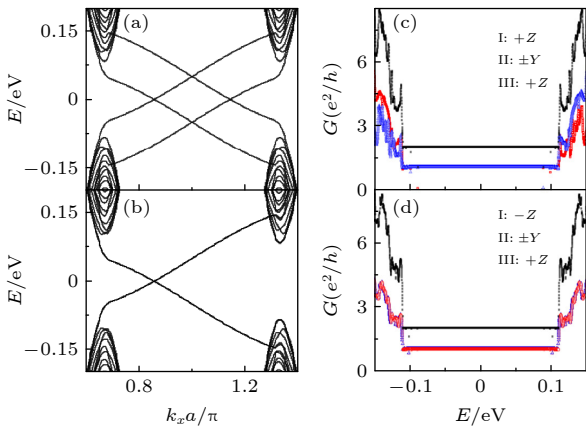


图 2 交换场强度 $M = \lambda_{so}/2$, 方向为 (a) [I: $+Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$] 及 (b) [$-Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$] 时电子能带结构; 交换场按照 (c) [I: $+Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$] 和 (d) [$-Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$] 分布时电导 G 随费米能 E 的变化, 图中红色圈线、蓝色三角线和黑色点线分别对应自旋向上、自旋向下以及总的电导

Fig. 2. Energy-band diagram of stanene with the strength of external field $M = \lambda_{so}/2$, the exchange field directions (a) [I: $+Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$] and (b) [$-Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$]. Conductance G as a function of the Fermi energy E with the ferromagnetic exchange fields distributed according to (c) [I: $+Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$] and (d) [$-Z$, II: $\pm Y$, III: $+Z$]. The red circle-lines, blue triangle-lines and black dot-lines correspond to spin-up, spin-down, and total conductance, respectively.

自旋输运性质, 将 I (III) 区域的交换场调节到 $-Z$ 方向, 图 2(c) 中红色虚线 (蓝色点线) 则对应自旋向下 (自旋向上) 电导.

图 2(b) 给出交换场按照 $[-Z, \pm Y, +Z]$ 分布时锡烯的能带图. 可以看出 I (III) 区域交换场方向相反时, 边缘态保持自旋简并, 边缘态交点仍对应能量 $E = 0$ 但是向 K 点偏移, 当交换场按照 $[-Z, \pm Y, +Z]$ 分布时边缘态交点则向 K' 点偏移, 偏移的程度与交换场强度 M 有关, 当 $M = \lambda_{so}$ 时交叉点位于 K 或 K' 点. $\pm Y$ 方向交换场可以引起深能级区域能带发生自旋劈裂, 但同等场强条件下能带劈裂程度弱于 Z 方向交换场的作用. 因此如图 2(d) 所示, 体带隙及其附近区域不同自旋方向的电导值近似相等, 自旋极化率 $P \approx 0$, 不同自旋方向的电导 G_σ 及总电导 G 关于 $E = 0$ 对称.

图 3 以自旋向上电导为例, 讨论交换场强度 M 变化对自旋电子运输的影响. 图 3(a) 交换场方

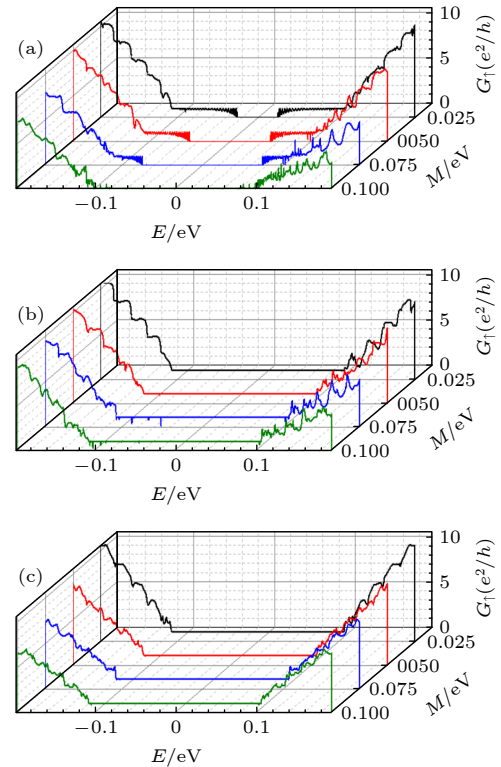


图 3 交换场方向为 (a) [I: $+Y$, II: $+Z$, III: $+Y$], (b) [I: $+Z$, II: $+Y$, III: $+Z$], (c) [I: $-Z$, II: $+Y$, III: $+Z$], 交换场强度参数 M 分别取 0.025, 0.050, 0.075, 0.100 eV 时, 自旋向上电导 G_\uparrow 随费米能 E 的变化

Fig. 3. Conductance G as a function of the Fermi energy E with different values of exchange field parameter $M = 0.025, 0.050, 0.075, 0.100$ eV for the exchange field directions are (a) [I: $+Y$, II: $+Z$, III: $+Y$], (b) [I: $+Z$, II: $+Y$, III: $+Z$], (c) [I: $-Z$, II: $+Y$, III: $+Z$].

向为 [I: +Y, II: +Z, III: +Y], 交换场强度分别为 $M = 0.025, 0.05, 0.075, 0.1$ eV, 从图 3(a) 可以看出, 改变 I 和 III 区域 +Y 方向交换场强度可以有效地调节带隙大小, 随着场强的增强, 边缘态带隙的宽度随之增加, 在 $-M < E < M$ 的能量范围自旋相关电导 $G_\sigma = 0$. 图 3(b) 对应的交换场方向为 [I: +Z, II: +Y, III: +Z], 此时随着交换场的增强, 自旋向上电子对应的能谷向能量 $E = 0$ 区间移动的程度加强, 逐渐进入无外场作用时的体带隙, 在 $-M < E < 0$ 的范围自旋向上的电导平台逐渐被破坏, 形成一系列的共振峰, 但是能量在 $0 < E < M$ 范围内的自旋向上电导平台不受影响. 图 3(c) 给出了交换场方向为 [I: -Z, II: +Y, III: +Z] 条件下的自旋向上电导. 可以看出, 当交换场按 [I: -Z, II: +Y, III: +Z] 分布时电导平台并不受交换场强度变换影响, 在 $-0.1 \sim +0.1$ eV 范围保持 $G_\sigma = e^2/h$. 随着交换场强度的增强, 体能带的劈裂程度增大, 外场作用区间与左右电极的能带失配程度提高, $E < -M$ 和 $E > M$ 能量范围的电导值随着交换场强度的增加而降低.

4 结 论

本文理论研究了交换场按 [I: $\pm Y$, II: +Z, III: $\pm Y$], [I: $\pm Y$, II: -Z, III: $\pm Y$], [I: +Z, II: $\pm Y$, III: +Z], [I: -Z, II: $\pm Y$, III: +Z] 分布时锡烯纳米带的自旋输运. 研究表明通过改变不同区域交换场的方向和强度可以有效调节边缘态和体能带电子的输运性质和强度. 当交换场方向为 [I: $\pm Y$, II: +Z, III: $\pm Y$] 时, 边缘态保持简并打开能隙, 边缘态能隙的宽度随着交换场强度的增加而增大, 在 $-M < E < M$ 的能量范围 $G_\sigma = 0$, 此时锡烯可以看成禁带宽度为 $2M$ 的半导体. II 区域 +Z 方向的交换场可以使得体能带发生较强的自旋劈裂, 能量 $E > M$ 范围自旋极化率 $P > 0$. 当交换场方向为 [I: $\pm Y$, II: -Z, III: $\pm Y$] 时, 能隙宽度保持不变, $E > M$ 条件下的自旋极化率 $P < 0$. 施加 [I: +Z, II: $\pm Y$, III: +Z] 方向的交换场可以使得自旋向上和向下电子的能带整体向高能量和低能量区域移动, 提高交换场的强度 K 和 K' 谷能带进入无外场作用时的体带隙, $G_\sigma = e^2/h$ 的电导平台被破坏形成一系列小的共振峰. 当交换场方向为 [I: -Z, II: $\pm Y$, III: +Z] 时, 边缘态向 K' 点移动, 体

能带发生自旋劈裂, 但是 II 区域相同强度 Y 方向的交换场引起的劈裂程度明显弱于 +Z 方向的交换场, 体带隙附近区域自旋极化率近似为 0. 增大交换场强度 M , $-\lambda_{so} < E < \lambda_{so}$ 能量窗口内的电导平台不受影响, 但是 $E < -M$ 和 $E > M$ 能量范围的电导受到抑制.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [3] Chang H, Wang H, Song K K, Zhong M, Shi L B, Qian P 2021 *J. Phys.: Condens. Matter* **34** 013003
- [4] Cahangirov S, Topsakal M, Akturk E, Sahin H, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 236804
- [5] Sahin H, Cahangirov S, Topsakal M, Bekaroglu E, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155453
- [6] Liu C C, Feng W X, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 076802
- [7] Liu C C, Jiang H, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195430
- [8] Xu Y, Yan B H, Zhang H J, Wang J, Xu G, Tang P Z, Duan W H, Zhang S C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 136804
- [9] Ni Z, Liu Q, Tang K, Zheng J, Zhou J, Qin R, Gao Z, Yu D, Lu J 2012 *Nano Lett.* **12** 113
- [10] Ezawa M 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 172103
- [11] Kaneko S, Tsuchiya H, Kamakura Y, Mori N, Ogawa M 2014 *Appl. Phys. Express* **7** 035102
- [12] Ni Z Y, Zhong H X, Jiang X H, Quhe R G, Luo G F, Wang Y Y, Ye M, Yang J B, Shi J J, Lu J 2014 *Nanoscale* **6** 7609
- [13] Zhai X C, Jin G J 2016 *J. Phys.: Condens. Matter* **28** 355002
- [14] Katayama Y, Yamauchi R, Yasutake Y, Fukatsu S, Ueno K 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 122101
- [15] Zheng J, Xiang Y, Li C L, Yuan R Y, Chi F, Guo Y 2020 *Phys. Rev. Appl.* **14** 034027
- [16] Zheng J, Xiang Y, Li C L, Yuan R Y, Chi F, Guo Y 2021 *Phys. Rev. Appl.* **16** 024046
- [17] Zhu F F, Chen W J, Xu Y, Gao C L, Guan D D, Liu C H, Qian D, Zhang S C, Jia J F 2015 *Nat. Mater.* **14** 1020
- [18] Gou J, Kong L J, Li H, Zhong Q, Li W B, Cheng P, Chen L, Wu K H 2017 *Phys. Rev. Mater.* **1** 054004
- [19] Zang Y Y, Jiang T, Gong Y, Guan Z Y, Liu C, Liao M H, Zhu K J, Li Z, Wang L L, Li W, Song C L, Zhang D, Xu Y, He K, Ma X X, Zhang S C 2018 *Adv. Funct. Mater.* **28** 1802723
- [20] Xu C Z, Chan Y H, Chen P, Wang X X, Flototto D, Hlevyack J A, Bian G, Mo S K, Chou M Y, Chiang T C 2018 *Phys. Rev. B* **97** 035122
- [21] Yuhara J, Fujii Y, Nishino K, Isobe N, Nakatake M, Xian L, Rubio A, Le-Lay G 2018 *2D Mater.* **5** 025002
- [22] Deng J L, Xia B Y, Ma X C, Chen H Q, Shan H, Zhai X F, Li B, Zhao A D, Xu Y, Duan W H, Zhang S C, Wang B, Hou J G 2018 *Nat. Mater.* **17** 1081
- [23] Liu Y, Gao N, Zhuang J, Liu C, Wang J, Hao W, Dou S X, Zhao J, Du Y 2019 *J. Phys. Chem. Lett.* **10** 1558
- [24] Pang W, Nishino K, Ogikubo T, Araidai M, Nakatake M, Le Lay G, Yuhara J 2020 *Appl. Surf. Sci.* **517** 146224
- [25] Li J, Lei T, Wang J, Wu R, Qian H, Ibrahim K 2020 *Appl.*

- Phys. Lett.* **116** 101601
- [26] Dhungana D S, Grazianetti C, Martella C, Achilli S, Fratesi G, Molle A 2021 *Adv. Funct. Mater.* **31** 2102797
- [27] Ezawa M 2015 *J. Phys. Soc. Jpn.* **84** 121003
- [28] Wang D, Chen L, Wang X, Cui G, Zhang P 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 26979
- [29] Kuang Y D, Lindsay L, Shi S Q, Zheng G P 2016 *Nanoscale* **8** 3760
- [30] van den Broek B, Houssa M, Iordanidou K, Pourtois G, Afanas'ev V V, Stesmans A 2016 *2D Mater.* **3** 015001
- [31] Nakamura Y, Zhao T, Xi J, Shi W, Wang D, Shuai Z 2017 *Adv. Electron. Mater.* **3** 1700143
- [32] Shen L, Lan M, Zhang X, Xiang G, 2017 *RSC Adv.* **7** 9840
- [33] Hattori A, Tanaya S, Yada K, Araidai M, Sato M, Hatsugai Y, Shiraishi K, Tanaka Y 2017 *J. Phys.: Condens. Matter* **29** 115302
- [34] Fadaie M, Shahtahmassebi N, Roknabad M R, Gulseren O 2018 *Phys. Lett. A* **382** 180
- [35] Chaves A J, Ribeiro R M, Frederico T, Peres N M R 2017 *2D Mater.* **4** 025086
- [36] M. Ezawa 2012 *Phys. Rev. B* **86** 161407
- [37] Salazar C, Muniz R A, Sipe J E 2017 *Phys. Rev. Mater.* **1** 054006
- [38] Rachel S, Ezawa M 2014 *Phys. Rev. B* **89** 195303
- [39] Lado J L, Fernandez-Rossier J 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 027203
- [40] Li S S, Zhang C W 2016 *Mater. Chem. Phys.* **173** 246
- [41] W. Xiong, C. Xia, T. Wang, Y. Peng, Y. Jia 2016 *J. Phys. Chem. C* **120** 10622
- [42] Krompiewski S, Cuniberti G 2017 *Phys. Rev. B* **96** 155447
- [43] Zhou H, Cai Y, Zhang G, Zhang Y W 2016 *Phys. Rev. B* **94** 045423
- [44] Peng B, Zhang H, Shao H, Xu Y, Ni G, Zhang R, Zhu H 2016 *Phys. Rev. B* **94** 245420
- [45] Peng X F, Zhou X, Jiang X T, Gao R B, Tan S H, Chen K Q 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 054302
- [46] Noshin M, Khan A I, Subrina S 2018 *Nanotechnology* **29** 185706
- [47] Zheng J, Li C L, Wang X M, Yuan R Y 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 147301 (in Chinese) [郑军, 李春雷, 王小明, 袁瑞昉 2021 物理学报 **70** 147301]
- [48] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [49] Ezawa M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 055502
- [50] Zheng J, Chi F, Guo Y 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 112404
- [51] Zheng J, Chi F, Guo Y 2018 *Phys. Rev. Appl.* **9** 024012
- [52] Haldane F D M 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2015
- [53] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [54] Williams J R, Carlo L D, Marcus C M 2007 *Science* **317** 638
- [55] Pastawski H M 1991 *Phys. Rev. B* **44** 6329
- [56] Datta S 1992 *Phys. Rev. B* **45** 1347
- [57] Lee D H, Joannopoulos J D 1981 *Phys. Rev. B* **23** 4997
- [58] Sancho M P L, Sancho J M L, Rubio J 1984 *J. Phys. F: Met. Phys.* **14** 1205
- [59] Sancho M P L, Sancho J M L, Sancho J M L, Rubio J 1985 *J. Phys. F: Met. Phys.* **15** 851

Effects of local exchange field in different directions on spin transport of stanene^{*}

Zheng Jun^{1)†} Ma Li¹⁾ Xiang Yang¹⁾ Li Chun-Lei^{2)‡}
Yuan Rui-Yang³⁾ Chen Jing³⁾

1) (*College of Physics Science and Technology, Bohai University, Jinzhou 121013, China*)

2) (*College of Elementary Education, Capital Normal University, Beijing 100048, China*)

3) (*Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China*)

(Received 14 February 2022; revised manuscript received 17 March 2022)

Abstract

Topological insulator is a new quantum state of matter in which spin-orbit coupling gives rise to topologically protected gapless edge or surface states. The nondissipation transport properties of the edge or surface state make the topological device a promising candidate for ultra-low-power consumption electronics. Stanene is a type of two-dimensional topological insulator consisting of Sn atoms arranged similarly to graphene and silicene in a hexagonal structure. In this paper, the effects of various combinations of local exchange fields on the spin transport of stanene nanoribbons are studied theoretically by using the non-equilibrium Green's function method. The results show that the spin-dependent conductance, edge states, and bulk bands of stanene are significantly dependent on the direction and strength of the exchange field in different regions. Under the joint action of the exchange fields in [I: $\pm Y$, II: $+Z$, III: $\pm Y$] direction, the edge states form a band-gap under the influence of the Y -direction exchange field. The band-gap width is directly proportional to the exchange field strength M , and the conductance is zero in an energy range of $-M < E < M$. When the exchange fields in the direction of $+Z$ or $-Z$ are applied, respectively, to the upper edge region and the lower edge region at the same time, the spin-up energy band and the spin-down energy band move to a high energy region in opposite directions, and strong spin splitting occurs in the edge state and bulk bands. Increasing the strength of the exchange field, the range of spin polarization of conductance spreads from the high energy region to the low energy region. When the directions of the exchange field are [I: $\mp Z$, II: $\pm Y$, III: $\pm Z$], the edge states are spin degenerate, but the weak spin splitting occurs in the bulk bands. Under the condition of different exchange field strengths, the spin-dependent conductance maintains a conductance platform of $G_\sigma = e^2/h$ in the same energy range of $-\lambda_{so} < E < \lambda_{so}$.

Keywords: spin transport, local exchange field, topological insulator

PACS: 72.25.-b, 73.63.-b

DOI: 10.7498/aps.71.20220277

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12174038, 11604021), the Revitalization Talents Program of Liaoning Province, China (Grant No. XLYC2007141), and the Science Technology Foundation from Education Commission of Beijing, China (Grant No. KM201810028022).

[†] Corresponding author. E-mail: zhengjun@bhu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: licl@cnu.edu.cn