DOI：10.19789/j.1004-9398.2026.03.008　　**Open Access**
文献引用：张研研，姜婉依，裴威，等．自旋轨道耦合对IV族类石墨烯结构材料电子输运的影响[J]．首都师范大学学报（自然科学版），2026，47（3）：85-92. ZHANG Y Y，JIANG W Y，PEI W，et al. Spin-orbit coupling effects on electronic transport in group-IV graphene-like materials[J]. Journal of Capital Normal University（Natural Science Edition），2026，47（3）：85-92.

自旋轨道耦合对IV族类石墨烯结构材料电子输运的影响*

张研研[1]，姜婉依[1]，裴　威[1**]，郑　军[1]，袁瑞玚[2**]

（1. 渤海大学物理科学与技术学院，辽宁 锦州　121013；
2. 首都师范大学物理系，北京　100048）

摘要：利用非平衡格林函数方法，对IV族类石墨烯结构的电子输运特性进行了系统的理论研究，主要分析了本征有效自旋轨道耦合与Rashba自旋轨道耦合在小尺寸体系中的作用机制及其对输运路径、电导和能带特性的影响。结果表明：在较弱的本征自旋轨道耦合下，电子更倾向于通过边缘态之间的隧穿通道输运；随着本征耦合强度增大，边缘态间相互作用减弱，导致更多电子沿边缘态传输。引入Rashba自旋轨道耦合后，不同自旋取向间可发生自旋翻转，量子隧穿增强，从而削弱边缘态的局域流。若Rashba自旋轨道耦合较弱，价带中不同自旋电子分别向高能区和低能区移动，能带交叠增大并提升纳米带的电导。当Rashba自旋轨道耦合大于本征耦合强度时，电子能带附近出现可调带隙。本研究结果为基于自旋轨道耦合效应的自旋电子器件设计提供了理论基础。

关键词：电子输运；本征有效自旋轨道耦合；Rashba自旋轨道耦合；类石墨烯结构材料
中图分类号：O469　　**文献标志码**：A

Spin-orbit coupling effects on electronic transport in group-IV graphene-like materials*

ZHANG Yanyan[1]，JIANG Wanyi[1]，PEI Wei[1**]，ZHENG Jun[1]，YUAN Ruiyang[2**]

（1. College of Physics Science and Technology，Bohai University，Jinzhou Liaoning　121013；
2. Department of Physics，Capital Normal University，Beijing　100048）

Abstract：A systematic theoretical study was investigated on the electronic transport characteristics in group-IV graphene-like structures using the non-equilibrium Green's function method. This article mainly analyzes the mechanism of intrinsic effective spin orbit coupling（SOC）and Rashba SOC in small-sized systems，and their effects on transport pathways，conductivity，and band characteristics. The results show that under weak intrinsic SOC，electrons tend to be transported through tunneling channels between edge states. When the intrinsic coupling strength increases，the interaction between edge states diminishes，causing more electrons to propagate along the edges. After introducing Rashba SOC，spin-flipping can occur between different spin orientations，enhancing quantum tunneling，and weakening the localization of edge-state currents. When the Rashba SOC is weak，electrons with different spins in

收稿日期：2025-01-13
*国家自然科学基金项目（12174038，11804236）
**通信作者：peiwei@qymail.bhu.edu.cn；yuanry@mail.cnu.edu.cn

the valence band move toward higher- and lower-energy regions, leading to an increased overlap of bands and enhancing the conductance in the nanoribbon. Furthermore, when the Rashba SOC exceeds the intrinsic SOC, a tunable band gap emerges near the electron bands. The results provide theoretical insights into spin-orbit coupling effects that may facilitate the design of future spintronic devices.

Keywords: electronic transport; intrinsic effective spin-orbit coupling; Rashba spin-orbit coupling; graphene-like materials

CLC: O469 **DC**: A

0 引 言

电子既具有电荷,也具有自旋等内禀属性,传统半导体器件主要依靠电荷输运来实现信息处理。随着对磁性纳米多层膜(巨磁阻效应)和磁性隧道结(隧道磁阻效应)研究的深入,研究者逐渐认识到,自旋角动量可代替电荷成为信息存储的新载体[1-3]。电场与磁场是调控电子输运的典型外场。通常情况下,磁场用于调节电子自旋,但相比之下电场更易被精细操控,可用于进一步提高信息单元密度和写入速度[4]。自旋轨道耦合(spin-orbit coupling,SOC)是连接电子自旋与轨道运动的关键纽带,为利用外电场调控电子轨道运动、从而改变自旋状态提供了可行途径[5]。此外,磁晶各向异性、自旋霍尔效应和拓扑绝缘体等多种重要现象都与SOC紧密相关,使其在自旋电子学领域备受关注。

SOC是电子自旋与其在原子或晶体势场中运动的轨道之间的相互作用[6-7]。该效应起源于相对论修正,在电子自身参考系中,原本静止的原子核或离子势场会表现出磁场分量,从而与电子自旋磁矩耦合[8]。在微观层面,SOC不仅影响能带结构、磁性和输运性质,还为拓扑量子态与新奇磁性的研究奠定了重要基础。在固体中,电子的运动受周期性晶格势的调控。通常将原子内SOC与由对称性、界面或应变等几何因素引起的附加效应,统称为“有效自旋轨道耦合”。当结构反演对称性破缺(异质结、表面或界面)时,会出现Rashba SOC[8-10]。此时,因垂直方向晶体势场的不对称,附加电场引起电子自旋分裂。Rashba SOC能混合自旋上下态,并在体系边界诱导多种拓扑相,如谷极化量子反常霍尔效应(quantum anomalous Hall effect,QAHE)[11-12]和自旋-谷极化QAHE[13]。在二维蜂窝状晶格中,Rashba SOC效应还可带来不含谷边界态的量子自旋霍尔效应(quantum spin Hall effect,QSHE)[14-15]。

2005年以来,拓扑绝缘体在凝聚态物理中备受关注。其边缘或表面态因能带内在的拓扑特征而呈现金属性,并在拓扑保护下实现近乎无损耗的输运,可有效对抗缺陷散射,为低功耗电子器件提供了理想平台[16-17]。2010年,Hasan和Kane[18]基于单层石墨烯首次提出了二维拓扑绝缘体的理论模型。然而,由于石墨烯为平层蜂窝状结构,其本征SOC只能达到二阶水平,对应的能隙通常处于μeV量级。与石墨烯相比,由Si、Ge、Sn和Pb等IV族原子形成的翘曲蜂窝状单原子层具有更高的热力学稳定性[19],其起伏结构使本征SOC包含一阶相互作用,进而带来更大的体电子态能隙[20-25]。

目前,通过分子束外延技术,已在金属或半导体衬底上成功制备了硅烯[26-28]、锗烯[29-30]、锡烯[31-32]以及铅锡[33-34]。近年来,类石墨烯纳米带在电场、磁场、铁磁交换场和偏振光场等多种外场作用下的电子输运特性引起了广泛关注[35-38]。有效利用垂直电场调控Rashba SOC强度,进而调节材料的能带结构与电子输运路径,不仅为开发低功耗、高效率的自旋阀和自旋传感器等新型器件提供了重要途径,也为未来自旋输运器件和拓扑电子电路的设计奠定了基础。本文主要研究本征SOC及最近邻与次近邻原子之间Rashba SOC对小尺寸类石墨烯结构电子输运路径的影响,并进一步揭示不同强度的Rashba SOC对其能带结构和电导特性的调控作用。

1 研究方法

为系统研究类石墨烯材料的电子结构与输运特性,本文在紧束缚近似下构建包含Rashba SOC的类石墨烯晶格模型,以揭示电子能带特征,并采用格林函数方法计算器件在低温条件下的自旋相关电导和局域电流分布。

1.1　类石墨烯结构的紧束缚模型

类石墨烯结构中考虑最近邻和次近邻Rashba SOC的紧束缚近似哈密顿量可以表示为[25,39-40]

$$\boldsymbol{H}=-t\sum_{<ij>,\sigma}\boldsymbol{c}_{i\sigma}^{\dagger}\boldsymbol{c}_{j\sigma}+\mathrm{i}\frac{\lambda_i}{3\sqrt{3}}\sum_{<<ij>>,\sigma\bar{\sigma}}v_{ij}\boldsymbol{c}_{i\sigma}^{\dagger}\boldsymbol{s}_{\sigma\bar{\sigma}}^{z}\boldsymbol{c}_{j\bar{\sigma}}+$$
$$i\lambda_{\mathrm{R1}}\sum_{<ij>,\sigma\bar{\sigma}}\boldsymbol{c}_{i\sigma}^{\dagger}(\vec{\boldsymbol{s}}\times\vec{d}_{ij}^{\,0})_{\sigma\bar{\sigma}}^{z}\boldsymbol{c}_{j\bar{\sigma}}-$$
$$i\frac{2}{3}\lambda_{\mathrm{R2}}\sum_{<<ij>>,\sigma\bar{\sigma}}\mu_{ij}\boldsymbol{c}_{i\sigma}^{\dagger}(\vec{\boldsymbol{s}}\times\vec{d}_{ij}^{\,0})_{\sigma\bar{\sigma}}^{z}\boldsymbol{c}_{j\bar{\sigma}},\qquad(1)$$

式中:符号$<ij>$、$<<ij>>$分别表示对所有最近邻和次近邻格点求和;$\boldsymbol{c}_{i\sigma}^{\dagger}$和$\boldsymbol{c}_{j\bar{\sigma}}$分别是位于$i$和$j$格点自旋$\sigma$和$\bar{\sigma}$电子的产生和湮灭算符;$v_{ij}=\left(\vec{d}_i\times\vec{d}_j\right)/\left|\vec{d}_i\times\vec{d}_j\right|=\pm1$,矢量$\vec{d}_i$与$\vec{d}_j$分别表示相邻化学键的位移矢量,具体描述电子从某一晶格点出发,经由相邻的中间原子,到达次近邻晶格点所经历的2段路径方向;$\vec{\boldsymbol{s}}=\left(\boldsymbol{s}_x,\boldsymbol{s}_y,\boldsymbol{s}_z\right)$为泡利矩阵;对于A和B子晶格,$\mu_{ij}=\pm1$。$\vec{d}_{ij}^{\,0}=\vec{d}_{ij}/\left|\vec{d}_{ij}\right|$,其中$\vec{d}_{ij}$为连接格点$i$和$j$的位置矢量;$t$和$\lambda_{\mathrm{R1}}$是最近邻原子之间的电子跃迁能和Rashba自旋轨道耦合,λ_i和λ_{R2}是次近邻原子之间的本征SOC强度和Rashba SOC。Rashba SOC强度可以通过外加电场或界面重构来调控。

1.2　基于格林函数方法的电导与局域流计算

零温度条件下两端口纳米带的自旋相关电导可以表示为Landauer-Büttiker公式[41-42]

$$G_\sigma(E)=\frac{e^2}{h}\mathrm{Tr}\left[\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{L}}(E)\boldsymbol{G}_\sigma^{\mathrm{r}}(E)\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{R}}(E)\boldsymbol{G}_\sigma^{\mathrm{a}}(E)\right],\qquad(2)$$

式中:线宽函数$\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{L(R)}}(E)=\mathrm{i}\left[\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{L(R)}\sigma}^{\mathrm{r}}(E)-\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{L(R)}\sigma}^{\mathrm{a}}(E)\right]$与左右引线$\alpha=(\mathrm{L},\mathrm{R})$耦合后,整个体系的推迟格林函数$\boldsymbol{G}_\sigma^{\mathrm{a}}(E)=\left[\boldsymbol{G}_\sigma^{\mathrm{a}}(E)\right]^{\dagger}=\left[E\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}-\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{L}\sigma}^{\mathrm{r}}-\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{R}\sigma}^{\mathrm{r}}\right]^{-1}$。推迟和超前自能函数$\boldsymbol{\Sigma}_{\alpha\sigma}^{\mathrm{r(a)}}(E)=\boldsymbol{H}_{\mathrm{c}\alpha}g_{\alpha\sigma}^{\mathrm{r(a)}}(E)\boldsymbol{H}_{\alpha\mathrm{c}}$中半无限长引线的表面格林函数$g_{\alpha\sigma}^{\mathrm{r(a)}}(E)$可以利用传递矩阵方法求解。利用非平衡格林函数,流过格点i的局域流可表示为[43-44]

$$J_{i\sigma}=\sum\nolimits_{j\bar{\sigma}}J_{i\sigma,j\bar{\sigma}}=-\frac{e}{h}\sum\nolimits_{j\bar{\sigma}}[\boldsymbol{H}_{i\sigma,j\bar{\sigma}}\boldsymbol{G}_{j\bar{\sigma},\,i\sigma}^{<}(t,t)-$$
$$\boldsymbol{G}_{i\sigma,\,j\bar{\sigma}}^{<}(t,t)\boldsymbol{H}_{j\bar{\sigma},i\sigma}],\qquad(3)$$

式中:$\boldsymbol{G}_{i\sigma,\,j\bar{\sigma}}^{<}=\mathrm{i}\left\langle\boldsymbol{c}_{i\bar{\sigma}}^{\dagger}\middle|\boldsymbol{c}_{i\sigma}\right\rangle$是中心散射区域对应的小于格林函数矩阵元;$J_{i\sigma,j\bar{\sigma}}$为从格点$i$到格点$j$的电流强度。式(3)经过傅里叶变换到能量表象,在低温、低偏压条件下利用Keldysh方程$\boldsymbol{G}^{<}=\boldsymbol{G}^{\mathrm{r}}(\mathrm{i}\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{L}}\boldsymbol{f}_{\mathrm{L}}+\mathrm{i}\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{R}}\boldsymbol{f}_{\mathrm{R}})\boldsymbol{G}^{\mathrm{a}}$,关联函数$\boldsymbol{G}^{\mathrm{n}}(E)=\boldsymbol{G}^{\mathrm{r}}(E)\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{L}}(E)\boldsymbol{G}^{\mathrm{a}}(E)$,局域流$J_{i\sigma,j\bar{\sigma}}$可表示为

$$J_{i\sigma,j\bar{\sigma}}=\frac{2e}{h}\int_{-\infty}^{eV_{\mathrm{R}}}\mathrm{d}E\mathrm{Im}\left\{\boldsymbol{H}_{i\sigma,j\bar{\sigma}}[\boldsymbol{G}^{\mathrm{r}}(\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{L}}+\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{R}})\boldsymbol{G}^{\mathrm{a}}]_{j\bar{\sigma},\,i\sigma}\right\}+$$
$$\frac{2e^2}{h}(V_{\mathrm{L}}-V_{\mathrm{R}})\mathrm{Im}[\boldsymbol{H}_{i\sigma,j\bar{\sigma}}\boldsymbol{G}_{j\bar{\sigma},\,i\sigma}^{\mathrm{n}}(E)]。\qquad(4)$$

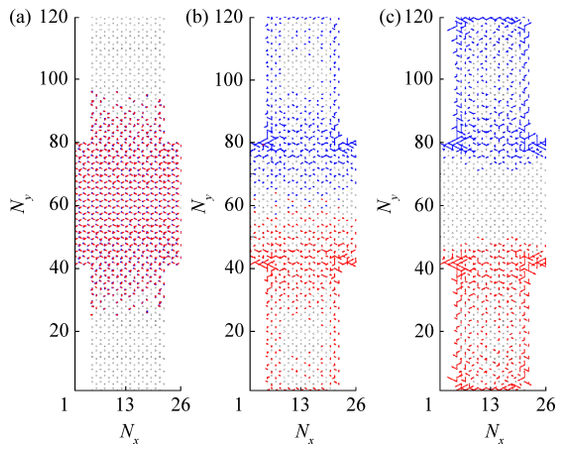
2　结果与讨论

为在实空间区分电子的输运路径,数值计算中半无限长引线扶手椅边的粒子数固定为$N_y=40$,中心散射区域y轴方向的粒子数$N_y=120$。类石墨烯结构中最近邻碳原子、硅原子和锗原子之间的电子跃迁能量分别为t=2.75、1.60和1.30 eV。石墨烯、硅烯和锗烯的本征SOC固定为$\lambda_i\approx10^{-6}$[17]、0.003 9[23]和0.043 0 eV[45]。石墨烯、硅烯与锗烯的晶格常数分别取为a = 2.46、3.86和4.02 Å[46]。计算电子局域流密度分布时固定选取系统平衡温度T=0。

2.1　本征有效SOC对小尺寸锯齿边类石墨烯结构输运路径的影响

本征SOC强度λ_i = 0、0.003 9和0.043 0 eV的IV族类石墨烯结构在实空间的局域流密度分布见图1,其中入射电子能量E = 1 meV,中心散射区域锯齿边的粒子数N_x = 18,Rashba SOC强度$\lambda_{\mathrm{R1}}=\lambda_{\mathrm{R2}}$ = 0。相同结构参数条件下SOC对电子输运路径的选择有明显的影响。由图1(a)可知,当λ_i = 0时,电流较为均匀地从左引线输运到右引线,散射区域的边缘没有电流通过。当λ_i = 0.003 9 eV时,半无限长引线中的电子在纳米带边缘利用边缘态输运,但是对于有限小尺寸的散射区域,电子主要通过左右引线边缘之间的区域传导,自旋向上和向下的电子输运通道彼此分离,中心散射区锯齿边缘附近的电子分布几近为0(图1(b))。增大SOC强度,见图1(c),当λ_i = 0.043 0 eV时,电子呈现出4条清晰的输运通道,除了2条与图1(b)类似的输运通道,电子还可以通过上下锯齿边的边缘态输运。

在小尺寸器件中电子对输运通道的选择不仅受到x方向能带的影响,还与中心散射区域沿y轴方向的能带结构有关。图2展示了本征SOC强度λ_i = 0、0.003 9和0.043 0 eV,Rashba SOC强度$\lambda_{\mathrm{R1}}=\lambda_{\mathrm{R2}}$ = 0时IV族类石墨烯结构材料沿第一布里渊区k_x和k_y方向的电子能带结构。如图2所示x方向为锯齿边,只有当SOC的$\lambda_i\neq0$时,体能带(图2中灰色填充区域)打开大小为$2\lambda_i$的体带隙并在带隙内出现连接导



注:红色和蓝色箭头分别对应自旋向上和自旋向下的电子。

图1　IV族类石墨烯结构材料的局域流密度分布

(a)λ_i = 0;(b)λ_i = 0.003 9 eV;(c)λ_i = 0.043 0 eV

Figure 1　local current density distribution of group-IV graphene-like structural materials

(a) λ_i = 0;(b) λ_i = 0.003 9 eV;(c) λ_i = 0.043 0 eV

带和价带的边缘态。SOC强度仅会改变体带隙的大小,并不改变边缘态的性质。因此,λ_i = 0时引线中电子均匀分布,而在$\lambda_i \neq 0$条件下电子主要分布在上下边缘区域。由于中心散射区域并不存在破坏空间反演对称性或时间反演对称性的外场,中心散射区域沿k_x方向的能带依然具有与引线相同的性质,因此电子输运路径的改变主要受到k_y方向能带性质的影响。

中心散射区域y轴方向是扶手椅边,对于$N_x = 3n$或$N_x = 3n + 1$的情况,y轴方向的电子能带出现带隙。需要强调的是,此时的带隙宽度不仅与λ_i有关,还与沿y方向的电子波函数交叠程度有关,因此,带隙的大小受本征SOC强度λ_i的影响,但并不满足$2\lambda_i$的定量关系。当λ_i = 0时带隙最大,电子很难跨越带隙到达边缘区域,且由于石墨烯并无边缘态,因此不同格点处自旋向上和自旋向下电子的局域流密度相同,电子较为均匀地经过散射区输运到右引线,散射区锯齿边的局域流密度几乎为0(图2(d));当$\lambda_i \neq 0$时,体带隙内出现边缘态,在小尺寸时这些边缘态间会有较强的耦合;λ_i = 0.003 9 eV时带隙较大,边缘态间耦合较强,在实空间中不同自旋取向的电子主要通过左右引线边缘间的2条通道传导(图2(e));对于锗烯(图2(f)),沿k_y方向带隙宽度和边缘态间耦合强度明显小于硅烯,因此电子除了可以通过边缘态之间的耦合隧穿过中心区域,也会有一部分电子跨过带隙利用边缘态输运。

2.2　Rashba SOC对IV族类石墨烯结构输运路径的影响

不同强度Rashba SOC对输运路径的影响见图3。

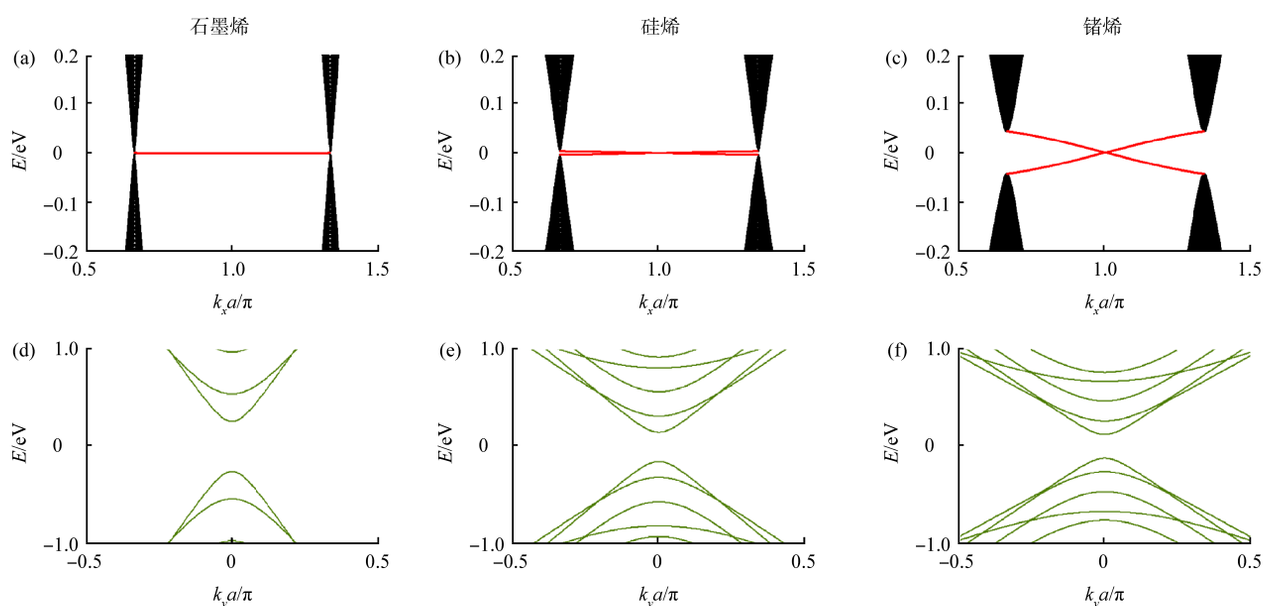


图2　IV族类石墨烯结构材料沿第一布里渊区不同方向的电子能带结构

(a ~ c) k_x方向;(d ~ f) k_y方向

Figure 2　electronic band structure of group-IV graphene-like structural materials along different directions in the first Brillouin zone

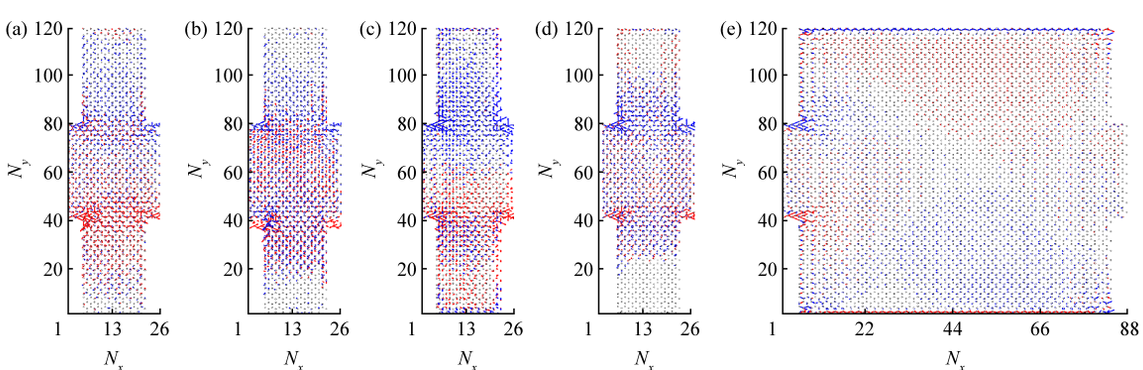
(a ~ c) k_x-direction;(d ~ f) k_y-direction

对比图1和3可知，在Rashba SOC作用下局域流的强度和空间分布均发生了明显的变化。在仅受本征SOC λ_i时，无论电子是选择边缘态还是态间隧穿输运，不同自旋取向电子的输运路径在实空间是分离的，等量自旋向上和自旋向下的电子分别从散射区的上半部和下半部区域通过。然而考虑Rashba SOC作用时，自旋不再是好量子数，如图3(a和b)所示，几乎整个散射区域均有不同自旋取向的电子出现，空间对称位置的电子局域流密度不再相等。随着Rashba自旋轨道耦合强度λ_r增强(图3(c和d))，电子局域流的整体强度随之减弱。局域流的减弱程度与系统的本征自旋轨道耦合有关，有效SOC较大的体系，局域流强度减弱的趋势更缓。由图3可知，几乎很少电子利用边缘态输运，这是因为Rashba SOC可以增加边缘态间的耦合，电子输运机制更倾向于带间隧穿。需要强调的是，SOC对电子输运路径的影响主要体现在小尺寸情况，对于如图3(e)所示的大尺寸体系，即使在相同SOC强度条件下，由于边缘态间的距离较大、耦合较弱，电子依然主要通过边缘态传输，下文将重点讨论大尺寸类石墨烯材料SOC对电导的影响。

2.3　SOC对硅烯和锗烯纳米带电导的影响

类石墨烯纳米带的总电导受到散射区域Rashba SOC强度和电子能量的影响如图4所示。当系统存在Rashba SOC时，自旋不再是好量子数，不同自旋取向电子间可以发生自旋翻转，使得自旋向上和向下的电导不再相等，但对于一字型纳米带，如图4(a)所示，总电导$G = G_{\uparrow} + G_{\downarrow}$依然呈现量子化台阶$2ne^2/h(n = 1, 2\cdots)$。图4(b、c)展示了引线与散射区域结构参数不同时，硅烯和锗烯的电导随Rashba SOC强度和电子能量的变化。由于引线区域和中心器件区域的能带不匹配，电导的阶梯被破坏而呈现一系列振荡，扩大了零电导率区域的范围。但是电导整体的变化趋势与一字形状纳米带一致。当Rashba SOC强度较小时，部分低能量窗口的电导值会增大，而当Rashba SOC强度较大时，部分区域电导值为0。

以锗烯为例，具体分析电导值增大和减小为0的原因。图5给出了Rashba SOC强度分别为λ_R = 0.03和0.30 eV时，沿第一布里渊区k_x方向的锗烯能带结构，图5(a)对应的Rashba SOC强度(λ_R = 0.03 eV)小于体系本征SOC强度(λ_i = 0.043 eV)，较弱的Rashba SOC对导带的影响不大，但会导致价带中不同自旋的体能带分别向高能区和低能区移动，在能带交叠的区域导电通道增加从而引起电导值增大。增强Rashba SOC可以使体带隙闭合，继续增大λ_R值，能带会发生相变并产生带隙。图5(b)选取的SOC强度(λ_R = 0.30 eV)远大于系统本征SOC强度，此时在$E \approx \lambda_i$附近产生了带隙，需要强调的是，带隙对Rashba SOC λ_R的响应并不像体带隙对本征SOC λ_i的影响一样明显，增强SOC，带隙宽度缓慢增加。利用外场调节Rashba SOC强度可以实现场效应晶体管的开关态。



注：红色和蓝色箭头分别对应自旋向上和自旋向下的电子。

图3　硅烯和锗烯的局域流密度分布

(a)硅烯，λ_R=0.05 eV；(b)锗烯，λ_R=0.05 eV；(c)硅烯，λ_R=0.10 eV；(d)锗烯，λ_R=0.10 eV；(e)锗烯，N_x=80，λ_R=0.05 eV

Figure 3　local current density distribution of silicene and germanene

(a)silicene，λ_R=0.05 eV；(b)germanene，λ_R=0.05 eV；(c)silicene，λ_R=0.10 eV；(d)germanene，λ_R=0.10 eV；(e)germanene，N_x=80，λ_R=0.05 eV

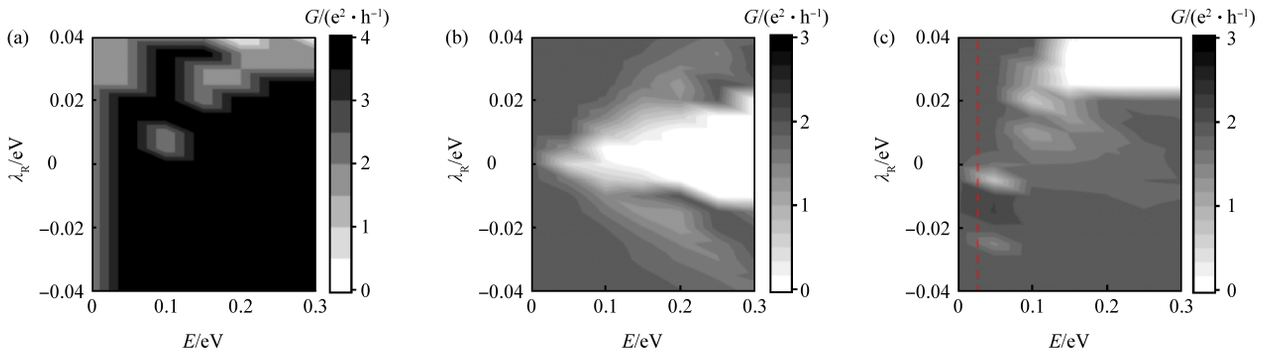


图4　硅烯和锗烯电导随Rashba自旋轨道耦合强度和能量的变化

(a) 硅烯,N_y = 40;(b) 硅烯,N_y = 120;(c) 锗烯,N_y = 120

Figure 4　conductivity of silicene and germanene with the variation of Rashba spin-orbit coupling strength and energy

(a) silicene, N_y = 40;(b) silicene, N_y = 120;(c) germanene, N_y = 120

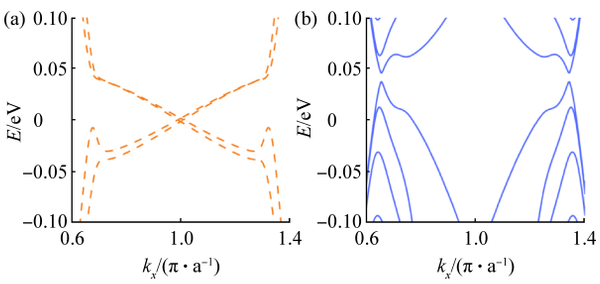


图5　k_x方向的锗烯能带结构

(a) λ_R = 0.03 eV;(b) λ_R = 0.30 eV

Figure 5　germanene band structure of k_x-direction

(a) λ_R = 0.03 eV;(b) λ_R = 0.30 eV

3　结　论

在小尺寸锯齿/扶手椅混合边界结构中,随着本征SOC强度的增加,纳米带边缘态与体带的耦合逐渐增强,从而显著改变电子在散射区的输运路径及能带调控。当耦合强度较弱时,电子主要以均匀分布穿过散射区;而当耦合强度增大后,电子更倾向于沿边缘态或通过边缘态之间的隧穿通道进行输运。进一步引入Rashba SOC后,由于自旋不再是好量子数,电子的局域流分布与整体强度均随之改变,且更多电子经由带间隧穿而非仅依赖边缘态进行输运。随Rashba耦合强度的持续增大,边缘态间的相互作用更为明显,局域流逐渐减弱;对于本征SOC较强的体系,其对Rashba耦合的抑制效应相对减弱。需要强调的是,这种输运路径的转变主要出现于小尺寸结构;对于大尺寸的类石墨烯材料,由于边缘态之间的耦合较弱,电子依然主要通过边缘态进行传输。类石墨烯纳米带的总电导不仅受Rashba耦合强度影响,也受到电子能量分布的调控。当Rashba耦合强度较弱(即小于本征耦合强度)时,价带中不同自旋的体能带分别移向高能或低能区域,增大能带交叠并提升电导;当Rashba耦合强度显著超过本征耦合时,能带附近会出现带隙,从而抑制电子输运。通过外场调控Rashba SOC强度,有望实现场效应晶体管的开关功能。

©The editorial department of Journal of Capital Normal University (Natural Science Edition) 2025. This is an open access article under the CC BY-NC-ND 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

参 考 文 献

[1] PRINZ G A. Magnetoelectronics[J]. Science, 1998, 282(5394):1660-1663. DOI:10.1126/science.282.5394.1660.

[2] WOLF S A, AWSCHALOM D D, BUHRMAN R A, et al. Spintronics: a spin-based electronics vision for the future[J]. Science, 2001, 294(5546): 1488-1495. DOI: 10.1126/science.1065389.

[3] ZUTIC I, FABIAN J, SARMA S D. Spintronics: fundamentals and applications[J]. Reviews of Modern Physics, 2004, 76(2): 323-410. DOI: 10.1103/RevModPhys.76.323.

[4] ZHANG N, ZHANG B, YANG M Y, et al. Progress of electrical control magnetization reversal and domain wall motion[J]. Acta Physica Sinica, 2017, 6(2): 027501. DOI:10.7498/aps.66.027501.

[5] SUN Q F, WANG J, GUO H. Quantum transport theory for nanostructures with Rashba spin-orbital interaction[J]. Physical Review B, 2005, 71(16): 165310. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.165310.

[6] DRESSELHAUS G F. Spin-orbit coupling effects in

zinc blende structures[J]. Physical Review, 1955, 100(2):580. DOI:10.1103/PhysRev.100.580.

[7] KHEIRABADI N, MCCANN E, FAL'KO V I. Cyclotron resonance of the magnetic ratchet effect and second harmonic generation in bilayer graphene[J]. Physical Review, 2018, 97(7): 075415. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.075415.

[8] BYCHKOV Y A, RASHBA E I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers[J]. Journal of Physics C(Solid State Physics), 1984, 17(33):6039-6045. DOI:10.1088/0022-3719/17/33/015.

[9] PARDO E, DUL M C, RODRIGUE L, et al. Variation of the ground spin state in homo-and hetero-octanuclear copper(II) and nickel(II) double-star complexes with a meso-helicate-type metallacryptand core[J]. Dalton Transactions, 2010, 39(20): 4786-4801. DOI: 10.1039/B926709C.

[10] LUO J W, LI S S, ZUNGER A. Rapid transition of the hole Rashba effect from strong field dependence to saturation in semiconductor nanowires[J]. Physical Review Letters, 2017, 119(12): 126401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.126401.

[11] HUI P, LI Z, LIU C C, et al. Valley-polarized quantum anomalous Hall effect in silicene[J]. Physical Review Letters, 2014, 112(10): 106802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.106802.

[12] PAN H, LI X, JIANG H, et al. Valley polarized quantum anomalous Hall phase and disorder-induced valley-filtered chiral edge channels[J]. Physical Review B, 2015, 91(4):045404. DOI:10.1103/PhysRevB. 91.045404.

[13] YU Z M, PAN H, YAO Y G. Electric field controlled spin- and valley-polarized edge states in silicene with extrinsic Rashba effect[J]. Physical Review B, 2015, 92(15):155419. DOI:10.1103/PhysRevB.92.155419.

[14] YU X L, FU P H, WU J S. Response of quantum spin Hall insulators to Zeeman fields, and device design based on stanene[J]. Physical Review B, 2022, 105(12):125107. DOI:10.1103/PhysRevB.105.125107.

[15] YU X L, WU J S. Topological phase transitions and quantum oscillations in systems with broken time-reversal symmetry[J]. Physical Review B, 2021, 103(20):205143. DOI:10.1103/PhysRevB.103.205143.

[16] QI X L, ZHANG S C. Topological insulators and superconductors[J]. Reviews of Modern Physics, 2011, 83(4):1057. DOI:10.1103/REVMODPHYS.83.1057.

[17] KANE C L, MELE E J. Quantum spin Hall effect in graphene[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(22): 226801. DOI:10.1103/PhysRevLett.95.226801.

[18] HASAN M Z, KANE C L. Colloquium: topological insulators[J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82(4): 3045. DOI:10.1103/RevModPhys.82.3045.

[19] KANE C L, MELE E J. Z_2 topological order and the quantum spin Hall effect[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(14): 146802. DOI: 10.1103/PhysRevLett. 95.146802.

[20] CAHANGIROV S, TOPSAKAL M, AKTURK E, et al. Two and one dimensional honeycomb structures of silicon and germanium[J]. Physical Review Letters, 2009, 102(23):236804. DOI:10.1103/PhysRevLett. 102.236804.

[21] LIU C C, FENG W X, YAO Y G. Quantum spin Hall effect in silicene and two-dimensional germanium[J]. Physical Review Letter, 2011, 107(7): 076802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.076802.

[22] LIU C C, JIANG H, YAO Y G. Low energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin[J]. Physical Review B, 2011, 84(19): 195430. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.195430.

[23] EZAWA M. Valley polarized metals and quantum anomalous Hall effect in silicene[J]. Physical Review Letters, 2012, 109(5): 055502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.055502.

[24] XU Y, YAN B H, ZHANG H J, et al. Large gap quantum spin Hall insulators in tin films[J]. Physical Review Letters, 2013, 111(13): 136804. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.136804.

[25] BROEK B, HOUSSA M, SCARLISE E, et al. Two-dimensional hexagonal tin: ab initio geometry, stability[J]. 2D Materials, 2014, 1(2): 021004. DOI: 10.1088/2053-1583/1/2/021004.

[26] YU X L, HUANG L, WU J S. From a normal insulator to a topological insulator in plumbene[J]. Physical Review B, 2017, 95(12): 125113. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.125113.

[27] LI Y, ZHANG J Y, ZHAO B, et al. Constructive coupling effect of topological states and topological phase transitions in plumbene[J]. Physical Review B, 2019, 99(19): 195402. DOI: 10.1103/PhysRevB. 99. 195402.

[28] VOGT P, PADOVA P D, QUARESIMA C, et al. Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon [J]. Physical Review Letters, 2012, 108(15): 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.

[29] CHEN L, LIU C C, FENG B J, et al. Evidence for Dirac fermions in a honeycomb lattice based on silicon [J]. Physical Review Letters, 2012, 109(5): 056804. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.

[30] LI L F, LU S Z, PAN J B, et al. Buckled germanene formation on Pt (111)[J]. Advanced Materials, 2014, 26(28): 4820-4824. DOI: 10.1002/adma.201400909.

[31] DAVILA M E, XIAN L, CAHANGIROV S, et al. Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene[J]. New Journal of Physics, 2014, 16(9): 095002. DOI: 10.1088/1367-2630/16/9/095002.

[32] ZHU F F, CHEN W J, XU Y, et al. Epitaxial growth of two-dimensional stanene[J]. Nature Materials, 2015, 14(10): DOI: 1020-1025.10.1038/NMAT4384.

[33] ZANG Y Y, JIANG T, GONG Y, et al. Realizing an epitaxial decorated stanene with an insulating bandgap [J]. Advanced Functional Materials, 2018, 28(35): 1802723. DOI: 10.1002/adfm.201802723.

[34] XU C Z, CHAN Y H, CHEN P, et al. Gapped electronic structure of epitaxial stanene on InSb(111)[J]. Physical Review B, 2018, 97(2): 035122. DOI: 10.1002/adfm.201802723.

[35] 王晓丽,龙文.缺陷对双层扶手型石墨烯纳米带能隙的影响[J].首都师范大学学报(自然科学版),2022,43(5):21-30. DOI:10.19789/j.1004-9398.2022.05.004.
WANG X L, LONG W. Effects of defects on gaps of armchair bilayer graphene nanoribbons [J]. Journal of Capital Normal University (Natural Science Edition), 2022, 43(5): 21-30.

[36] 叶海安,苗瑞霞,郭三栋,等.石墨烯纳米带整流器件电子输运性质研究[J].传感器与微系统,2021,40(4):8-10. DOI:10.13873/J.1000-9787(2021)04-0008-03.
YE H A, MIAO R X, GUO S D, et al. Study of electronic transport properties in rectifying device based on graphene nanoribbons [J]. Transducer and Microsystem Technologies, 2021, 40(4): 8-10.

[37] 丁锦廷,胡沛佳,郭爱敏.线缺陷石墨烯纳米带的电输运研究[J].物理学报,2023,72(15):227-232. DOI: 10.7498/aps.72.20230502.
DING J T, HU P J, GUO A M. Electron transport in graphene nanoribbons with line defects[J]. Acta Physica Sinica, 2023, 72(15): 227-232.

[38] 严深浪,项少辉,龙孟秋.锯齿型石墨烯纳米带结的自旋输运性质[J].计算物理,2022,39(6):751-756. DOI: 10.19596/j.cnki.1001-246x.8522.
YAN S L, XIANG S H, LONG M Q. Spin transport properties of zigzag graphene nanoribbon junctions[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2022, 39(6): 751-756.

[39] 韩超,龙文.边缺陷诱导的双层锯齿型石墨烯纳米带能隙[J].首都师范大学学报(自然科学版),2022,43(4):23-32+45. DOI:10.19789/j.1004-9398.2022.04.005.
HAN C, LONG W. Edge-defect induced gaps in zigzag bilayer graphene nanoribbons [J]. Journal of Capital Normal University (Natural Science Edition), 2022, 43(4): 23-32+45.

[40] ZHENG J, MA L, LI C L, et al. On-state current paths and off-state leakage in nanoscale silicene field-effect transistors[J]. Physical Review Applied, 2023, 20(1): 014065. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.20.014065.

[41] STEFANUCCI G, ALMBLADH C O. Time-dependent partition-free approach in resonant tunneling systems [J]. Physical Review B, 2004, 69(19): 195318. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.195318.

[42] DATTA S. Electronic transport in mesoscopic systems [M]. New York: Cambridge University Press, 1995.

[43] JIANG H, WANG L, SUN Q F, et al. Numerical study of the topological Anderson insulator in HgTe/CdTe quantum wells[J]. Physical Review B, 2009, 80(16): 165316. DOI: 10.1103/PhysRevB.80.165316.

[44] XING Y X, WANG J, SUN Q F. Focusing of electron flow in a bipolar graphene ribbon with different chiralities [J]. Physical Review B, 2010, 81(16): 165425. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.165425.

[45] RACHEL S, EZAWA M. Giant magnetoresistance and perfect spin filter in silicene, germanene, and stanene [J]. Physical Review B, 2013, 89(19): 1601-1621. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.195303.

[46] EZAWA M. Monolayer topological insulators: silicene, germanene, and stanene [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2015, 84(12): 121003. DOI: 10.7566/JPSJ.84.121003.

(责任编辑:兰丽丽)