

铁电极化翻转对硅烯异质结中电子性质的调控*

丁俊^{1)†} 文黎巍¹⁾ 李瑞雪¹⁾ 张英^{2)‡}

1) (河南工程学院理学院, 郑州 451191)

2) (北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2022年4月25日收到; 2022年5月21日收到修改稿)

硅烯是硅原子蜂窝状排列构成的二维材料, 由于其层内硅原子不在同一平面上而易受到电场等调控, 近年来成为理论和实验研究的一个热点. 借助于第一性原理计算方法, 详细研究了硅烯和二维铁电材料 In_2S_3 单层材料异质结的堆垛形式和电子结构. 计算结果表明, 硅烯和 In_2S_3 可以形成稳定的异质结, In_2S_3 衬底的自发铁电极化对硅烯能带有显著调控作用. 铁电极化方向向上时, 自发极化电场和衬底的共同作用在狄拉克点打开能隙, K 和 K' 点贝利曲率符号相反, 对应能谷霍尔效应态. 铁电极化方向向下时, 硅烯和 In_2S_3 之间间距变小, 费米能级有能带穿过, 对应金属态. 研究结果对铁电调控硅烯二维异质结提供参考, 为硅烯异质结在信息存储领域的应用指明方向.

关键词: 硅烯, 铁电性质, 异质结, 能谷霍尔效应**PACS:** 73.20.-r, 77.84.-s, 73.22.-f**DOI:** 10.7498/aps.71.20220815

1 引言

石墨烯是碳原子在二维六角格子上紧密排列形成, 相邻碳原子之间形成 sp^2 杂化轨道, π - π 键作用使得石墨烯的电子结构在布里渊区 K 和 K' 点形成狄拉克锥结构. 六角格子还具有能谷自由度, 具有很多特殊性质因而受到广泛关注, 在一定条件下可以利用能谷自由度实现能谷分辨的电流控制, 在能谷电子学领域得到应用^[1]. 与石墨烯类似, 硅烯是由单层硅原子在六角格子上排列形成的二维材料, 但与石墨烯不同的是硅烯中原胞内的两个硅原子不再处于同一平面而形成翘曲结构, 两个原子在垂直方向上有 0.44 Å 的高度差, 这种翘曲结构导致硅烯具有介于 sp^2 和 sp^3 之间的杂化轨道, 较强的面内 π - π 键仍然使其保持了狄拉克电子特性, 面外的 σ - π 键显著增强了自旋轨道耦合作用, 使

得硅烯可以实现量子化自旋霍尔效应^[2,3].

石墨烯等二维材料没有能隙, 而可调控的能隙是这类二维材料在设计和优化新型电子器件过程中的必备条件. 普通半导体材料受限晶体结构, 能隙基本不受电场影响, 电场虽然不能在单层石墨烯能带狄拉克点打开能隙, 但是在双层石墨烯里面, 电场破坏了 AB 子格子对称性, 可以在双层石墨烯里面实现连续可调控的调控能隙变化, 在石墨烯场效应管等纳米电子学器件研究方面有巨大潜力^[4,5]. 对于硅烯, 由于翘曲结构的存在, 电场不但可以直接调控单层硅烯的能隙、狄拉克电子的质量, 在不同的电场条件下还可以实现普通绝缘体和拓扑非平庸绝缘体之间的转变, 在引入磁性后, 电场还可以在硅烯中实现对自旋和能谷自由度的控制, 实现电场调控能谷分辨的量子化反常霍尔效应、量子化自旋霍尔效应等拓扑态, 加上硅烯与目前硅基微电子技术方面更好的兼容性, 为硅烯在来自旋电子

* 国家自然科学基金 (批准号: 11604078, 11835003, 11347187) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dingjun@haue.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: yingzhang@bnu.edu.cn

学和能谷电子学应用方面奠定坚实基础^[6-14].

由于硅烯不像石墨烯一样存在天然多层结构, 所以不能采用机械剥离的方法来制备. 多层大面积硅烯主要是通过银等贵金属表面外延生长来制备^[15,16], 然而金属衬底并不利于硅烯在新型纳米器件中的应用. 利用分子束外延技术, 可以实现大面积单层硅烯在二维绝缘体 MoS₂ 表面外延生长, 开辟了非金属衬底生长硅烯的先河^[17]. 最近, 实验上已经实现利用石墨烯对硅烯进行保护并构筑稳定的石墨烯-硅烯异质结^[18], 为硅烯异质结器件应用重新注入活力. 二维材料由于在一个方向上尺寸受到限制, 本身就具有奇特性质, 如果可以选用不同的二维材料堆叠形成异质结, 就有可能成为研究更多新奇物理现象的平台. 近年来大规模可控外延生长技术的进步, 推动二维材料异质结的发展, 目前已经在隧穿晶体管、光探测、发光二极管、自旋电子学等方面设计出性能优异的异质结器件^[19,20].

铁电材料一般都是绝缘体, 除了具有自发铁电极化, 还有高介电系数、高压电系数等特点, 被广泛用来作为衬底以调节二维材料性质. 在衬底极化翻转过程中, 可以实现对二维材料载流子浓度的调控, 也可以构建铁电场效应管、铁电隧道结等, 与拓扑材料构成的异质结中还可以实现对拓扑绝缘体的非易失、可逆调控^[21-26]. 最近, 二维铁电材料以 SnTe, CuInP₂S₆, In₂Se₃ 等为代表受到广泛关注, 特别是 In₂Se₃, 不但同时具有面内面外耦合在一起的自发铁电极化, 还可以在外电场作用下实现极化翻转^[27-32]. 基于此, 本文研究二维铁电材料与硅烯构成的异质结, 探讨界面效应及铁电极化翻转对硅烯有什么影响.

2 研究方法

第一性原理计算采用基于密度泛函理论和投影缀加平面波赝势方法的 VASP 软件包^[33], 计算中使用广义梯度近似 (GGA) 处理电子与电子之间的交换关联相互作用^[34]. 电子波函数采用平面波展开, 平面波截断能取为 400 eV, 布里渊区 *K* 点网格采用 12 × 12 × 1 Monkhorst-Pack 方案划分. 在不同堆垛结构计算过程中保持晶格不变但所有原子都进行弛豫, 弛豫过程采用共轭梯度方法寻找能量基态, 力的收敛标准为 0.005 eV/Å. 为了正确处理二维材料层间较弱的相互作用, 采用了 DFT-

D3 范德瓦耳斯力修正方法^[35], 同时为了避免不同周期性结构之间相互作用, 真空层选取约为 20 Å.

3 结果与讨论

In₂Se₃ 是最近发现的 III₂VI₃ 型二维铁电材料, 是由层内 Se-In-Se-In-Se 原子依次排列形成的五原子层单元通过范德瓦耳斯力作用堆垛形成的层状材料, 其块体具有非中心对称的 *R3m* 结构, 因此可以具有铁电极化. 结构优化后稳定晶格常数为 4.07 Å, In₂S₃ 晶格常数为 3.88 Å, 硅烯的晶格常数为 3.86 Å, 并且 In₂S₃ 也具有稳定的铁电结构和较强的面外电极化, 考虑到晶格匹配因素, 本文选取 1 × 1 单层 In₂S₃ 和硅烯构建异质结^[2,36]. 单层 In₂S₃ 的铁电极化为 1.26 μC·cm⁻², 与实验上观察到的 In₂Se₃ 铁电极化 0.92 μC·cm⁻² 较为接近^[37]. 考虑硅烯/In₂S₃ 异质结的两种堆垛形式, 如图 1 所示, 硅烯/In₂S₃ 异质结内最接近硅烯的 In-S 原子也形成翘曲的六角格子, AA 堆垛是这两个 In 和 S 原子刚好位于硅烯里面不同子格子对应硅原子下方, 如图 1(a) 所示, 图 1(b) 是侧视图, 图中 In₂S₃ 的自发铁电极化方向向上. AB 堆垛对应 In 原子在一个硅原子下方, 而 S 原子处于硅烯六角格子中心, 图 1(c) 和图 1(d) 分别是 AB 堆垛的俯视图和侧视图. 经过结构优化, AA 堆垛和 AB 堆垛的层间距分别为

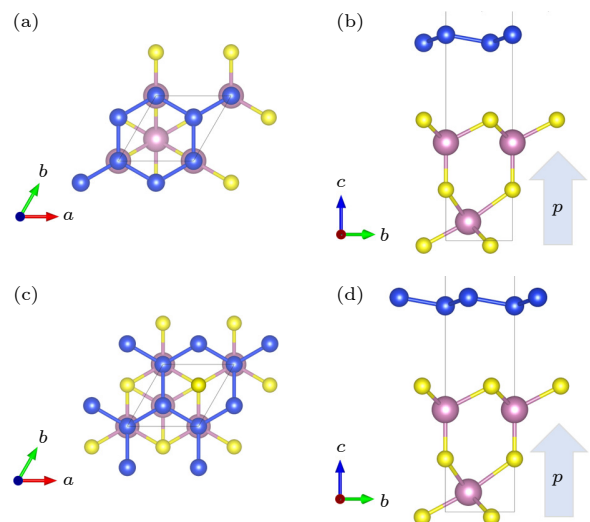


图 1 硅烯与 In₂S₃ 异质结的结构图 (a), (b) AA 堆垛的俯视图和侧视图; (c), (d) AB 堆垛的俯视图和侧视图

Fig. 1. The structure of Silicene/In₂S₃ heterostructure: (a), (b) the top and side view of AA stacking; (c), (d) the top and side view of AB stacking.

4.30 和 3.93 Å, 与典型二维异质结层间距相当. *AB* 堆垛还有可能是 S 原子在一个硅原子下方, 而 In 原子处于硅烯六角格子中心, 这种堆垛形式能量比图 1 中 *AB* 堆垛高 13.16 meV, 后面只讨论图 1 对应的 *AB* 堆垛形式.

计算结果表明, 图 1(c) 所示 *AB* 堆垛具有最低能量, 为了寻找界面相互作用能量最低点, 计算了硅烯相对于 In_2S_3 平移时的堆垛能. 堆垛能定义为硅烯和 In_2S_3 不同堆垛形式的能量与最稳定 *AB* 堆垛结构能量之差, 分别沿原胞 [110] 和 [100] 方向平移硅烯, 所得不同堆垛时能量如图 2 所示. 硅烯相对于 In_2S_3 沿 [100] 方向平移, 相当于沿 In_2S_3 五原子层单元中同一层内 In-In 或者 S-S 的最近邻方向平移. 沿 [110] 方向的平移相当于沿 In_2S_3 五原子层单元中同一层内 In-In 或者 S-S 的次近邻方向平移, [110] 方向也是极化翻转过程中 S 原子在平面内的移动方向. 这两个方向是两层之间在平面内平移的两个不等价的代表性方向, 计算出沿不同方向平移的堆垛能与其他双层二维材料之间的堆垛能形状类似^[31,38]. 图 2 中 *AB* 堆垛时, 硅烯相对于 In_2S_3 沿 [110] 方向平移 [2/3, 2/3] 即为 *AA* 堆垛, 沿不同方向平移时的堆垛能曲线表明 *AB* 堆垛是最稳定的堆垛形式.

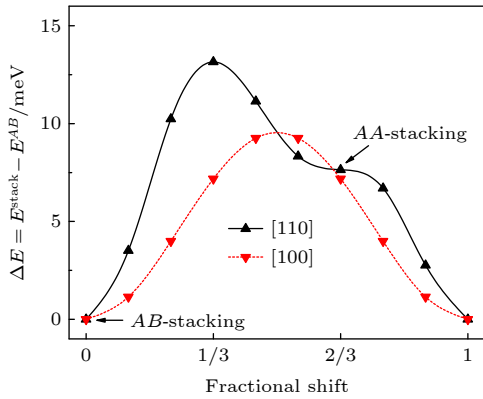


图 2 沿晶体表面不同方向横向平移时堆垛能变化情况. 图中给出沿 [100](红色虚线) 和 [110](黑色实线) 方向平移时堆垛能变化情况, *AB* 堆垛在平面内平移 [2/3, 2/3] 即可得到 *AA* 堆垛

Fig. 2. Stacking energy as a function of lateral shift with respect to *AB* stacking. The stacking energy are shown both for [100] (dotted red line) and [110] (solid black line) directions. *AB* stacking corresponding to a fractional lateral shift of [2/3, 2/3] of the top layer compared to *AA* stacking.

为了定量描述界面相互作用, 计算了硅烯和 In_2S_3 之间的吸附能, $E_{\text{ad}} = E_{\text{In}_2\text{S}_3} + E_{\text{Si}} - E_{\text{Tot}}$, 其

中 E_{Tot} 是异质结的总能量, $E_{\text{In}_2\text{S}_3}$ 和 E_{Si} 分别是 In_2S_3 和硅烯单独存在时的能量. 分别考虑 In_2S_3 的自发铁电极化向上和向下两种情况, 其吸附能和 In_2S_3 与硅烯之间层间距变化如表 1 所列. In_2S_3 极化方向向下时硅烯与 In_2S_3 之间层间距比极化方向向上时小 0.31 Å, 同时吸附能高 24.65 meV, 说明极化方向向下时硅烯与 In_2S_3 之间有较强相互作用, 对应较低能量状态, 与异质结总能计算结果极化向上比极化向下高 22.87 meV 一致. 吸附能计算结果与 LiNbO_3 /石墨烯异质结 22.3 meV 及双层石墨烯吸附能 25.1 meV 基本相当^[22,39], 并且表现出显著的极化方向依赖性, 预示着极化翻转可以对异质结性能起到较明显调控作用.

表 1 In_2S_3 极化方向改变时总能量, 结合能以及层间距和能隙变化情况. 能隙单位为 meV, SOC 指考虑自旋轨道耦合后数值

Table 1. Total energy, adhesion energy, layer distance and energy gap with the polarization of In_2S_3 upward and downward. SOC refers to the energy gap (meV) calculated with spin-orbit coupling.

	$E_{\text{tot}}/\text{meV}$	E_{ad}/meV	$d/\text{Å}$	E_g (SOC)
$\text{P}_{\text{In}_2\text{S}_3}$ -up	22.87	12.51	3.93	13.6 (1.8)
$\text{P}_{\text{In}_2\text{S}_3}$ -down	0	37.16	3.62	33.3 (30.8)

接下来研究 In_2S_3 极化翻转对异质结电子性质的影响. 图 3 给出了硅烯/ In_2S_3 异质结的能带图. 当 In_2S_3 自发铁电极化向上时, 硅烯和 In_2S_3 间距较大, 为 3.93 Å, 层间相互作用较弱, 自发极化电场

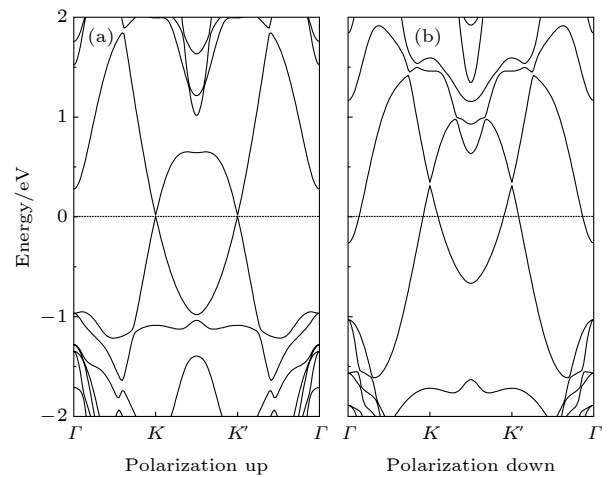


图 3 硅烯/ In_2S_3 异质结能带图 (a) 和 (b) 分别对应 In_2S_3 极化方向向上和向下

Fig. 3. Band structure of silicene/ In_2S_3 heterostructure: (a) and (b) corresponding to the polarization of In_2S_3 upward and downward, respectively.

及衬底的共同作用下破坏了硅烯中 AB 子格子对称性, 硅烯能带在布里渊区 K 和 K' 点形成能隙, 但费米能级仍然位于能隙中间. 当 In_2S_3 自发铁电极化向下时, 硅烯和 In_2S_3 间距变小为 3.62 \AA , 层间相互作用明显增强, 具体表现在硅烯能隙显著变大且价带上移穿过费米能级, 意味着硅烯与 In_2S_3 之间出现电荷转移, 以铁电极化向上时为参考, 电荷转移大小是 $0.04e$. 计算结果表明 In_2S_3 极化翻转可以调控硅烯/ In_2S_3 异质结实现半导体-金属性转变, 有望在新一代电子器件中得到应用.

由于硅烯中翘曲结构的存在显著增强了自旋轨道耦合作用, 自由的硅烯可以实现量子化自旋霍尔效应^[2]. 进一步考虑自旋轨道耦合效应对异质结能带的影响, 图 4 给出了布里渊区 K 和 K' 点附近能带的放大图. 当 In_2S_3 自发铁电极化向上且不考虑自旋轨道耦合时, 如图 4(a) 所示, K 与 K' 点附近能带完全简并, 能隙为 13.6 meV , 考虑自旋轨道耦合后 (图 4(b)), K 与 K' 点附近能带劈裂, 能隙减小为 1.8 meV , 费米能级仍然在能隙中. 当 In_2S_3 自发铁电极化向下且不考虑自旋轨道耦合时, 如图 4(c) 所示, 能隙为 33.3 meV , 但是费米能级穿过导带,

考虑自旋轨道耦合后能带略有降低, 为 30.8 meV (图 4(d)). 硅烯与衬底的相互作用破坏 AB 子格子对称性后可以实现能谷霍尔效应, 可以用能谷陈数表征, $C_V = C_K - C_{K'}$ ^[1,40,41]. $C_{K/K'}$ 是陈数 C 在布里渊区 K/K' 附近非零范围内的积分数值. 陈数 C 决定了量子化的霍尔电导 $\sigma_{xy} = Ce^2/h$, 可以通过 Kubo 公式计算^[42,43]:

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d^2k \Omega(k), \quad (1)$$

$$\Omega(k) = \sum_n f_n \Omega_n(k), \quad (2)$$

$$\Omega_n(k) = - \sum_{n' \neq n} \frac{2\text{Im} \langle \psi_{nk} | v_x | \psi_{n'k} \rangle \langle \psi_{n'k} | v_y | \psi_{nk} \rangle}{(\omega_{n'} - \omega_n)^2}. \quad (3)$$

方程 (2) 只需要对 K 和 K' 点能隙以下能带进行求和, 而方程 (3) 中的求和涉及所有能带, 频率 $\omega_n = E_n/\hbar$, $v_{x(y)}$ 是速度算符. 如果贝利曲率 $\Omega(k)$ 在整个布里渊区积分数值不为零, 系统就具有量子化霍尔电导, 对应拓扑非平庸状态. 在硅烯/ In_2S_3 异质结中, 贝利曲率在整体布里渊区积分为零, 但是在 K 和 K' 点附近具有非零值, $C_{K/K'}$ 通过在布

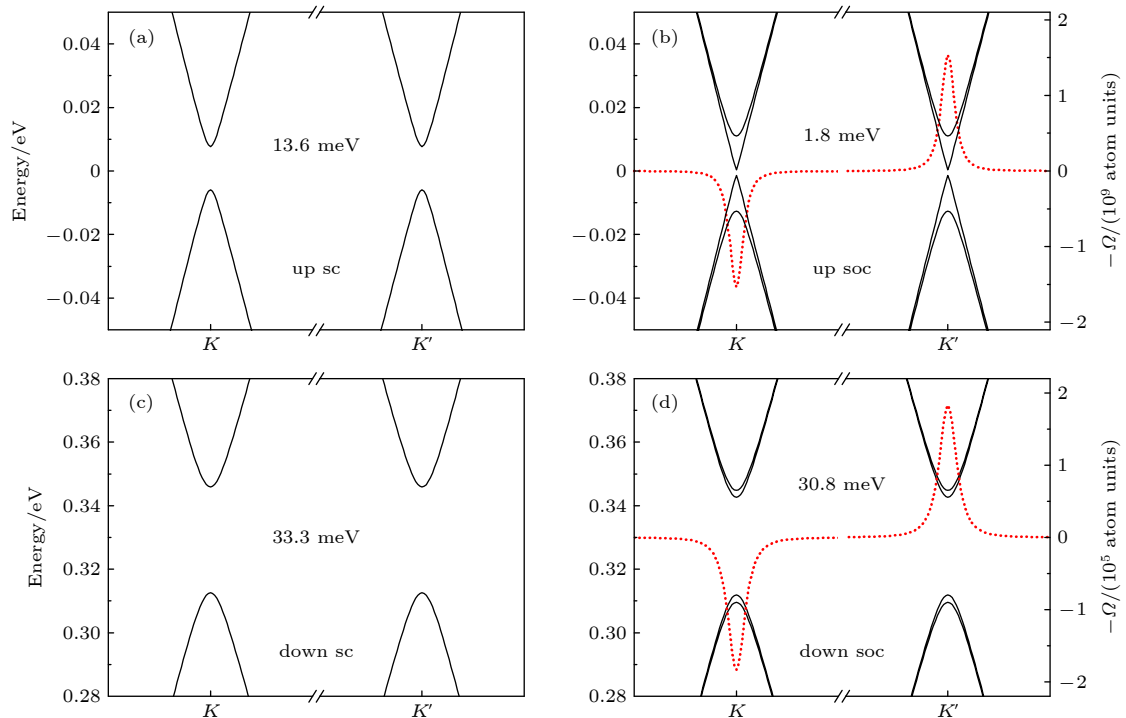


图 4 硅烯/ In_2S_3 异质结能带在 K 和 K' 附近放大图 (a), (c) 没有考虑自旋轨道耦合; (b), (d) 考虑自旋轨道耦合, 红色虚线对应贝利曲率

Fig. 4. Enlarged band structure of Silicene/ In_2S_3 heterostructure around K and K' : (a), (c) Calculations without spin orbit coupling; (b), (d) with spin orbit coupling, the red dotted line is the Berry curvature.

里渊区中 K/K' 点附近非零区域积分求解. 图 4(b) 中红色虚线对应对 K 和 K' 点能隙以下能带积分得到的贝利曲率, 明显可以看出贝利曲率在 K 和 K' 点相反, 在整个布里渊区内 $C = 0$, 但是在 K 和 K' 点附近分别为 $C_{K'} \approx +1$ 和 $C_K \approx -1$, 所以能谷 $C_V = C_K - C_{K'} = -2$, 对应量子化能谷霍尔效应. 图 4(d) 中贝利曲率在 K 和 K' 点也具有相反符号, 仍然具有能谷自由度, 只是费米能级穿过价带使体系具有金属性质. 自旋轨道耦合计算表明, 自发极化翻转可以调控硅烯/ In_2S_3 异质结在能谷霍尔态和金属态之间转变, 为硅烯在能谷电子学方面的应用指明方向.

为了更直观地了解硅烯/ In_2S_3 异质结中自发极化电场及其翻转对异质结性质的影响, 图 5 给出了垂直于异质结平面方向的局域势函数的平均值. In_2S_3 垂直方向铁电极化源于单层正中间的 S 原子在垂直方向破坏了中心反演对称性, 这就会导致材料两端具有不同的功函数. 图 5(a) 中下表面功函数高于上表面, 沿极化方向势能平均值降低, 与自发极化向上情况一致. 此时硅烯与 In_2S_3 间距较大, 自发极化电场与衬底共同作用在 K 和 K' 点打开能隙并诱导出能谷霍尔效应状态; 图 5(b) 中下表面功函数低于上表面, 对应自发极化向下. 此时硅烯与 In_2S_3 间距变小, 虽然在 K 和 K' 点仍然打开能隙并且具有能谷自由度, 但是界面之间的电荷转移使费米能级进入价带, 体系具有金属性质.

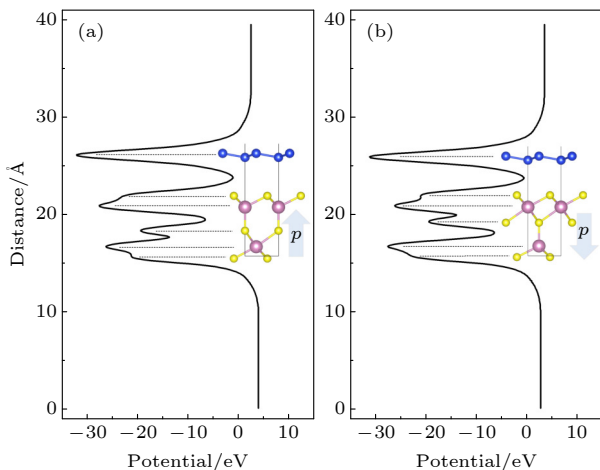


图 5 硅烯/ In_2S_3 异质结垂直于界面方向局域势函数的平均值

Fig. 5. Plane-averaged local potential of silicene/ In_2S_3 heterostructure.

4 结 论

通过第一性原理计算发现, 单层 In_2S_3 的铁电极化为 $1.26 \mu\text{C}\cdot\text{cm}^{-2}$, 其与硅烯构成的异质结中 AB 堆垛能量最低, In_2S_3 自发铁电极化的翻转会引起层间距的显著变化, 自发极化方向向上时, 异质结层间距较大, 为 3.93 \AA , 由于极化电场和衬底作用破坏了 AB 子格子对称性, 在布里渊区 K 和 K' 点产生 1.8 meV 能隙, 费米能级在能隙之中, 并且 K 和 K' 点贝利曲率符号相反, 可以实现量子化的能谷霍尔效应. In_2S_3 自发铁电极化方向向下时, 层间距变小为 3.62 \AA , 相比极化向上时异质结之间出现 $0.04e$ 的电荷转移, K 和 K' 点能隙均为 30.8 meV , 但贝利曲率仍然相反, 而且费米能级穿过价带具有金属性. 本文的结果表明在二维铁电材料与硅烯构成的异质结中, 不但可以引入能谷自由度, 还可以实现二维铁电材料极化翻转对异质结电子性质的调控, 为硅烯在未来能谷电子学器件中的应用提供了参考.

参考文献

- [1] Qiao Z, Tse W K, Jiang H, Yao Y, Niu Q 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 256801
- [2] Liu C C, Feng W, Yao Y 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 076802
- [3] Zhao J, Liu H, Yu Z, Quhe R, Zhou S, Wang Y, Liu C C, Zhong H, Han N, Lu J, Yao Y, Wu K 2016 *Prog. Mater. Sci.* **83** 24
- [4] Oostinga J B, Heersche H B, Liu X, Morpurgo A F, Vandersypen L M K 2008 *Nat. Mater.* **7** 151
- [5] Zhang Y, Tang T T, Girit C, Hao Z, Martin M C, Zettl A, Crommie M F, Shen Y R, Wang F 2009 *Nature* **459** 820
- [6] Drummond N D, Zólyomi V, Fal'ko V I 2012 *Phys. Rev. B* **85** 075423
- [7] Yu Z, Pan H, Yao Y 2015 *Phys. Rev. B* **92** 155419
- [8] Ezawa M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 055502
- [9] Ezawa M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 026603
- [10] Ezawa M 2012 *New J. Phys.* **14** 033003
- [11] Tao L, Cinquanta E, Chiappe D, Grazianetti C, Fanciulli M, Dubey M, Molle A, Akinwande D 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 227
- [12] Vali M, Dideban D, Moezi N 2016 *J. Comput. Electron.* **15** 138
- [13] Ji Q S, Hao H Y, Zhang C X, Wang R 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 087302 (in Chinese) [计青山, 郝鸿雁, 张存喜, 王瑞 2015 物理学报 **64** 087302]
- [14] Hou H Y, Yao H, Li Z J, Nie Y X 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 086801 (in Chinese) [侯海燕, 姚慧, 李志坚, 聂一行 2018 物理学报 **67** 086801]
- [15] Vogt P, De Padova P, Quaresima C, Avila J, Frantzeskakis E, Asensio M C, Resta A, Ealet B, Le Lay G 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 155501

- [16] Feng B, Ding Z, Meng S, Yao Y, He X, Cheng P, Chen L, Wu K 2012 *Nano Lett.* **12** 3507
- [17] Chiappe D, Scalise E, Cinquanta E, Grazianetti C, van den Broek B, Fanciulli M, Houssa M, Molle A 2014 *Adv. Mater.* **26** 2096
- [18] Li G, Zhang L, Xu W, Pan J, Song S, Zhang Y, Zhou H, Wang Y, Bao L, Zhang Y Y, Du S, Ouyang M, Pantelides S T, Gao H J 2018 *Adv. Mater.* **30** 1804650
- [19] Novoselov K S, Mishchenko A, Carvalho A, Castro Neto A H 2016 *Science* **353** 6298
- [20] Liu Y, Zhang S, He J, Wang Z M, Liu Z 2019 *Nano-Micro Lett.* **11** 13
- [21] Zheng Y, Ni G X, Toh C T, Tan C Y, Yao K, Özyilmaz B 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 166602
- [22] Ding J, Wen L W, Li H D, Zhang Y 2017 *Phys. Lett. A* **381** 1749
- [23] Fei Z, Zhao W, Palomaki T A, Sun B, Miller M K, Zhao Z, Yan J, Xu X, Cobden D H 2018 *Nature* **560** 336
- [24] Zhang J J, Zhu D, Yakobson B I 2021 *Nano Lett.* **21** 785
- [25] Wang H, Xu M, Zheng R K 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 017301 (in Chinese) [王慧, 徐萌, 郑仁奎 2020 物理学报 **69** 017301]
- [26] Ye Q, Shen Y, Duan C 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 087702
- [27] Chang K, Liu J, Lin H, Wang N, Zhao K, Zhang A, Jin F, Zhong Y, Hu X, Duan W, Zhang Q, Fu L, Xue Q K, Chen X, Ji S H 2016 *Science* **353** 274
- [28] Liu F, You L, Seyler K L, Li X, Yu P, Lin J, Wang X, Zhou J, Wang H, He H, Pantelides S T, Zhou W, Sharma P, Xu X, Ajayan P M, Wang J, Liu Z 2016 *Nat. Commun.* **7** 12357
- [29] Ding W, Zhu J, Wang Z, Gao Y, Xiao D, Gu Y, Zhang Z, Zhu W 2017 *Nat. Commun.* **8** 14956
- [30] Ding J, Wen L W, Wang Z P, Zhang Y 2021 *Mater. Today Commun.* **27** 102452
- [31] Ding J, Wen L W, Chai W W, Liu S C, Li R X, Li H D, Zhang Y 2021 *Appl. Surf. Sci.* **567** 150871
- [32] Song R, Wang B L, Feng K, Wang L, Liang D D 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 037101 (in Chinese) [宋蕊, 王必利, 冯凯, 王黎, 梁丹丹 2022 物理学报 **71** 037101]
- [33] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [34] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [35] Grimme S, Antony J, Ehrlich S, Krieg H 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 154104
- [36] Ding J, Shao D F, Li M, Wen L W, Tsymbal E Y 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 057601
- [37] Wan S, Li Y, Li W, Mao X, Wang C, Chen C, Dong J, Nie A, Xiang J, Liu Z, Zhu W, Zeng H 2019 *Adv. Funct. Mater.* **29** 1808606
- [38] Sivadas N, Okamoto S, Xu X, Fennie C J, Xiao D 2018 *Nano Lett.* **18** 7658
- [39] Chen M X, Zhong Z, Weinert M 2016 *Phys. Rev. B* **94** 075409
- [40] Xiao D, Yao W, Niu Q 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 236809
- [41] Pan H, Li Z, Liu C C, Zhu G, Qiao Z, Yao Y 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 106802
- [42] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
- [43] Yao Y, Kleinman L, MacDonald A H, Sinova J, Jungwirth T, Wang D S, Wang E, Niu Q 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 037204

Control of electric properties of silicene heterostructure by reversal of ferroelectric polarization*

Ding Jun^{1)†} Wen Li-Wei¹⁾ Li Rui-Xue¹⁾ Zhang Ying^{2)‡}

1) (*College of Science, Henan University of Engineering, Zhengzhou 451191, China*)

2) (*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)

(Received 25 April 2022; revised manuscript received 21 May 2022)

Abstract

Silicene is a kind of two-dimensional material composed of a honeycomb arrangement of silicon atoms. Compared with the structure of graphene, the buckled structure of silicene weakens the π – π overlaps and turns the hybrid orbitals from sp^2 to sp^3 , which enhances the spin-orbit coupling strength but still preserves the Dirac cone near K or K' . Owing to its buckled structure, silicene is susceptible to external parameters like electric field and substrate, which draws lots of attention both experimentally and theoretically. Recent progress of ferroelectricity in two-dimensional (2D) van der Waals materials found that the spontaneous ferroelectric polarization can be preserved even above room temperature, which inspires us to investigate how to tune the electric properties of silicene through the spontaneous polarization field of 2D ferroelectric substrate. In_2X_3 ($X = \text{Se}, \text{S}, \text{Te}$) Family recently were found to have single ferroelectric monolayers with reversible spontaneous electric polarization in both out-of-plane and in-plane orientations, and the lattice mismatch between silicene and In_2S_3 is negligible. Therefore, we investigate the stacking and electric properties of silicene and monolayer In_2S_3 heterostructure by the first-principles calculations. The spontaneous polarization field of In_2S_3 is calculated to be $1.26 \mu\text{C}\cdot\text{cm}^{-2}$, comparable to the experimental results of In_2Se_3 . We compare the different stacking order between silicene and In_2S_3 . The calculated results shown that the AB stacking is the ground state stacking order, and the reversal of the ferroelectric polarization could tune the band structure of heterostructure. When the polarization direction of In_2S_3 is upward, the layer distance between silicene and In_2S_3 is 3.93 \AA , the polarization field and substrate interaction together break the AB sublattice symmetry and induce a 1.8 meV band gap near the Dirac point of K and K' , while the Berry curvature around K and K' have opposite signs, corresponding to valley Hall effect. When the polarization is downward, the layer distance decreases to 3.62 \AA and the band gap around K and K' both increase to 30.8 meV . At the same time a $0.04e$ charge transfer makes some bands move across the Fermi energy, corresponding to metal state. Our results pave the way for studying the ferroelectric tuning silicene heterostructures and their potential applications in information industry.

Keywords: silicene, ferroelectricity, heterostructure, valley Hall effect

PACS: 73.20.–r, 77.84.–s, 73.22.–f

DOI: 10.7498/aps.71.20220815

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11604078, 11835003, 11347187).

† Corresponding author. E-mail: dingjun@haue.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: yingzhang@bnu.edu.cn



铁电极化翻转对硅烯异质结中电子性质的调控

丁俊 文黎巍 李瑞雪 张英

Control of electric properties of silicene heterostructure by reversal of ferroelectric polarization

Ding Jun Wen Li-Wei Li Rui-Xue Zhang Ying

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 177303 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220815

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220815>

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

磁性硅烯超晶格中电场调制的谷极化和自旋极化

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

物理学报. 2018, 67(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180080>

二硫化钨/石墨烯异质结的界面相互作用及其肖特基调控的理论研究

Interfacial interaction and Schottky contact of two-dimensional WS_2 /graphene heterostructure

物理学报. 2019, 68(9): 097101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190020>

单层硅烯表面的CoPc分子吸附研究

Adsorption of CoPc molecules on silicene surface

物理学报. 2022, 71(4): 040501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211607>

非对称氧掺杂对石墨烯/二硒化钼异质结肖特基势垒的调控

Regulation and control of Schottky barrier in graphene/ $MoSe_2$ heterojunction by asymmetric oxygen doping

物理学报. 2022, 71(1): 017104 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210238>

过渡金属二硫化物/三卤化铬范德瓦耳斯异质结的反折叠能带

Study of transition metal dichalcogenides/chromium trihalides van der Waals heterostructure by band unfolding method

物理学报. 2022, 71(14): 147101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220326>

Pt/BiFeO₃/Nb:SrTiO₃异质结的光伏效应和光调控整流特性

Photovoltaic effect and photo-assisted diode behavior in Pt/BiFeO₃/Nb-doped SrTiO₃ heterojunction

物理学报. 2020, 69(12): 127301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200280>