

专题: 二维材料与未来信息器件

基于单层交错磁体实现巨大的谷极化效应*

谢伟锋¹⁾ 王利波¹⁾ 许雄²⁾ 乐云亮³⁾ 夏华艳¹⁾ 贺龙辉¹⁾ 王辉^{2)†}

1) (湖南工商大学微电子与物理学院, 长沙 410205)

2) (中南大学物理学院, 长沙 410083)

3) (扬州大学信息工程学院, 扬州 225127)

(2025年8月7日收到; 2025年9月28日收到修改稿)

稳定且显著的谷极化效应是谷自由度在谷电子器件中应用的关键. 基于第一性原理计算, 本文发现单层交错磁体 V_2Se_2O 在单轴应变下的谷极化效应关联磁性原子 V 之间的净磁矩, 提出了实现巨大谷极化效应的两种策略. 其一, 利用 Cr 原子替换 V_2Se_2O 单层中的一个 V 原子形成亚铁磁单层 $VCrSe_2O$, 使磁性原子之间的净磁矩足够大, 实现巨大的谷极化效应. 通过在 a 轴或 b 轴方向施加单轴应变能显著提升谷极化值, 且谷极化值与磁性原子之间的净磁矩呈近线性关系. 其二, 构建 V_2Se_2O 单层和 α -SnO 单层的范德瓦耳斯异质结, 镜面对称破缺的堆垛方式使 V 原子之间出现净磁矩, 从而实现显著的谷极化效应. 通过压缩异质结的层间距离可以引起 V 原子之间净磁矩的增加, 能将谷极化值提升至近 400 meV. 本工作在单层交错磁体的基础上提出了实现巨大谷极化的两种策略, 为基于交错磁体构筑的亚铁磁单层和异质结材料在谷电子学领域的应用提供理论指导.

关键词: 谷自由度, 单层交错磁体, 谷极化, 亚铁磁, 范德瓦耳斯异质结**PACS:** 75.50.Pp, 75.70.Ak, 85.75.-d, 61.50.Ah**DOI:** 10.7498/aps.74.20251066**CSTR:** 32037.14.aps.74.20251066

1 引言

随着现代电子器件正在朝着小型化和集成化的方向发展, 传统半导体器件由于尺寸微缩带来的不可规避的量子效应, 以及电荷传输带来的能耗高、散热难等问题日渐突出. 类似于传统的电荷、自旋自由度, 谷自由度作为信息的新型载体, 能够将电子在不同能谷的占据状态用于编码信息, 使得数据的存储、传输和处理无需涉及电荷流, 从而为后摩尔时代半导体器件和谷电子器件的发展开辟新途径^[1,2].

体系具有谷极化效应是谷自由度应用的前提.

谷极化可表示为不同能谷之间的能量差, 即

$$\Delta E_{v(c)} = E_{v(c)}^K - E_{v(c)}^{K'}, \quad (1)$$

其中 v 和 c 分别表示导带和价带; K 和 K' 分别标记两个谷点. 探寻具有巨大谷极化效应的谷材料并探究谷极化的形成机理一直以来都是谷自由度得以应用的关键^[3]. 非磁性过渡金属二硫化物 (MoS_2 和 WSe_2 等) 由于其破缺的空间反演对称性和较大的自旋轨道耦合 (spin-orbital coupling, SOC) 效应使得不同谷点处出现大的自旋劈裂, 从而引起人们广泛的关注^[4,5]. 然而, 时间反演对称的保护使不同能谷之间的能量简并^[6]. 目前, 一些外界手段, 如外加磁场^[6-9]、磁性原子掺杂^[10,11]、磁近

* 国家自然科学基金 (批准号: 12504071, 12174450, 11874429)、长沙市自然科学基金 (批准号: kg2502211)、湖南省科技创新计划 (批准号: 2024RC1013) 和湖南省自然科学基金重点项目 (批准号: 2024JJ3029) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: huiwang@csu.edu.cn

邻效应^[12-15]、圆偏振光激发^[16-18]等方法用于消除谷间简并,从而形成有利于谷自由度应用的谷极化特征.但是这些外界手段实施条件苛刻,使得人们期待寻找一种具有大谷极化的本征谷材料.2016年,Tong等^[19]在铁磁性过渡金属二硫化物 2H-VSe₂ 中发现由垂直磁化强度在 SOC 下自发形成谷极化的现象,并首次提出了铁谷性的概念.铁谷材料的哈密顿量可以表示为

$$\hat{H}(k) = \hat{H}_0(k) + \hat{H}_{\text{SOC}}(k) + \hat{H}_{\text{ex}}(k), \quad (2)$$

其中 $\hat{H}_{\text{SOC}}(k)$ 表示 SOC 项的哈密顿量; $\hat{H}_{\text{ex}}(k)$ 表示本征磁交换相互作用的哈密顿量.铁谷材料具有内禀破缺的空间和时间反演对称性,在合适的载流子掺杂和面内电场下会出现反常谷霍尔效应,更有利于谷自由度的利用^[19-24].至此,一系列的二维铁磁和反铁磁材料被证明具有铁谷性^[25-29].然而,一般铁谷材料需要依靠 SOC 形成谷极化,而 SOC 诱发的谷极化值不会很大,大部分低于 100 meV^[30,31],寻找大谷极化值的谷材料仍然是谷电子学领域的研究热点.

最近,融合铁磁体和反铁磁体优势的新型共线磁性材料-交错磁体^[32-36]被人们所关注.交错磁体具有类似反铁磁体补偿的反平行磁序,而其特有的旋转对称和不同子晶格的镜面对称,以及破缺的时间反演对称使具有能谷的交错磁体在谷点处存在由晶体对称性而非常规时间反演对称引起的自旋-谷锁定现象^[37],效果等同于非磁性谷材料在时间反演对称保护下由 SOC 诱发的自旋劈裂现象.值得注意的是,交错磁体中存在的巨大自旋劈裂可比 SOC 诱发的自旋劈裂值大一个量级^[38].目前,许多的单层交错磁性半导体及谷相关的物理特性相继在理论上被预测^[37,39-47].研究表明,大多数单层交错磁性半导体具有单轴应变诱发的非 SOC 谷极化效应,且谷极化值随单轴应变呈近线性增长,在-5%的单轴应变下能产生显著的谷极化(>100 meV),该现象称之为压谷效应^[37].交错磁体中的压谷效应打破了常规铁谷材料中需要考虑 SOC 产生谷极化的前提条件,通过施加单轴应力打破相应的晶体对称性即可出现谷极化效应^[37,39-45].那么除了单轴应变,我们自然会想到是否还有其他打破交错磁体中晶体对称性的策略?

本文通过替换磁性原子和构建范德瓦耳斯异质结的方法,来打破交错磁体中不同磁性原子之间

的镜面对称.通过第一性原理计算发现单轴应变能改变 V₂Se₂O 单层中磁性原子之间的净磁矩,并伴随着谷极化的变化.基于谷极化值与净磁矩之间存在的关联,采用 Cr 原子替换 V₂Se₂O 单层中的一个 V 原子,使磁性原子之间形成大的净磁矩.计算发现 VCrSe₂O 单层为亚铁磁半导体,无需考虑 SOC 即可出现巨大的谷极化,类似于单层交错磁体中的压谷效应^[37,39].分别在 VCrSe₂O 单层的 *a* 轴和 *b* 轴施加单轴应力时,发现拉伸 *a* 轴和压缩 *b* 轴能明显地增加谷极化的大小,并伴随着磁性原子之间净磁矩的变化.另一种改变 V₂Se₂O 单层中 V 原子之间净磁矩的策略是构建范德瓦耳斯异质结,我们发现 V₂Se₂O 单层和 α -SnO 单层构建的异质结中,破坏镜面对称的堆垛结构能改变 V 原子之间的净磁矩,从而形成显著的谷极化.通过控制层间距离的变化,发现压缩层间距离能同时增大净磁矩和谷极化的大小,在压缩 0.5 Å 时,谷极化大小达到近 400 meV.该工作在单层交错磁体的基础上提出了实现巨大谷极化的两种策略,为基于交错磁体构筑的亚铁磁单层和异质结材料在谷电子学领域的应用提供理论指导.

2 研究方法

本工作采用基于密度泛函理论的 VASP (Vienna *ab initio* simulation package)^[48] 计算软件包完成.其中采用投影缀加平面波方法^[49]和基于广义梯度近似的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 交换关联泛函^[50].计算统一采用 560 eV 的平面波截断能,垂直于二维平面的方向采用大于 15 Å 的真空层来避免层间相互作用对计算结果的影响.结构优化和自洽计算的能量收敛标准统一为 1×10^{-7} eV,每个原子上力的收敛阈值统一为 0.005 eV/Å.对于 *K* 网络的选取,计算 V₂Se₂O 单层时,采用 $25 \times 25 \times 1$ 以 Γ 点为中心的 Monkhorst-Pack 方法.计算 VCrSe₂O 单层时,采用 $24 \times 25 \times 1$ 的 *K* 点网格.计算 V₂Se₂O/SnO 异质结时,采用 $25 \times 25 \times 1$ 的 *K* 点网格.除此之外,为了进一步考虑 V, Cr 原子 d 电子的强关联效应,计算统一采用 PBE+*U* 的方法^[51],其中 V 的 U_{eff} 设为 4 eV^[39],Cr 的 U_{eff} 设为 3.55 eV^[41,42].同时使用 DFT-D3 方法^[52]修正 V₂Se₂O/SnO 异质结中的层间范德瓦耳斯相互作用.

3 结果与讨论

V_2Se_2O 单层是一种典型的二维交错磁体^[37], 具有 $P4/mmm$ 空间群, 晶体结构如图 1(a) 所示. 由于 V_2Se_2O 单层是平面内晶格常数 $a = b = 4.044 \text{ \AA}$ 的四方晶系, 因而不同子晶格具有沿对角线方向的垂直镜面对称, 如图 1(a) 和图 1(b) 中的镜面 M_ϕ 所示. 除了镜面对称, V_2Se_2O 单层还具有独特的旋转对称, 这也是交错磁体区别于反铁磁体的显著特征^[32,33]. 从图 1(c) 的两个 V 原子的局部结构中可以看出, V 位于畸变八面体的中心, 且两个 V 原子具有镜面对称. 定义 V 原子之间的净磁矩 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 为

$$\Delta M(V_1 - V_2) = |M_{V_1}| - |M_{V_2}|. \quad (3)$$

第一性原理计算结果表明 V_2Se_2O 单层的 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 为零. 从图 1(d) 的能带图中可以看出 $M-X-\Gamma-Y-M$ 高对称路径上具有自旋劈裂的能带特性, 整个体系为直接带隙半导体, 带隙值 $E_g = 0.738 \text{ eV}$. 前人从理论上论证了 V_2Se_2O 单层具有单轴应变诱发的显著谷极化效应, 且该谷极化无需考虑 SOC 效应, 只需施加 a 轴 (或 b 轴) 方向的单轴应变 (图 1(e)), 即可出现谷极化现象, 该现象称为压谷效应^[37]. 我们统一定义具有四方晶系的单层交错磁体的谷极化值 $\Delta E_{c(v)}$ 的计算公式:

$$\Delta E_{c(v)} = E_{c(v)}(X) - E_{c(v)}(Y), \quad (4)$$

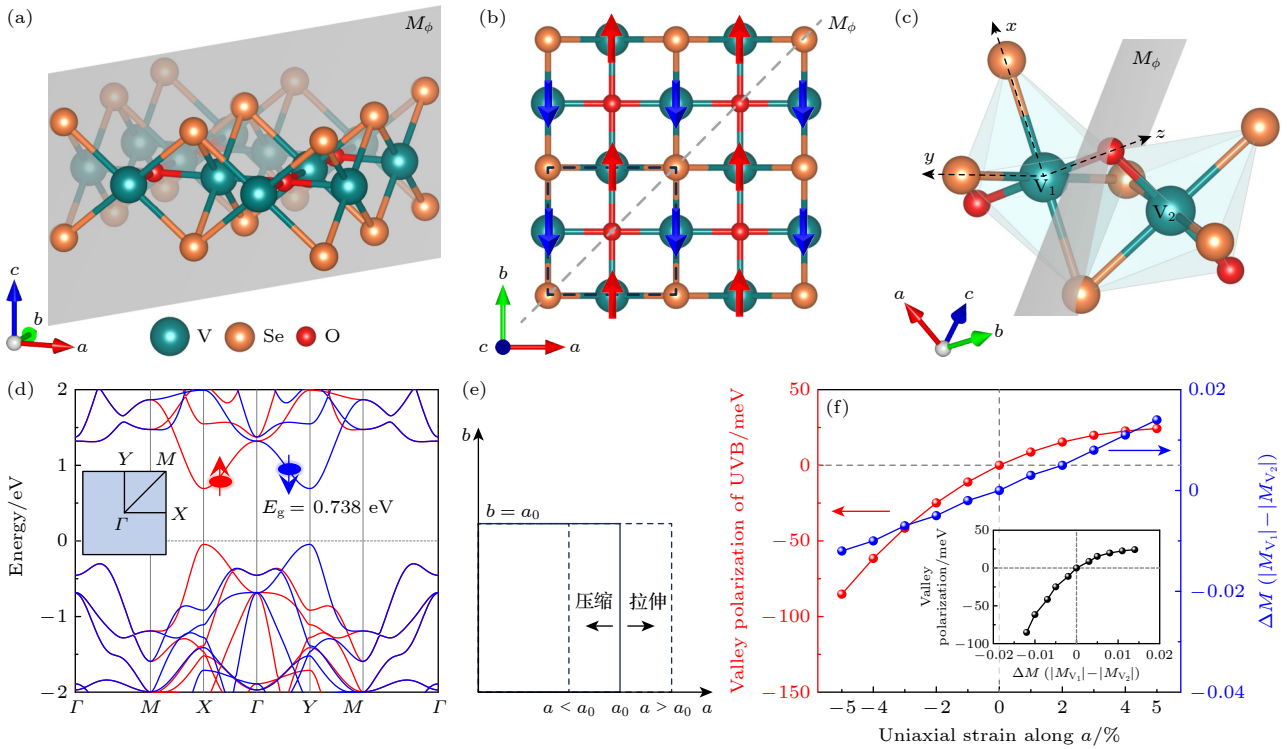


图 1 V_2Se_2O 单层的几何结构和能带结构, 以及谷极化、净磁矩和沿 a 轴方向的单轴应变三者之间的关系 (a) V_2Se_2O 单层的晶体结构, 其中垂直方向的灰色平面为不同子晶格沿对角线方向的镜面对称平面 M_ϕ ; (b) V_2Se_2O 单层的俯视图, 其中黑色虚线框表示原胞, 灰色虚线为沿对角线方向的镜面 M_ϕ ; (c) 两个 V 原子的局域八面体结构, 其中 xyz 为其中一个 V 原子的八面体局域坐标; (d) PBE+ U ($U = 4 \text{ eV}$) 计算的自旋分解的能带结构, 其中内嵌图为第一布里渊区中的高对称点路径; (e) 沿 a 轴方向的单轴应变示意图; (f) UVB 的谷极化和 V 原子之间的净磁矩 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 随 a 轴应变的变化, 其中内嵌图为谷极化随 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 的变化图

Fig. 1. Geometric and band structures of the V_2Se_2O monolayer, and the relationship among valley polarization, net magnetic moment, and uniaxial strain along the a -axis direction: (a) Crystal structure of monolayer V_2Se_2O , where the gray planes in the vertical direction represent the mirror symmetry planes M_ϕ of different sublattices along the diagonal direction; (b) top view of the monolayer V_2Se_2O , where the black dashed box indicates the unit cell, and the gray dashed lines represent the mirror planes M_ϕ along the diagonal direction; (c) local octahedral structure of two V atoms, where xyz represent the local octahedral coordinates of one V atom; (d) spin-polarized band structure calculated by PBE + U ($U = 4 \text{ eV}$), where the inset shows the high-symmetry points and paths in the first Brillouin zone; (e) schematic illustration of uniaxial strain along the a -axis; (f) valley polarization of UVB and the net magnetic moment $\Delta M(V_1 - V_2)$ between V atoms as a function of a -axis strain, where the inset shows the variation of valley polarization with $\Delta M(V_1 - V_2)$.

其中 c 和 v 分别表示最低导带 (lowermost conduction band, LCB) 和最高价带 (uppermost valence band, UVB), X 和 Y 标记高对称路径上的两个谷点, 如图 1(d) 的内嵌图所示. 第一性原理计算结果表明, 沿 a 轴施加近 5% 的压缩应变可使 V_2Se_2O 单层中的 UVB 产生大小为 85.203 meV 的谷极化. 有趣的是, 通过计算发现, 虽然 V_2Se_2O 单层中的总磁矩不随单轴应变的变化而变化, 但是单轴应变会改变 $\Delta M(V_1 - V_2)$, 使得 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 随单轴应变呈线性变化, 如图 1(f) 蓝色线所示. 因而, UVB 的谷极化值随 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 的变化趋势与其随单轴应变的变化趋势一致, 如图 1(f) 的内嵌图所示. 从该现象中, 我们可以归纳出单轴应变对谷极化的调控能力会反映在交错磁体中磁性原子之间净磁矩随应变的变化上, 这也就为单层交错磁体中谷极化的调控提供了一种新的思路, 即通过外界手段来改变磁性原子之间的净磁矩.

前人的研究结果表明^[37], 压谷效应的产生源于单轴应变使 V_2Se_2O 单层的镜面对称破缺. 我们发现单轴应变对谷极化的调控间接地反映在 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 的变化上. 单轴应变作为一种调控手段可改变 $\Delta M(V_1 - V_2)$, 并伴随着谷极化的形成. 我们自然地会想到可通过元素替换的策略替换掉 V_2Se_2O 单层中的一个 V 原子, 既能打破不同子晶格的镜面对称, 又能使磁性原子之间出现大的净磁矩. 基于 V_2Se_2O 单层在单轴压缩应变下, 谷极化的大小随 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 的大小增加而增大的变化趋势, 我们推断通过磁性原子 1:1 比例替换的方法能使替换后的体系产生显著的谷极化效应. 我们分别测试了与 V 原子同族和不同族之间的元素替换, 发现 Cr 原子通过 1:1 比例替换掉 V_2Se_2O 单层中的一个 V 原子形成的 $VCrSe_2O$ 单层具有稳定的几何结构. 首先, 采用第一性原理计算 $VCrSe_2O$ 单层的形成能 E_f . 形成能的计算公式为

$$E_f = (E_{VCrSe_2O} - \mu_V - \mu_{Cr} - 2 \times \mu_{Se} - \mu_O) / 5,$$

其中 E_{VCrSe_2O} 为单层 $VCrSe_2O$ 的能量, μ_V 为体心立方 V 单晶中 V 的化学势、 μ_{Cr} 为体心立方 Cr 单晶中 Cr 的化学势、 μ_{Se} 为三方晶系 Se 单晶中 Se 的化学势、 μ_O 为 O_2 分子中 O 的化学势. 计算得到的 $VCrSe_2O$ 的形成能为 -1.677 eV, 是 $CrWI_6$ 单层形成能 (-0.474) 的近 4 倍, $CrWGe_2Te_6$ 单层 (-0.216 eV) 的近 8 倍^[53]. 其中, 形成能计算结果的

负值表明其为放热反应, 在实验上更有利于化合物的稳定形成. 同时, 我们列举了在 $VCrSe_2O$ 单层的 2×2 超胞中, V 和 Cr 原子以 1:1 比例可能存在的 6 种不同位点替换结构, 如图 2(a) 所示. 同时, 计算出了这 6 种结构的相对能量, 如图 2(b) 所示. 可以看出 P1 替换结构对应的能量最低, 且相比于其他结构, 每一个化学式单元的能量差至少有 120 meV, 比 $CrWI_6$ 和 $CrWGe_2Te_6$ 单层不同替换位点的能量差要大近 4 倍^[53]. 图 2(c) 为 $VCrSe_2O$ 单层 P1 结构的俯视图和侧视图, 由于晶格常数 $a \neq b$, 镜面对称 M_ϕ 破缺, 理论上能产生无需考虑 SOC 效应的显著谷极化现象.

首先分析 $VCrSe_2O$ 单层 P1 结构的稳定性, 图 2(d) 中无虚频的声子谱表明 $VCrSe_2O$ 单层具有动力学稳定性, 图 2(e) 为 300 K 下的从头算分子动力学 (*ab initio* molecular dynamics, AIMD) 模拟结果, 从图中可以看出 $VCrSe_2O$ 单层在 6 ps 时间内依然能保持结构不变形, 从而具有热力学稳定性. 以上分析使得 $VCrSe_2O$ 单层在实验上具有合成的可能. 第一性原理计算结果表明 V 原子的局域磁矩为 $2.093\mu_B$, Cr 原子的局域磁矩为 $-3.263\mu_B$, 两者的局域磁矩朝相反的方向. 整个体系具有 $-1\mu_B$ 的净磁矩, 这种亚铁磁结构比铁磁结构的能量要低 388.427 meV, 表明 $VCrSe_2O$ 单层的磁基态为亚铁磁态. 从 V 原子近 $2\mu_B$ 的局域磁矩和 Cr 原子近 $-3\mu_B$ 的局域磁矩可以看出, $VCrSe_2O$ 单层类似于 V_2Se_2O 单层, V 原子和 Cr 原子各失三个电子, V 原子由 $3d^34s^2$ 变为 $3d^2$ 的电子结构, Cr 原子由 $3d^54s^1$ 变为 $3d^3$ 的电子结构. 由于是 Cr 原子替换 V_2Se_2O 单层中的一个 V 原子, 所以 $VCrSe_2O$ 单层中的 V 和 Cr 原子都处于局域八面体中, 类似于图 1(c). 正八面体结构能使 5 个 d 轨道劈裂成二重简并的 e_g 和能量更低的三重简并 t_{2g} . 又由于 V 原子周围的 4 个 Se 原子和两个 O 原子形成的局域八面体中, V—O 键比 V—Se 键短 0.655 Å. Cr 原子周围的 4 个 Se 原子和两个 O 原子形成的局域八面体中, Cr—O 键比 Cr—Se 键短 0.576 Å. 以 V 原子和 4 个 Se 原子构建 xy 平面, V—O 键方向为 z 轴, 形成类似于图 1(c) 中的虚线局域坐标, 所以 V 和 Cr 构成的局域畸变八面体相当于正八面体沿 z 轴方向压缩形成的. 晶体场的最终结果导致二重简并的 e_g 劈裂成 d_{z^2} 和能量更低的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道, 三重简并的 t_{2g} 劈裂成二重简并的 d_{xz} , d_{yz} 和

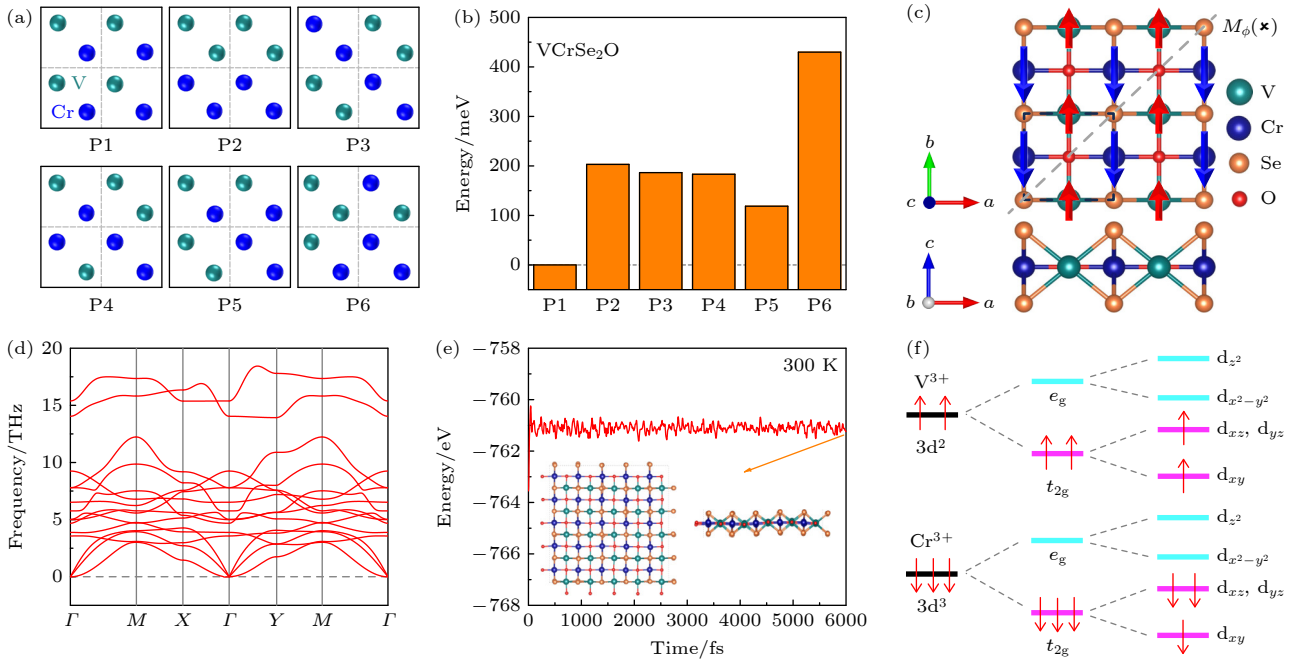


图 2 VCrSe₂O 单层的稳定性分析和电子排列示意图 (a) 在 VCrSe₂O 单层的 2×2 超胞中, V 和 Cr 原子以 1:1 比例可能存在的不同位点替换结构, 图中只标记出了 V 和 Cr 原子; (b) 不同替换结构的相对能量, 其中 P1—P6 对应图 (a) 中的 6 种结构, 以 P1 结构的能量作为参考点; (c) VCrSe₂O 单层 P1 结构的俯视图和侧视图, 其中灰色虚线为不同子晶格沿对角线方向的垂直镜面 M_ϕ , 此时镜面对称破缺; (d) VCrSe₂O 单层的声子谱; (e) VCrSe₂O 单层在 300 K 下的 AIMD; (f) 磁性原子 V 和 Cr 在局域畸变八面体下的能级分布和电子排列

Fig. 2. Stability analysis and schematic electronic configuration of the monolayer VCrSe₂O: (a) Different substitution configurations in a 2×2 supercell of the VCrSe₂O monolayer, where V and Cr atoms are located at different sites with a 1:1 ratio, only V and Cr atoms are labeled; (b) relative energies of the different substitution configurations, where P1–P6 correspond to the six structures in panel (a), with the energy of the P1 structure taken as the reference; (c) top and side views of the P1 structure of monolayer VCrSe₂O, where the gray dashed lines represent the vertical mirror planes M_ϕ of different sublattices along the diagonal direction, here the mirror symmetry is broken; (d) phonon spectrum of the monolayer VCrSe₂O; (e) AIMD simulation of the monolayer VCrSe₂O at 300 K; (f) distribution of energy levels and electrons of the magnetic atoms V and Cr in the local distorted octahedra.

能量更低的 d_{xy} 轨道, 示意图如图 2(f) 所示. 对于 V 原子, 两个自旋向上的 d 电子根据泡利不相容原理和洪特定则填充 d_{xy} 和 d_{xz} (d_{yz}) 轨道, 形成高自旋态, 贡献 $2\mu_B$ 的局域磁矩. 对于 Cr 原子, 三个自旋向下的 d 电子填充 d_{xy} , d_{xz} 和 d_{yz} 轨道, 形成高自旋态并贡献 $-3\mu_B$ 的局域磁矩. 最终的结果使得 VCrSe₂O 单层为总磁矩为 $-1\mu_B$ 的亚铁磁体.

VCrSe₂O 单层的自旋密度图如图 3(a) 和图 3(b) 所示, V 原子和 Cr 原子的自旋密度不再具有镜面对称和旋转对称, 两者自旋密度的符号正好相反, 且 Cr 原子自旋密度的大小大于 V 原子自旋密度的大小, 正好符合第一性原理的计算结果. VCrSe₂O 单层的自旋极化能带图如图 3(c) 所示, 很明显 VCrSe₂O 单层为间接带隙的亚铁磁半导体, 带隙值为 632.137 meV. 并且 UVB 在高对称点 X 和 Y 处存在巨大的谷极化, 谷极化值达到 161.824 meV, 是 V₂Se₂O 单层在 5% 单轴压缩应变下谷极化值的

近 2 倍. 图 3(d) 计算了 SOC 对能带的微扰, 相比于对称性破缺诱发的巨大谷极化, SOC 对谷极化的影响非常微小, 在后续谷极化的调控中, 我们忽略 SOC 对谷极化的影响. 通过元素分解的能带结构发现 (图 3(e) 和图 3(f)), X 谷点处的电子态是由自旋向上的 V 原子和自旋向上 Se 原子贡献, 而 Y 谷点处的电子态是由自旋向下的 Cr 原子和自旋向下的 Se 原子贡献, 因而 V 原子和 Cr 原子之间的净磁矩能影响到谷极化的大小.

类似于 V₂Se₂O 单层, 单轴应变依然可以作为一种调控手段用来调控 VCrSe₂O 单层中的谷极化值. 首先定义 VCrSe₂O 单层中 V 原子和 Cr 原子之间的净磁矩 $\Delta M(V - Cr)$ 为

$$\Delta M(V - Cr) = |M_V| - |M_{Cr}|. \quad (5)$$

通过第一性原理分别计算了 VCrSe₂O 单层沿 a 轴和 b 轴在 -5%—5% 单轴应变下谷极化和 $\Delta M(V - Cr)$ 的变化情况, 计算结果如图 4(a) 和图 4(d) 所示.

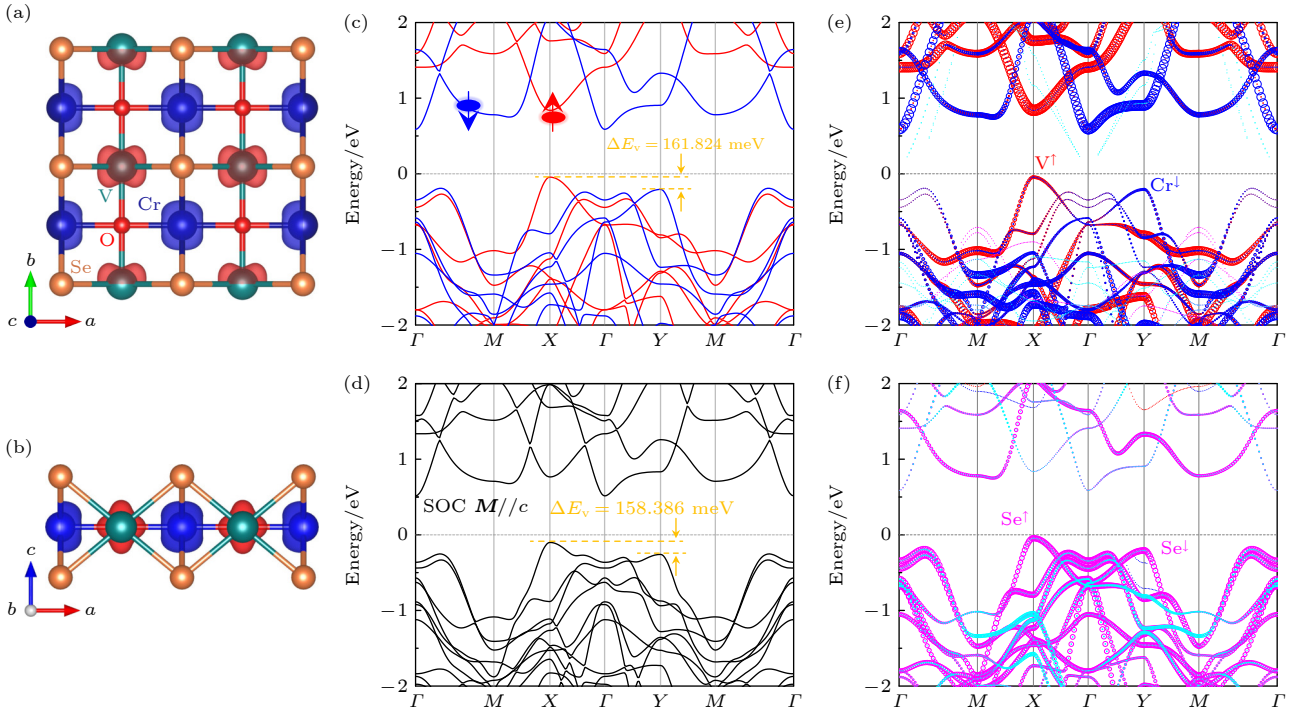


图3 VCrSe₂O单层的电子结构和轨道分布 (a) VCrSe₂O单层的自旋密度俯视图和(b)侧视图,其中等值面设为0.05 e/Å³; (c)自旋分解的能带结构和(d)SOC微扰后的能带结构,其中磁化强度M平行于c轴,黄色字体标记出了UVB的谷极化值; (e)V原子和Cr原子贡献的能带成分,其中圆圈的大小表示权重; (f)Se原子贡献的能带成分

Fig. 3. Electronic structure and orbital distribution of the VCrSe₂O monolayer: (a) Top view and (b) side view of spin density of monolayer VCrSe₂O, where the isosurface is set to 0.05 e/Å³; (c) spin-resolved band structure and (d) SOC-perturbed band structure, where the magnetization *M* is parallel to *c*-axis and the value of valley polarization of the UVB is marked in yellow; (e) contributions of V and Cr atoms on band structure, where the size of the circles indicates the weight; (f) contributions of Se atoms on band structure.

从图4(a)中的红色线可以看出 *a*轴压缩应变降低谷极化值,拉伸应变先缓慢增加谷极化值,在3%以后趋于平稳.从图4(a)中的蓝色线可以看出,除了3%以后的拉伸应变,Δ*M*(V-Cr)随应变趋于近线性变化.从图4(a)中可以总结出 VCrSe₂O单层中UVB的谷极化随Δ*M*(V-Cr)的大小增加而增加,变化趋势类似于V₂Se₂O单层中单轴应变下的情况.我们分别画出了沿*a*轴压缩5%和拉伸5%情况下的能带图,如图4(b)和图4(c)所示.5%的压缩应变使谷极化值降低到85.798 meV,5%的拉伸应变能使谷极化值增大到177.755 meV,但此时价带的极大值点并不在*X*和*Y*高对称点上,不利于谷极化的应用.

图4(d)显示了*b*轴应变对UVB的谷极化和Δ*M*(V-Cr)的影响,可以看出压缩应变能明显增大谷极化值,拉伸应变降低谷极化值.Δ*M*(V-Cr)与单轴应变仍成近线性关系.不同于*a*轴应变的情况,*b*轴应变诱发的谷极化值随Δ*M*(V-Cr)的大小增加而减少.这可以从*a*轴和*b*轴之间的相对比

例变化来解释,在V₂Se₂O单层中,单轴压缩或者拉伸都提高了*a*轴和*b*轴之间的相对比例,相应地增大了谷极化值.而对于VCrSe₂O单层来说,*a*轴和*b*轴的晶格常数分别为4.099 Å和4.010 Å,*a*轴拉伸提高了*a*轴和*b*轴之间的相对比例,产生了更大的谷极化.类似地,当沿*b*轴压缩时,*a*轴和*b*轴之间的相对比例提高,因而诱发更大的谷极化值.沿*b*轴5%的压缩应变对应的自旋极化能带结构如图4(e)所示,此时的谷极化值达到268.016 meV.5%的拉伸应变的能带图如图4(f)所示,此时的谷极化值降低为114.33 meV.有趣的是,沿*b*轴5%的拉伸应变使得价带上Γ-*X*和Γ-*Y*高对称路径上的两个谷点更为突出,计算结果表明,谷间的能量差达到了28.636 meV.因而,在沿*b*轴5%的拉伸应变下,VCrSe₂O单层中出现双谷极化效应,这点明显不同于常规的谷极化体系,从而使得VCrSe₂O单层在谷电子学领域具有特殊的应用价值.

为了打破交错磁体中不同子晶格的镜面对称,并使不同磁性原子之间出现净磁矩,另一种可行的

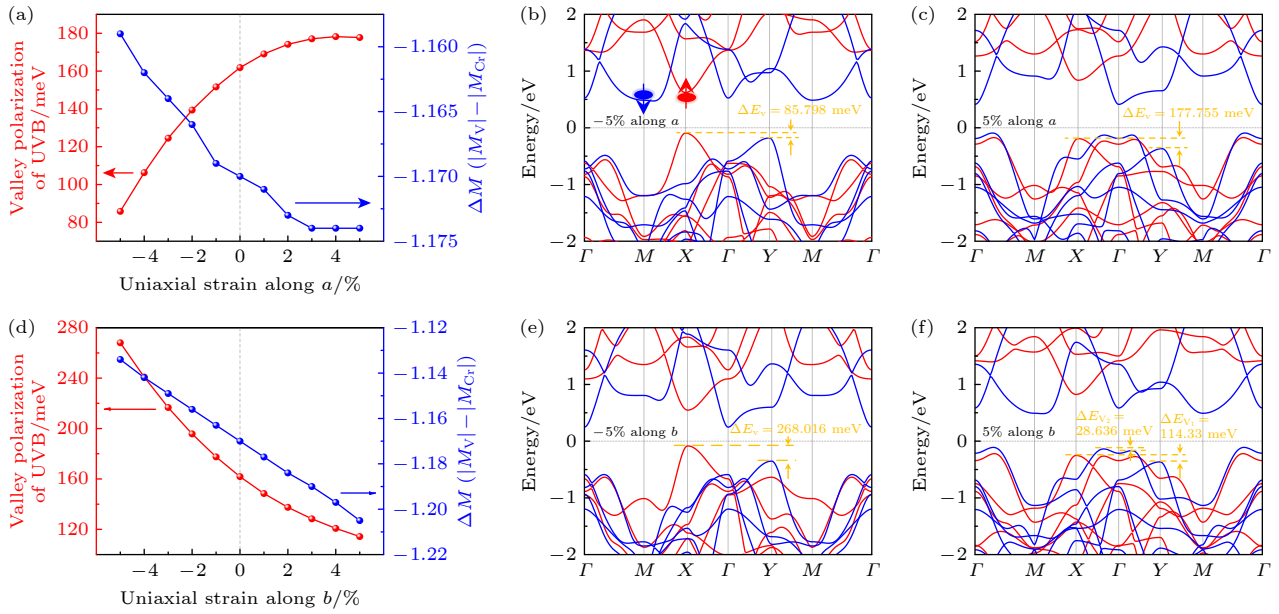


图4 VCrSe₂O单层沿 *a*轴和 *b*轴应变下的谷极化、净磁矩和能带结构 (a), (d) VCrSe₂O单层沿 *a*轴和 *b*轴应变下, UVB的谷极化和 $\Delta M(V - Cr)$ 随单轴应变的变化; (b), (e) *a*轴和 *b*轴在-5%压缩应变下自旋分解的能带结构; (c), (f) *a*轴和 *b*轴在5%拉伸应变下自旋分解的能带结构. 能带图中用黄色字体分别标记出了对应单轴应变下的谷极化值

Fig. 4. Valley polarization, net magnetic moment and band structure of VCrSe₂O monolayer under uniaxial strain along *a*-axis and *b*-axis directions: (a), (d) Variation of valley polarization of the UVB and $\Delta M(V - Cr)$ with uniaxial strain along the *a*-axis and *b*-axis, respectively, for the monolayer VCrSe₂O; (b), (e) the spin-resolved band structures under -5% compressive strain along the *a*-axis and *b*-axis, respectively; (c), (f) the spin-resolved band structures under 5% tensile strain along the *a*-axis and *b*-axis, respectively. On the band structures, the values of valley polarization corresponding to the relevant uniaxial strains are marked in yellow.

策略是构建范德瓦耳斯异质结^[54], 通过控制层间的堆垛方式来改变不同磁性原子的局域环境, 同时伴随着镜面对称的破缺, 从而产生显著的谷极化效应. 通过研究发现, α -SnO单层具有与V₂Se₂O单层同样的四方晶系^[55], 它们单胞的晶格失配率在5%左右, 因而可以形成稳定的异质结构. 通过控制 α -SnO中上层Sn原子的位置, 我们构建了3种具有高对称性的堆垛结构, 分别为上层Sn原子位于V₂Se₂O单层的O原子下面, 得到的堆垛结构命名为VSH1 (van der Waals stacked heterojunctions 1); 上层的Sn原子位于Se原子下面, 命名为VSH2; 上层的Sn原子位于V原子下面, 命名为VSH3. 这三种堆垛结构的基态对应的俯视图和侧视图如图5所示. 计算发现VSH1为最稳定的堆垛结构. 相比之下, VSH2的能量比VSH1高出19.878 meV, VSH3的能量与VSH2近似. 我们计算了三种堆垛情况的能带图和层分解的能带结构, 如图6所示. 计算发现VSH1和VSH2并无谷极化现象的出现, 主要原因在于这两种堆垛方式没有破坏不同子晶格的镜面对称, 如图6(a)和图6(b)所示. 有趣的是, 通过层分解的能带结构(图6(d), (e)), 发现完

全由 α -SnO层贡献的能带结构在高对称路径 *M-X- Γ -Y-M* 上出现较小的自旋劈裂. 我们可以总结为非磁体系 α -SnO单层与交错磁体V₂Se₂O单层形成异质结时, 由于V₂Se₂O单层的磁近邻效应, 使得非磁性体系 α -SnO层出现自旋劈裂, 从而具有交错磁性.

VSH3不同于VSH1和VSH2, 由于两个V原子所处的局域环境不一致, 导致*a*轴和*b*轴方向的晶格常数存在差异, 分别为 $a = 3.975 \text{ \AA}$, $b = 3.989 \text{ \AA}$. 镜面对称破缺必然使得 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 不为零, 因而产生显著的谷极化现象. 如图6(c)和图6(f)所示, 第一性原理计算的能带图和层分解的能带结构表明在VSH3中, 由于 α -SnO与V₂Se₂O单层特殊的堆垛方式, 使得V₂Se₂O单层贡献的能带中出现显著的谷极化现象, LCB的谷极化大小达到99.463 meV.

理论上, 通过控制异质结的层间距离可以有效地调控异质结的电子状态, 并反映在能带结构的变化上^[56]. 本文通过第一性原理计算了VSH3中的谷极化和 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 随层间距离的变化, 如图7(a)所示. 计算发现VSH3平衡状态下的层间距离 $d_0 = 3.016 \text{ \AA}$ (图5(f)). 降低层间距离能显著

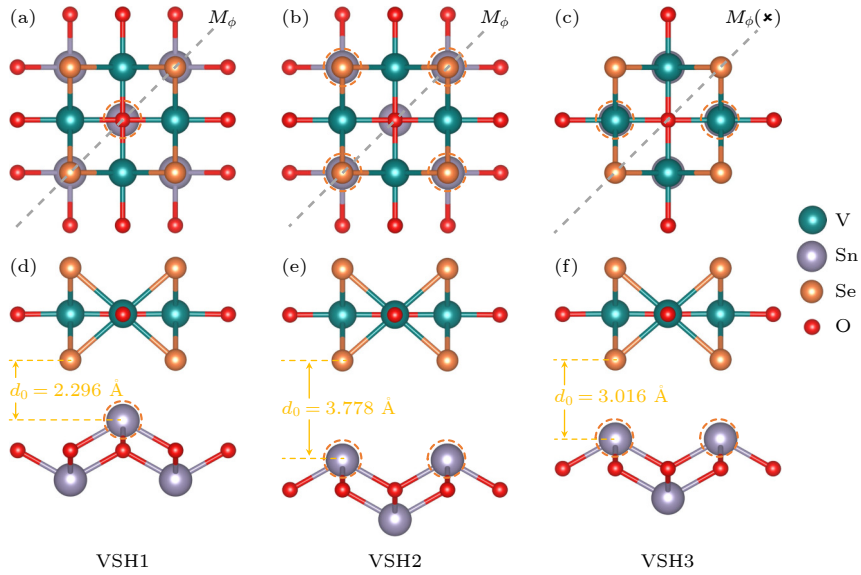


图 5 V_2Se_2O/SnO 异质结的三种堆垛结构 (a) 和 (d), (b) 和 (e), (c) 和 (f) 分别对应 V_2Se_2O/SnO 异质结三种堆垛结构的俯视图和侧视图, 其中虚线圆圈表示 α -SnO 层中上层的 Sn 原子, 黄色字体标记了不同堆垛方式下异质结的层间距离

Fig. 5. Three stacked configurations of V_2Se_2O/SnO heterojunctions: (a) and (d), (b) and (e), (c) and (f) correspond to the top and side views of three stacked structures of the V_2Se_2O/SnO heterojunction, respectively, where the dashed circles indicate the upper Sn atoms in the α -SnO layer and the interlayer distances of the heterojunctions under different stacked models are marked in yellow.

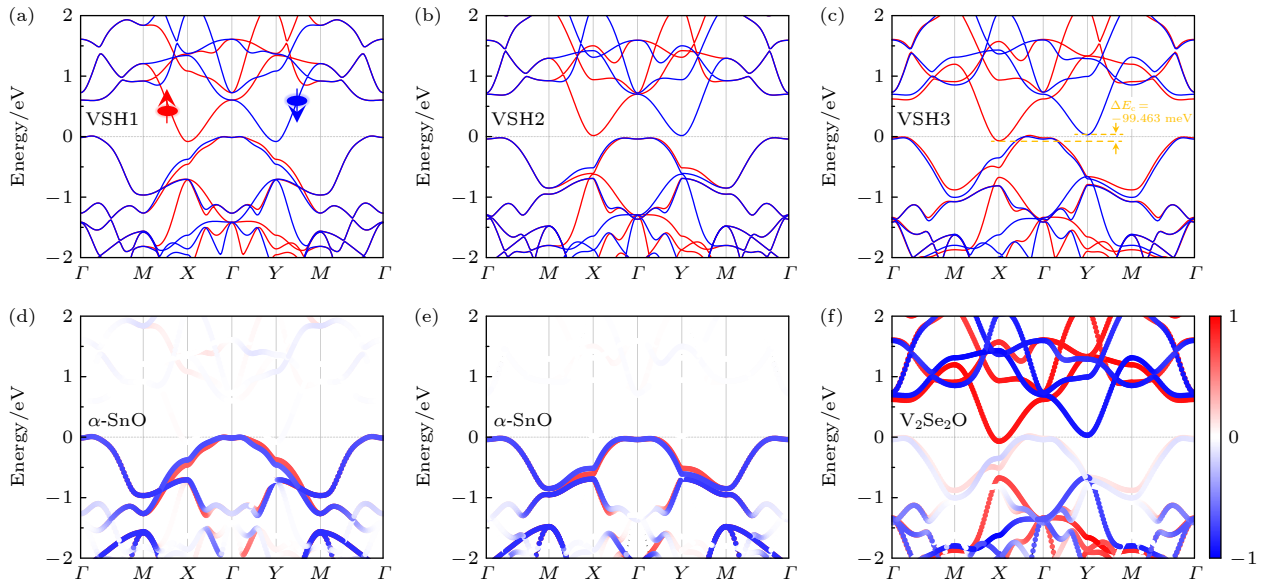


图 6 V_2Se_2O/SnO 异质结三种堆垛方式下层分解的能带结构 (a)–(c) V_2Se_2O/SnO 异质结三种堆垛方式下自旋分解的能带结构, 其中黄色字体标记了 VSH3 异质结 LCB 的谷极化值; (d)–(f) 对应三种堆垛方式下层分解的能带结构, 其中色阶带表示相应层中自旋向上 (红色) 和自旋向下 (蓝色) 的电子在能带上的投影权重

Fig. 6. Layer-resolved band structures of V_2Se_2O/SnO heterojunctions corresponding to three stacked configurations: (a)–(c) The spin-resolved band structures of the V_2Se_2O/SnO heterojunction under three different stacked structures, respectively, where the values of valley polarization of the LCB in the VSH3 are marked in yellow; (d)–(f) correspond to the layer-resolved band structures for the three stacked structures, respectively, where the chromatic bands represent the weights of projected spin-up (red) and spin-down (blue) electrons on the bands in the relevant layers.

地提高 V_2Se_2O 层的谷极化值, 在 $d_0 = 0.3 \text{ \AA}$ 时, 谷极化大小达到 220.804 meV , 此时 V_2Se_2O 层的能带和 SnO 层的能带并无交叠, 如图 7(b) 所示. 在 $d_0 = 0.5 \text{ \AA}$ 时, 谷极化大小达到巨大的 379.189 meV .

虽然此时 V_2Se_2O 层的能带和 SnO 层的能带存在交叠, 但通过层分解的能带结构发现谷点处的能带主要由 V_2Se_2O 层贡献, 因而谷极化来自上层的交错磁体 V_2Se_2O 层. 增大层间距离会降低谷极化的

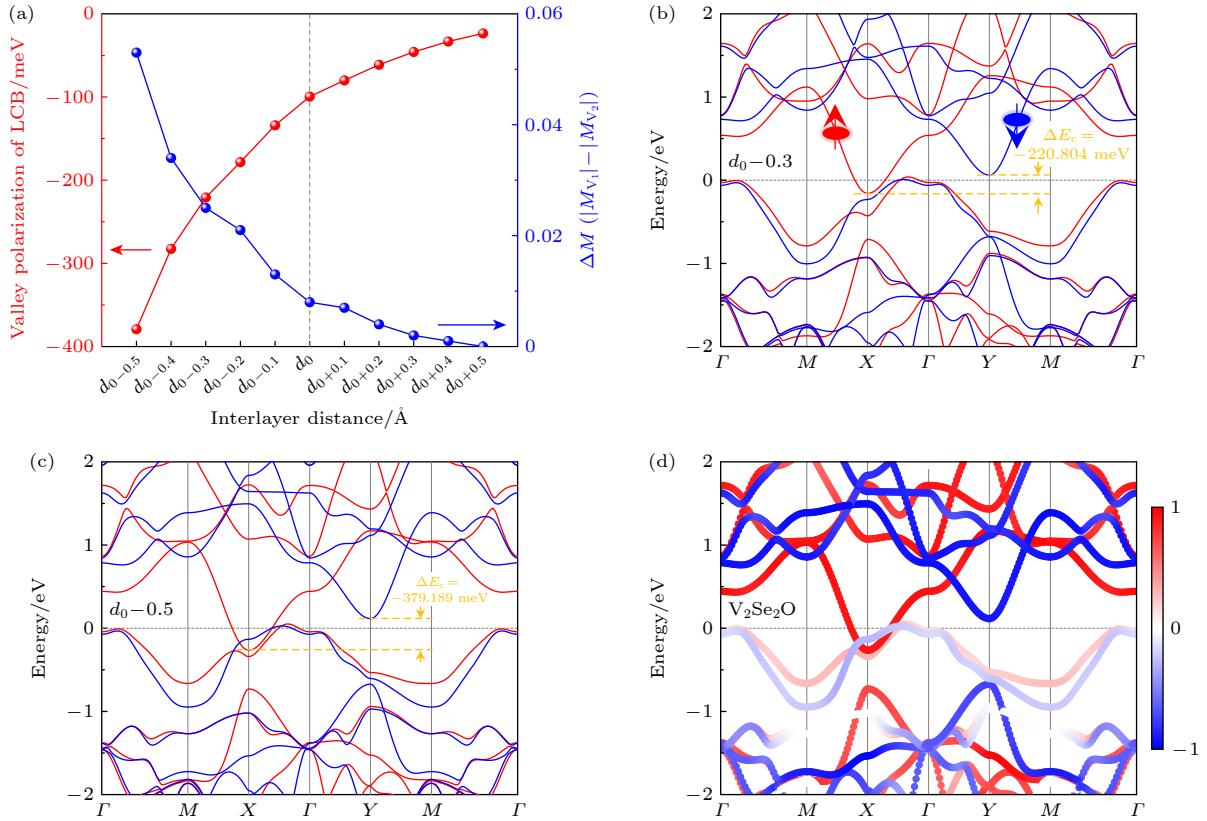


图7 VSH3的谷极化和净磁矩随层间距离的变化,以及层分解的能带结构 (a) VSH3中,LCB的谷极化和 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 随层间距离的变化;(b),(c)层间距离压缩0.3和0.5 Å时,自旋分解的能带结构,其中黄色字体为LCB中谷极化值;(d)层间距离压缩0.5 Å时, V_2Se_2O 层贡献的能带结构,其中色阶带表示自旋向上(红色)和自旋向下(蓝色)的电子在能带上的投影权重

Fig. 7. Valley polarization and net magnetic moment versus interlayer distance, and layer-resolved band structures in VSH3: (a) Variation of the valley polarization of the LCB and $\Delta M(V_1 - V_2)$ with interlayer distance in VSH3; (b), (c) the spin-resolved band structures under interlayer compression of 0.3 and 0.5 Å, respectively, where the values of valley polarization of the LCB are marked in yellow; (d) contribution of band from the V_2Se_2O layer under interlayer compression of 0.5 Å, where the chromatic bands represent the weights of projected spin-up (red) and spin-down (blue) electrons on the bands.

大小,在 $d_0 + 0.5$ Å时,谷极化大小趋近于零.图7(a)蓝色的线显示 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 随层间距离的增大而减小,在 $d_0 + 0.5$ Å时, $\Delta M(V_1 - V_2)$ 趋于零.由于谷极化的大小随着 $\Delta M(V_1 - V_2)$ 的减小而减小,在净磁矩为零时,谷极化值也就趋近于零,如图7(a)红线所示.这一现象也进一步证实了谷极化与交错磁体磁性原子之间净磁矩的关系.

4 结论

本文在交错磁体 V_2Se_2O 单层中发现,单轴应变能改变V原子之间净磁矩的大小,并伴随着谷极化的变化.基于净磁矩与谷极化存在的关联,在单层交错磁体的基础上提出了实现巨大谷极化的两种策略,分别为磁性原子的替换和构建范德瓦耳斯异质结.通过Cr原子替换 V_2Se_2O 单层中的一

个V原子形成亚铁磁单层 $VCrSe_2O$,大的净磁矩使 $VCrSe_2O$ 出现巨大的谷极化.此外, a 轴和 b 轴应变能显著地提升 $VCrSe_2O$ 单层的谷极化值,同时伴随着净磁矩的变化.通过构建 V_2Se_2O/SnO 范德瓦耳斯异质结,发现镜面对称破缺的堆垛方式能使V原子之间出现净磁矩,并使异质结出现显著的谷极化.压缩层间距离0.5 Å能实现近400 meV的巨大谷极化,并伴随着V原子之间净磁矩的增大.本工作发现了单层交错磁体中磁性原子之间净磁矩与谷极化的关联,提出了两种实现巨大谷极化的策略,为基于交错磁体构筑的亚铁磁单层和异质结材料在谷电子学领域的研究奠定基础.

参考文献

- [1] Li L, Shao L, Liu X, Gao A, Wang H, Zheng B, Hou G, Shehzad K, Yu L, Miao F, Shi Y, Xu Y, Wang X 2020 *Nat.*

- Nanotechnol.* **15** 743
- [2] Sun Z H, Guan H M, Fu L, Shen B, Tang N 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 027302 (in Chinese) [孙真昊, 管鸿明, 付雷, 沈波, 唐宁 2021 物理学报 **70** 027302]
- [3] Schaibley J R, Yu H, Clark G, Rivera P, Ross J S, Seyler K L, Yao W, Xu X 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16055
- [4] Xiao D, Liu G B, Feng W, Xu X, Yao W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 196802
- [5] Xu X, Yao W, Xiao D, Heinz T F 2014 *Nat. Phys.* **10** 343
- [6] MacNeill D, Heikes C, Mak K F, Anderson Z, Kormányos A, Zólyomi V, Park J, Ralph D C 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 037401
- [7] Li Y, Ludwig J, Low T, Chernikov A, Cui X, Arefe G, Kim Y D, Van Der Zande A M, Rigosi A, Hill H M, Kim S H, Hone J, Li Z, Smirnov D, Heinz T F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 266804
- [8] Aivazian G, Gong Z, Jones A M, Chu R L, Yan J, Mandrus D G, Zhang C, Cobden D, Yao W, Xu X 2015 *Nat. Phys.* **11** 148
- [9] Srivastava A, Sidler M, Allain A V, Lembke D S, Kis A, Imamoglu A 2015 *Nat. Phys.* **11** 141
- [10] Peng R, Ma Y, Zhang S, Huang B, Dai Y 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 3612
- [11] Zhou J, Lin J, Sims H, Jiang C, Cong C, Brehm J A, Zhang Z, Niu L, Chen Y, Zhou Y, Wang Y, Liu F, Zhu C, Yu T, Suenaga K, Mishra R, Pantelides S T, Zhu Z, Gao W, Liu Z, Zhou W 2020 *Adv. Mater.* **32** 1906536
- [12] Matsuoka H, Habe T, Iwasa Y, Koshino M, Nakano M 2022 *Nat. Commun.* **13** 5129
- [13] Zhong D, Seyler K L, Linpeng X, Wilson N P, Taniguchi T, Watanabe K, McGuire M A, Fu K M C, Xiao D, Yao W, Xu X 2020 *Nat. Nanotechnol.* **15** 187
- [14] Abdollahi M, Tagami M B 2023 *Phys. Rev. B* **108** 024427
- [15] Zhang W, Zhu H, Zhang W, Wang J, Zhang T, Yang S, Shao B, Zuo X 2024 *Appl. Surf. Sci.* **647** 158986
- [16] Mak K F, McGill K L, Park J, McEuen P L 2014 *Science* **344** 1489
- [17] Mak K F, He K, Shan J, Heinz T F 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 494
- [18] Hsu W T, Chen Y L, Chen C H, Liu P S, Hou T H, Li L J, Chang W H 2015 *Nat. Commun.* **6** 8963
- [19] Tong W Y, Gong S J, Wan X, Duan C G 2016 *Nat. Commun.* **7** 13612
- [20] Xie W, Zhang L, Yue Y, Li M, Wang H 2024 *Phys. Rev. B* **109** 024406
- [21] Pan W 2022 *Phys. Rev. B* **106** 125122
- [22] Zhao J, Zhang T, Peng R, Dai Y, Huang B, Ma Y 2022 *J. Phys. Chem. Lett.* **13** 8749
- [23] Feng X, Xu X, He Z, Peng R, Dai Y, Huang B, Ma Y 2021 *Phys. Rev. B* **104** 075421
- [24] Xie W, Xu X, Li M, Wang H 2023 *J. Magn. Magn. Mater.* **573** 170662
- [25] Zhao P, Ma Y, Lei C, Wang H, Huang B, Dai Y 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 261605
- [26] Sheng K, Zhang B, Yuan H K, Wang Z Y 2022 *Phys. Rev. B* **105** 195312
- [27] Cheng H X, Zhou J, Ji W, Zhang Y N, Feng Y P 2021 *Phys. Rev. B* **103** 125121
- [28] Liu Y, Feng Y, Zhang T, He Z, Dai Y, Huang B, Ma Y 2023 *Adv. Funct. Mater.* **33** 2305130
- [29] Zhang D, Li A, Chen X, Zhou W, Ouyang F 2022 *Phys. Rev. B* **105** 085408
- [30] Li P, Liu B, Chen S, Zhang W X, Guo Z X 2024 *Chin. Phys. B* **33** 017505
- [31] Luo C, Huang Z, Qiao H, Qi X, Peng X 2024 *J. Phys. Mater.* **7** 022006
- [32] Šmejkal L, Sinova J, Jungwirth T 2022 *Phys. Rev. X* **12** 031042
- [33] Šmejkal L, Sinova J, Jungwirth T 2022 *Phys. Rev. X* **12** 040501
- [34] Šmejkal L, González-Hernández R, Jungwirth T, Sinova J 2020 *Sci. Adv.* **6** eaaz8809
- [35] Leeb V, Mook A, Šmejkal L, Knolle J 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 236701
- [36] 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
- [37] Ma H Y, Hu M, Li N, Liu J, Yao W, Jia J F, Liu J 2021 *Nat. Commun.* **12** 2846
- [38] Yang G, Li Z, Yang S, Li J, Zheng H, Zhu W, Pan Z, Xu Y, Cao S, Zhao W, Jana A, Zhang J, Ye M, Song Y, Hu L H, Yang L, Fujii J, Vobornik I, Shi M, Yuan H, Zhang Y, Xu Y, Liu Y 2025 *Nat. Commun.* **16** 1442
- [39] Zhu Y, Chen T, Li Y, Qiao L, Ma X, Liu C, Hu T, Gao H, Ren W 2024 *Nano Lett.* **24** 472
- [40] Wu Y, Deng L, Yin X, Tong J, Tian F, Zhang X 2024 *Nano Lett.* **24** 10534
- [41] Chen X, Wang D, Li L, Sanyal B 2023 *Appl. Phys. Lett.* **123** 022402
- [42] Guo S D, Guo X S, Cheng K, Wang K, Ang Y S 2023 *Appl. Phys. Lett.* **123** 082401
- [43] Li J Y, Fan A D, Wang, Y K, Zhang Y, Li S 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 222404
- [44] Jiang Y, Zhang X, Bai H, Tian Y, Zhang B, Gong W J, Kong X 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 053102
- [45] Tan C Y, Gao Z F, Yang H C, Liu Z X, Liu K, Guo P J, Lu Z Y 2025 *Phys. Rev. B* **111** 094411
- [46] Zhang R W, Cui C, Li R, Duan J, Li L, Yu Z M, Yao Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 056401
- [47] Xie W, Xu X, Yue Y, Xia H, Wang H 2025 *Phys. Rev. B* **111** 134429
- [48] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [49] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [50] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [51] Dudarev S L, Botton G A, Savrasov S Y, Humphreys C J, Sutton A P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 1505
- [52] Grimme S, Antony J, Ehrlich S, Krieg H 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 154104
- [53] Huang C, Feng J, Wu F, Ahmed D, Huang B, Xiang H, Deng K, Kan E 2018 *J. Am. Chem. Soc.* **140** 11519
- [54] Li X Y, Li Z H, Cao S G, Han J N, Fan Z Q, Zhang Z H 2024 *Sci. Sin. Phys. Mech. Astron.* **54** 126811 (in Chinese) [李鑫焱, 李占海, 曹胜果, 韩佳凝, 范志强, 张振华 2024 中国科学: 物理学 力学 天文学 **54** 126811]
- [55] Seixas L, Rodin A S, Carvalho A, Castro Neto A H 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 206803
- [56] Liu S Q, Li S Z, Si J S, Zhang W B 2023 *Sci. Sin. Phys. Mech. Astron.* **53** 117311 (in Chinese) [刘水青, 李树宗, 司君山, 张卫兵 2023 中国科学: 物理学 力学 天文学 **53** 117311]

SPECIAL TOPIC—2D materials and future information devices

Realizing giant valley polarization effect based on monolayer altermagnets*

XIE Weifeng¹⁾ WANG Libo¹⁾ XU Xiong²⁾ YUE Yunliang³⁾
XIA Huayan¹⁾ HE Longhui¹⁾ WANG Hui^{2)†}

1) (*School of Microelectronics and Physics, Hunan University of Technology and Business, Changsha 410205, China*)

2) (*School of Physics, Central South University, Changsha 410083, China*)

3) (*College of Information Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225127, China*)

(Received 7 August 2025; revised manuscript received 28 September 2025)

Abstract

Stable and remarkable valley polarization effect is the key to utilizing valley degree of freedom in valleytronic devices. Recently, a novel collinear magnetic material known as altermagnet, which is different from ferromagnets and antiferromagnets, has attracted widespread attention. Theoretical studies have revealed that the monolayer altermagnet V_2Se_2O exhibits spin-valley locking induced by crystal symmetry rather than traditional time-reversal symmetry. Uniaxial strain can break the corresponding crystal symmetry, leading to a remarkable non-relativistic valley polarization effect. Therefore, beyond uniaxial strain, are there alternative strategies to break the crystal symmetry in altermagnets and achieve remarkable valley polarization? According to first-principles calculations and symmetry analysis, we reveal that valley polarization effect in monolayer V_2Se_2O altermagnet is correlated with the net magnetic moment between magnetic V atoms under uniaxial strain, thereby proposing two strategies for achieving giant valley polarization effect. Firstly, substituting one V atom in V_2Se_2O with Cr to construct a ferrimagnetic monolayer $VCrSe_2O$ enhances the net magnetic moment between magnetic atoms, thereby realizing a giant valley polarization effect. Applying uniaxial strain along either the a-axis or b-axis significantly increases the value of valley polarization, which exhibits a nearly linear relationship with the net magnetic moments between the magnetic atoms. Secondly, constructing a van der Waals heterostructure composed of V_2Se_2O and α -SnO monolayers breaks mirror symmetry, thereby inducing a net magnetic moment, which in turn causes a remarkable valley polarization effect. Compressing the interlayer distance of the heterostructure can increase the net magnetic moment between V atoms, thereby enhancing the value of valley polarization to nearly 400 meV. This work reveals that valley polarization in monolayer altermagnet is correlated with the net magnetic moment between magnetic atoms. Finally, we propose two strategies to achieve giant valley polarization based on monolayer altermagnets, providing theoretical guidance for the potential applications of ferrimagnetic monolayers and altermagnet-based heterostructures in valleytronics.

Keywords: valley degree of freedom, monolayer altermagnets, valley polarization, ferrimagnetic, van der Waals heterostructure

PACS: 75.50.Pp, 75.70.Ak, 85.75.-d, 61.50.Ah

DOI: [10.7498/aps.74.20251066](https://doi.org/10.7498/aps.74.20251066)

CSTR: [32037.14.aps.74.20251066](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20251066)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12504071, 12174450, 11874429), the Changsha Natural Science Foundation, China (Grant No. kg2502211), the Science and Technology Innovation Program of Hunan Province, China (Grant No. 2024RC1013), and the Key Project of Hunan Provincial Natural Science Foundation, China (Grant No. 2024JJ3029).

† Corresponding author. E-mail: huiwang@csu.edu.cn

基于单层交错磁体实现巨大的谷极化效应

谢伟锋 王利波 许雄 乐云亮 夏华艳 贺龙辉 王辉

Realizing giant valley polarization effect based on monolayer altermagnets

XIE Weifeng WANG Libo XU Xiong YUE Yunliang XIA Huayan HE Longhui WANG Hui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 227502 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20251066

CSTR: 32037.14.aps.74.20251066

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251066>

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

WSeTe/CrI₃范德瓦耳斯异质结能谷的调控

Valley manipulation in WSeTe/CrI₃ van der Waals heterostructures: A first-principles study

物理学报. 2025, 74(9): 097101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241750>

CuPc/MoS₂范德瓦耳斯异质结荧光特性

Photoluminescence properties of CuPc/MoS₂ van der Waals heterostructure

物理学报. 2022, 71(12): 128103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220132>

As/HfS₂范德瓦耳斯异质结电子光学特性及量子调控效应

Electronic and optical properties and quantum tuning effects of As/HfS₂ van der Waals heterostructure

物理学报. 2022, 71(17): 177304 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220371>

石墨烯/C₃N范德瓦耳斯异质结的可调电子特性和界面接触

Tunable electronic structures and interface contact in graphene/C₃N van der Waals heterostructures

物理学报. 2023, 72(14): 147302 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230318>

Sb/SnC范德瓦耳斯异质结光电性质的层间转角依赖性及其应用

Interlayer angle dependence of photoelectric properties of Sb/SnC van der Waals heterojunction and its application

物理学报. 2024, 73(22): 227101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241138>

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>