

商晓菲,曹如凤,薛俊,等. 磁调控对硅烯器件光电输运性质的影响 [J].江西师范大学学报( 自然科学版),2023,47( 5): 477-482.

SHANG Xiaofei, CAO Rufeng, XUE Jun, et al. The effect of magnetic modulation on the transport properties of silicene devices [J]. Journal of Jiangxi Normal University ( Natural Science) 2023, 47( 5): 477-482.

文章编号: 1000-5862( 2023) 05-0477-06

## 磁调控对硅烯器件光电输运性质的影响

商晓菲,曹如凤,薛俊,李月君,周艳红\*

( 华东交通大学理学院,江西 南昌 330013)

摘要: 基于第一性原理方法,该文研究了硅烯器件对外部磁场的响应及其光电输运性质.根据左右电极自旋磁构型特点,构建了 2 种硅器件结构: 左右电极磁矩方向平行的 P 构型和磁矩方向反平行的 AP 构型.研究发现: 通过调节磁场,器件电子透射率可以在导电态和绝缘态之间切换.此外,这 2 种器件在光学伽伐尼效应下获得了不同的光电流.在 AP 构型中,纯自旋流既不依赖于光子的能量,也不受入射光偏振角影响,而 P 构型则不是.通过调整轨道对称性实现电导切换以及通过磁场调制产生纯自旋流的方法可以用于硅烯电子器件的设计.

关键词: 光学伽伐尼效应; 空间反演对称性; 轨道对称性; 自旋密度

中图分类号: O 471 文献标志码: A DOI: 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2023.05.06

### 0 引言

自首次成功通过机械分离得到石墨烯以来<sup>[1]</sup>,无论是在实验上<sup>[1-2]</sup>还是在理论上石墨烯都激发了研究者极大的研究热情.因为石墨烯具有独特的性质,如狄拉克费米子行为<sup>[3]</sup>、高迁移率<sup>[1]</sup>和反常量子霍尔效应<sup>[4]</sup>等,所以石墨烯是未来电子器件一种很有前途的候选材料.石墨烯的发现也激发了人们对硅等其他元素形成的 2 维蜂窝状结构的研究兴趣,如硅烯、二硫化钼等.硅烯是一种单原子厚的 2 维硅晶体,具有六角形晶格结构.硅烯作为一种与石墨烯有相似结构的材料,它的原子键不是平坦的,而是存在一个屈曲.它在布里渊区中的 K 点具有像狄拉克的电子弥散,并表现出比石墨烯更优越的特性,如电可调带隙<sup>[5]</sup>、半氢化下的铁磁性<sup>[6]</sup>等.与石墨烯纳米带( GNRs) 类似,硅烯纳米带也可以分为锯齿状( ZSiNRs) 和扶手椅型硅烯纳米带( ASiNRs) 2 种类型.对于 ASiNRs 的电子结构,随

着纳米带的带宽度的增加,带隙振荡周期为 3<sup>[7]</sup>.而对于 ZSiNRs,它们具有稳定的反铁磁( AFM) 结构,并且在外部横向电场下,能带结构可以调整为具有半金属特性<sup>[7]</sup>.此外,像 ZGNR 一样,原始 ZSiNRs 也表现出依赖于对称性的输运性能<sup>[8]</sup>,其连接到 2 个半无限长硅烯电极的 ZSiNRs 中拥有巨大的磁电阻<sup>[9]</sup>.这表明 ZSiNRs 在硅基自旋电子技术中有广阔的应用前景.通过在 Ag( 111) 表面沉积硅的方法,研究人员成功制备出了硅烯<sup>[10]</sup>.此外,第一性原理计算预测了硅烯和锗烯最稳定的结构是屈曲结构<sup>[11]</sup>.

鉴于锯齿形石墨烯( ZGNR) 显示出许多独特的输运性质<sup>[12-13]</sup>,ZSiNR 的输运性质也是一个非常有趣的话题.如 ZSiNR 的输运行为是强烈依赖于对称性的,偶数条硅链和奇数条硅链构成的 ZSiNRs 具有不同的电流-电压关系,这可以归因于它们费米能级附近的波函数在 Cs 对称操作下相对于中心轴具有不同奇偶性,是否存在镜像对称平面对输运至关重要<sup>[13]</sup>,且若纳米带宽度较小则构成的器件较不稳

收稿日期: 2023-03-01

基金项目: 国家自然科学基金( 12264014),江西省自然科学基金( 2022ACBL212005),江西省研究生创新专项基金( YC2021-S425, YC2022-S491) 和国家级大学生创新训练计划( 202210404010) 资助项目.

通信作者: 周艳红( 1980—) 女,江西宜春人,副教授,博士,主要从事低维材料的输运性质研究. E-mail: yhzhou80@163.com

定,因此考虑纳米带的宽度取 8 为宜.由于硅烯很可能与目前的硅基半导体产业兼容,基于 ZSiNR 的纳米器件很有应用前景,所以目前相应的器件设计值得探讨.

光电效应是指在不施加偏置电压的情况下,光照射在缺乏空间反转对称性的材料中产生有限的直流电流的一种现象,由于其自供电功能的巨大优势,所以它在光电器件领域中具有很大的潜力<sup>[14-17]</sup>.这一重要概念首先由 G.E.Piku 等<sup>[14-15]</sup>预测,然后在实验<sup>[16]</sup>中被观察到,自那以后涌现了大量关于光电效应的研究<sup>[17]</sup>.在自旋电子学中,产生完全自旋极化的电流和不伴随净电荷流的纯自旋流是开发未来自旋器件的基础,也是关键任务<sup>[18]</sup>.到目前为止,2 维材料的理论和实验的研究进展也引发了很多关于光电效应诱导的光电输运的研究<sup>[19]</sup>.此外,以往的研究多数集中在石墨烯磁性材料上,一个自然的问题是:是否能在类石墨烯材料中产生不受任何特定光子能量或偏振角度限制的纯自旋流?

本文通过第一性原理的计算,主要研究了 8-ZSiNR 在不同磁场下的电子传输特性.研究发现:通过调节磁场,器件可以在导电态和绝缘态之间切换.此外,这 2 种结构在光照下有不同的光电流特性.在平行的磁构型中,纯自旋流只在具有特定偏振角( $0^\circ$ ,  $90^\circ$  或  $180^\circ$ ) 的入射光照射下才能产生,而反平行的磁构型的纯自旋流非常稳健,既不依赖于光子的能量,也不受光子偏振角影响,且在反平行磁构型中可以获得一个较大的纯自旋流.

## 1 模型构建和计算细节

如图 1 所示,构建硅烯纳米带结的模型结构的方法如下:首先选择一个无限长的 8-ZSiNR,然后分为左电极、中心区和右电极 3 个部分.图 1(a) 为它的结构俯视图.图 1(b) 为它的前视图.光照射在整个中心区上,入射光为偏振光,光子能量为  $\hbar\omega$ ,偏振角为  $\theta$ .  $A$  是电磁矢量势,  $e_1 = z$  和  $e_2 = -x$  是确定偏振光入射方向的 2 个偏振矢量.  $e_1$  和  $A$  之间的角度  $\theta$  被定义为偏振角.点虚线表示镜像平面,粗虚线框表示应用偏振光的区域.  $O$  表示空间反演对称中心.沿  $y$  方向的边缘原子为氢原子,其余的为硅原子.左、右电极区域采用阴影标识.将左边磁矩设置为自旋向上,当右边磁矩方向也设置自旋向上时称它为 P 构型,当右边磁矩方向设置反向(即当自旋向下)时则称它为 AP 构型.应用磁场<sup>[20]</sup>或横向电场<sup>[21]</sup>可使

左右电极的 FM 态更加稳定.在这项工作中,磁场的作用只是迫使铁磁溶液处于基态,因此可以通过简单地将所有边缘碳原子上的磁矩平行于外部磁场的方向来模拟<sup>[13,20]</sup>.  $x$  方向的宽度包含 8 条锯齿形硅链.左右电极延伸到  $\pm\infty$ ,选取 10.5 个单元格作为中心区域,电极超级单体由 3 个原始单胞组成.边缘碳原子的悬空键被氢原子钝化,以避免边缘重构.光电流由线偏振光(LPL)照射到整个中心区域产生(见图 1(b)).基于密度广义泛函理论(DFT),结合非平衡格林泛函形式计算光电流.根据线性响应近似,注入左电极的光电流<sup>[22-23]</sup>为

$$J_L^{ph} = ie \text{Tr} (F_L (G^{<(ph)} + f_L(E) (G^{>(ph)} - G^{<(ph)}) ) ) dE/h, \quad (1)$$

其中  $G^{>(ph)}(E)$  ( $G^{<(ph)}(E)$ ) 是考虑电子-光子相互作用的一个大(小)格林函数.  $f_L$  是左电极中电子的费米-狄拉克分布函数.关于光电流计算的更多细节可参见文献[22].本文给出的相关结果用光响应函数(归一化电流)表示<sup>[23]</sup>为

$$R_{\alpha s} = J_{\alpha s}^{ph} / (e I_\omega),$$

其中  $R$  的单位是  $a_0^2 \cdot \text{光子}^{-1}$ ,  $a_0^2$  表示玻尔半径,  $\alpha = (L, R)$  和  $s = (\uparrow, \downarrow)$  分别表示电极和自旋方向.  $J_{\alpha s}^{ph}$  和  $e$  分别表示式(1)中定义的光电流和电子电荷.  $I_\omega$  定义为单位时间内单位面积上的光子数.因此,电荷流和自旋流可以定义为  $I_c = R_\uparrow + R_\downarrow$  和  $I_s = R_\uparrow - R_\downarrow$ .其中  $R_\uparrow$  和  $R_\downarrow$  分别表示自旋向上和自旋向下的光响应.

采用基于第一性原理计算的 Nanocal 软件包<sup>[24]</sup>来进行模拟计算.所有原子均采用模守恒赝势形式的局域原子轨道,以 DZP 为基组,截止能量设为 50 Ry,交换关联势采用广义梯度近似的水平上 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)<sup>[25]</sup>.将倒空间  $K$  设置为  $1 \times 1 \times 100$  和  $1 \times 1 \times 1$ ,分别用于该光电器件的电极自洽性和电子输运计算.密度矩阵和哈密顿量矩阵收敛准则都设置为  $1 \times 10^{-4}$  a.u.

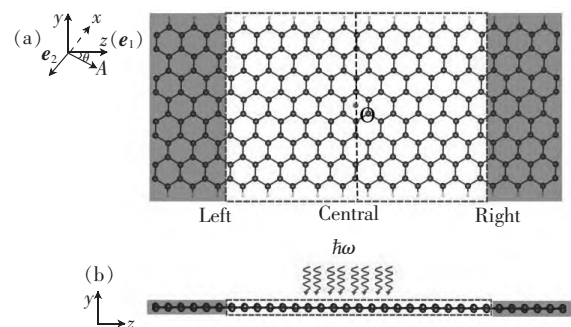


图 1 由沿  $x$  轴具有 8 条硅链构造的 8-ZSiNR 双探针器件结构示意图

## 2 结果与讨论

### 2.1 轨道对称性实现电导开关

如图 2(a) 所示, P 构型费米能级附近不存在电导间隙, 透射系数为 1, 是量子化的. 在电子能量为 0.25 eV 和 -0.25 eV 附近存在 2 个不同自旋极化方向的量子化透射平台, 透射系数为 3. 额外的 2 个透射单位来自位于布里渊区  $1/3$  区域的 2 个电极的价带边缘态或导带之间的电子传输. 但在 AP 构型中, 费米能级附近可以观察到一个电导间隙, 在  $[-0.25, 0.25]$  eV 整个范围内透射系数为 0 (见图 2(b)), 产生这一现象的原因将在后面讨论. 这表明: 在 AP 构型中, 在费米能级附近, 在每个自旋通道中, 来自左边子带的电子永远不会被传输到右边子带. 为了更好地理解, 详细地分析了这些子带的特征. 图 2(a) 为 P 构型的左右电极, 图 2(b) 为 AP 构型左电极的能带结构. 图 3(c) 和图 3(d) 显示的分别是图 3(a) 和图 3(b) 中 A 态和 B 态的波函数.  $z$  表示沿纵向方向的对称轴. 空心圆和实心圆分别表示 A 态和 B 态. 在 P 构型和 AP 构型中, 无论自旋通道如何, 在磁场向上的 ZSiNRs 中, 价带中的 B 态具有奇对称性 (见图 3(c) 的 B), 而导带中的 A 态具有偶对称性 (见图 3(c) 的 A). 然而, 在磁场向下的 ZSiNRs 中, 费米能级附近的价带和导带的波函数对称性正好与磁场向上的 ZSiNRs 相反. 因此, 由于左右电极的轨道对

称性不匹配, 所以在 AP 构型中自旋向上和自旋向下的通道在  $[-0.25, 0.25]$  eV 范围内的透射为 0, 而由于在 P 构型中左右电极的轨道对称性匹配, 所以此时透射不为 0 (见图 4). 图 4(a) 为 P 构型左右电极的能带结构以及透射谱; 图 4(b) 为 AP 构型左右电极的能带结构以及透射谱. 由此可知, 施加相反的磁场可以使器件在绝缘状态和导电状态之间切换.

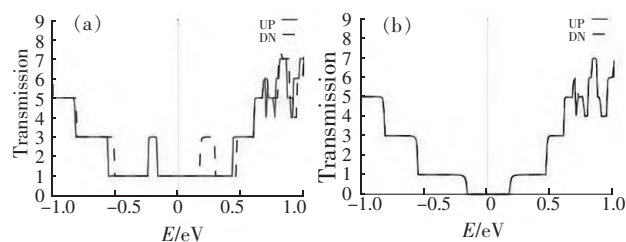


图 2 不同构型的透射函数

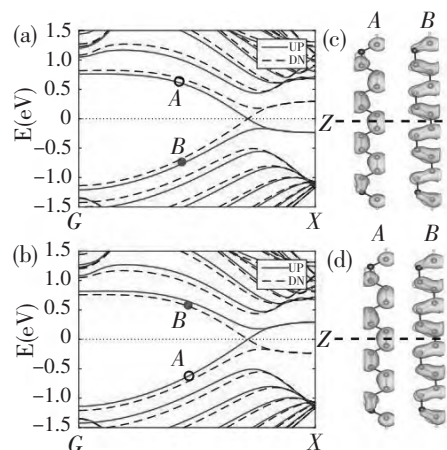


图 3 不同构型的电极能带结构以及 A 态和 B 态的波函数

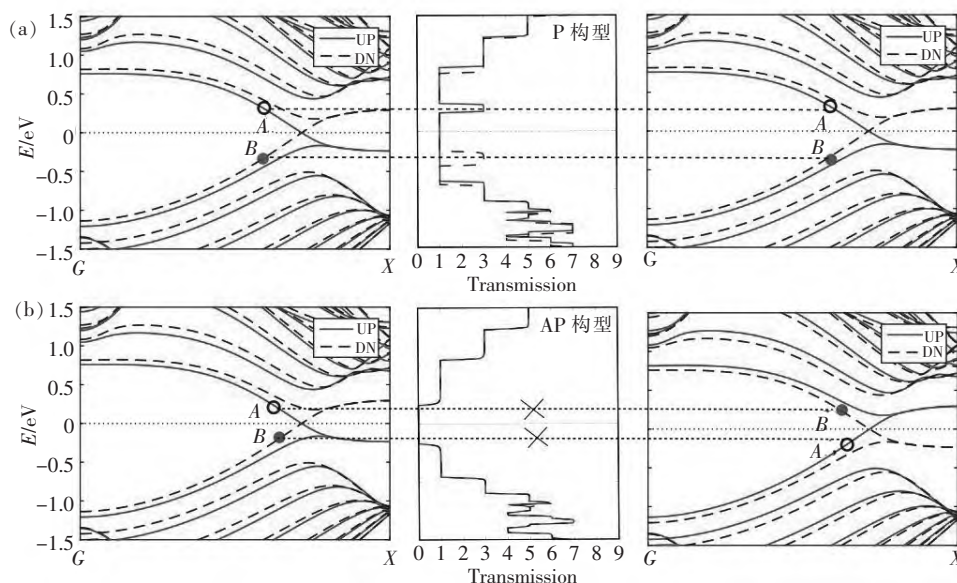


图 4 不同构型左右电极的能带结构以及透射谱



## 2.2 在光学伽伐尼效应中实现光电流

用 8-ZSiNR 构建的光电器件模型如图 1(a) 所示.对于光电器件,产生电流的驱动力是光子能量为  $\hbar\omega$ 、偏振角为  $\theta$  的线偏振光(LPL)对中心区域进行照射.接下来,研究了线偏振光在 P 和 AP 构型中诱导的光电流.当偏振角为  $\theta=0^\circ$  时,2 个构型的自旋光电流随光子能量变化分别如图 5(a) 和 5(c) 所示.在一定光子能量范围内,构型的 2 个自旋分量的光电流不同.在 P 构型中,对于自旋相关的电荷密度 2 个自旋通道( $\rho_\uparrow$  和  $\rho_\downarrow$ ) 相对于器件模型中的黑色虚线表现出镜像对称( $C_s$  对称)(见图 6(a)),但没有反转对称.这意味着它们在每个自旋组件本身的空间反转操作下不是不变的.已经证明了在具有  $C_s$  对称性和无反转对称性的系统中,光电效应可以产生有限光电流.这意味着:尽管系统在结构上具有空间反演对称性,但当每个自旋的电荷密度的反演对称性被打破时,光电效应可以诱导自旋相关光电流.事实上,数值结果证实了这一推测.

图 5(b) 展示了在光子能量为 0.55 eV 的线偏振光照射下,自旋向上( $R_\uparrow$ )、自旋向下( $R_\downarrow$ ) 以及总电荷流( $I_c = R_\uparrow + R_\downarrow$ ) 随偏振角的变化关系.研究发现:2 个自旋光电流  $R_\uparrow$  和  $R_\downarrow$  在线偏振光的照射下与偏振角  $\theta$  呈现正弦关系,即  $I \propto \sin(2\theta)$ ,这符合具有对称性材料的光电效应特征<sup>[26]</sup>.另外,尽管 8-ZSiNR 的结构具有空间反演对称性,但当光的偏振方向不垂直也不平行于镜像面(图 1(a) 中黑色虚线)时,各个自旋的光电流并不为 0,并且 2 种自旋通道的光电流的大小不相等,方向相反,从而形成电荷流  $I_c = R_\uparrow + R_\downarrow$  和自旋流  $I_s = R_\uparrow - R_\downarrow$  始终不为 0 的光电流.这种光致自旋流现象依赖于光的偏振角度.

接下来,进一步分析这些光电流的形成.在偏振光照射下(大于光子能量),中心区价带的电子被激发到中心区的导带上.然而,由于中心区与左、右电极电子分布处于非平衡状态,所以激发到导带的电子进一步流向左电极和右电极.此时,左、右电极的相同能量的价带电子流入中心区以填充由于光激发过程而形成的空穴.对于每个电极,净光电流是由流入、流出这 2 个过程的电流分量之和所决定的.在一定程度上,光的偏振方向决定着电子从左、右电极流入中心散射区(或者中心区的电子流向左、右电极)的相对概率<sup>[27]</sup>.当光的偏振方向平行或者垂直于图 1(a) 的镜像对称平面(也就是  $\theta$  为  $0^\circ$ 、 $90^\circ$  或  $180^\circ$ ) 时,整个输运体系依然保持对称性,因此每个自旋通道的电子进入(离开)左、右电极的相对概率是相等的,从而导致每个自旋通道在光电流产生过程中的净电流为 0,这也与以前的理论研究一致<sup>[28-29]</sup>.

紧接着,研究在 AP 构型下 8-ZSiNR 的自旋极化的光学伽伐尼效应,其结果如图 5(c) 和图 5(d) 所示.研究发现:自旋向上的光电流  $R_\uparrow$  和自旋向下的光电流  $R_\downarrow$  都不为 0.但 2 种自旋通道的光电流都不再与  $2\theta$  呈现完美的  $\sin(2\theta)$  正弦关系,而是呈现  $\pm a \sin(2\theta + b) \pm c$  关系.同时也注意到,尽管  $a$  和  $b$  的大小对于线偏振光的情况是不同的,但从图 5(d) 可以看出  $R_\uparrow$  和  $R_\downarrow$  的大小总是相等而符号却总是相反,这意味着产生了纯自旋流,而纯自旋流的出现不依赖于光的偏振角.其鲁棒性的原因在于体系的自旋密度具有空间反演反对称性.图 6 为在 P 和 AP 构型下自旋密度差  $\Delta\rho(r)$ .对于“P”构型,如图 6(a) 所示,发现  $\Delta\rho(r)$  因引入了 2 个大小和方向

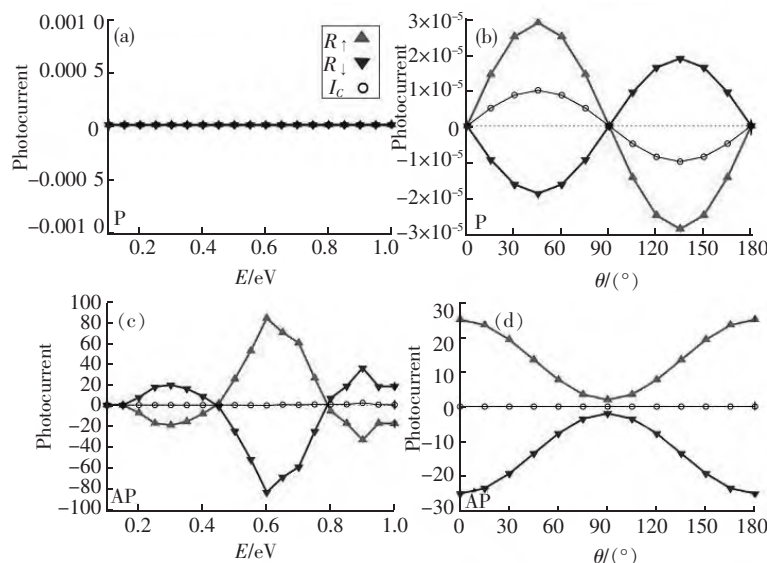


图 5 自旋极化的光电流以及电荷流与光子能量和偏振角的变化关系

相同的磁场而表现出镜像对称性,这表明反演对称性被打破并进一步转换为  $C_s$  对称,而每个自旋分量 ( $\rho_{\uparrow}$  和  $\rho_{\downarrow}$ ) 的电荷密度仍然保持  $C_s$  对称.与 P 构型相反,AP 构型呈现出不同的情况.如图 6(b) 所示,  $\Delta\rho(r)$  是反对称的,这意味着当引入 2 个反平行磁场时,自旋密度的反演反对称保持不变.这 2 个体系获得不同的光电流结果区别在于自旋密度的对称性不同.从图 6(b) 的自旋密度分析可以看出:由于自旋依赖的电荷密度为  $\rho_{\uparrow}(r) = \rho_{\downarrow}(-r)$  和  $\rho_{\downarrow}(r) = \rho_{\uparrow}(-r)$ ,所以 AP 构型的自旋密度 ( $\Delta\rho(r)$ ) 是反对称的,即  $\Delta\rho(r) = -\Delta\rho(-r)$ .相对于空间反演中心  $O$  的任意 2 个原子都是反铁磁耦合的<sup>[30]</sup>.因此,一个自旋方向的电子所经历的势能,将与另一个自旋方向相反的电子所经历的势能高度完全相同,这必然会产生纯自旋流.相反,在具有  $C_s$  对称的 P 构型中,没有  $\Delta\rho(r) = -\Delta\rho(-r)$ ,一个自旋在一个方向上的电流通常不等于另一个自旋在相反方向上的电流,除非偏振角度  $\theta$  为  $0^\circ$ ,  $90^\circ$  和  $180^\circ$ .由此可知,“AP”构型比“P”构型更适合自旋电子学.

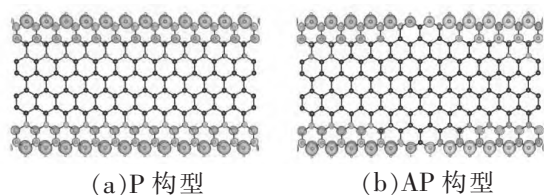


图 6 在不同构型下的自旋密度

### 3 结论

综上所述,在磁场调控和光电效应下构造了 8-ZSiNR 的硅烯开关器件和光电纯自旋流器件.通过磁场调控来改变器件的轨道对称性,进而实现电导开关.若锯齿形硅链为奇数,则器件没有镜像对称平面 A 和 B 带也没有确定的对称性.可知镜像对称平面是否存在对 ZSiNR 的输运特性至关重要.研究发现:在 P 构型硅烯器件中,在费米能级附近不存在电导间隙.当对整个结构施加反平行磁场(AP 构型)时,虽然左右电极都处于导电状态,但整个器件仍然是绝缘的,这可以通过费米能级附近的电导间隙表现出来.这种差别是由在左右电极中的轨道对称性不匹配造成的.过去的研究工作认为自旋态密度具有中心反演反对称是产生纯自旋流的重要因素.但是研究表明,轨道对称性在某些情况下是至关重要的.除此之外,通过以 8-ZSiNR 构成的自旋光电器件为例,发现 P 构型和 AP 构型可以获得不同的光电流结果,有趣的是在 AP 构型中获得了不依赖于光子能量和偏振角的纯自旋流.因此,这种通过调

整轨道对称性实现电导切换的机制以及通过磁场调控产生纯自旋流的方法可以在未来基于硅烯的电子器件的设计中加以考虑.

### 4 参考文献

- [1] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene [J]. Nature, 2005, 438(7065): 197-200.
- [2] BERGER C, WU Xiaosong, FIRST P N, et al. Dirac particles in epitaxial graphene films grown on SiC [J]. Advances in Solid State Physics, 2008, 47: 145-157.
- [3] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. Science, 2004, 306(5696): 666-669.
- [4] ZHANG Yuanbo, TAN Yanwen, STORMER H L, et al. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene [J]. Nature, 2005, 438(7065): 201-204.
- [5] DRUMMOND N D, ZOLYOMI V, FAL'KO V I. Electrically tunable band gap in silicene [J]. Physical Review B, 2012, 85(7): 75423.
- [6] ZHANG Changwen, YAN Shishen. First-principles study of ferromagnetism in two-dimensional silicene with hydrogenation [J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2012, 116(6): 4163-4166.
- [7] DING Yi, NI Jun. Electronic structures of silicon nanoribbons [J]. Applied Physics Letters, 2009, 95(8): 83115.
- [8] KANG Jun, WU Fengmin, LI Jingbo. Symmetry-dependent transport properties and magnetoresistance in zigzag silicene nanoribbons [J]. Applied Physics Letters, 2012, 100(23): 233122.
- [9] XU Chengyong, LUO Guangfu, LIU Qihang, et al. Giant magnetoresistance in silicene nanoribbons [J]. Nanoscale, 2012, 4(10): 3111-3117.
- [10] LALMI B, OUGHADDOU H, ENRIQUEZ H, et al. Epitaxial growth of a silicene sheet [J]. Applied Physics Letters, 2010, 97(22): 223109.
- [11] CAHANGIROV S, TOPSAKAL M, AKTÜRK E, et al. Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium [J]. Physical review letters, 2009, 102(23): 236804.
- [12] LI Zuanqi, QIAN Haiyun, WU Jian, et al. Role of symmetry in the transport properties of graphene nanoribbons under bias [J]. Physical review letters, 2008, 100(20): 206802.
- [13] KIM W Y, KIM K S. Prediction of very large values of magnetoresistance in a graphene nanoribbon device [J]. Nature nanotechnology, 2008, 3(7): 408-412.
- [14] IVCHENKO E L, PIKUS G E. New photogalvanic effect in gyrotropic crystals [J]. ZhETF Pisma Redaktsiiu, 1978, 27: 640.

- [15] BELINICHER V I. Space-oscillating photocurrent in crystals without symmetry center [J]. *Physics Letters A*, 1978, 66(3): 213-214.
- [16] ASNIN V M, BAKUN A A, DANISHEVSKII A M, et al. Observation of a photo-emf that depends on the sign of the circular polarization of the light [J]. *ZhETF Pisma Redaktsiiu*, 1978, 28: 80-84.
- [17] GANICHEV S D, PRETTL W. Spin photocurrents in quantum wells [J]. *Journal of physics: Condensed matter*, 2003, 15(20): R935.
- [18] WANG Dakun, SUN Qingfeng, GUO Hong. Spin-battery and spin-current transport through a quantum dot [J]. *Physical Review B*, 2004, 69(20): 205312.
- [19] TAO Xixi, ZHANG Lei, ZHENG Xiaohong, et al. h-BN/graphene van der Waals vertical heterostructure: a fully spin-polarized photocurrent generator [J]. *Nanoscale*, 2018, 10(1): 174-183.
- [20] MUNOZ-ROJAS F, FERNÁNDEZ-ROSSIER J, PALACIOS J. Giant magnetoresistance in ultrasmall graphene based devices [J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(13): 136810.
- [21] SON Y W, COHEN M L, LOUIE S G. Half-metallic graphene nanoribbons [J]. *Nature*, 2006, 444(7117): 347-349.
- [22] ZHANG Lei, GONG Kui, CHEN Jingzhe, et al. Generation and transport of valley-polarized current in transition-metal dichalcogenides [J]. *Physical Review B*, 2014, 90(19): 195428.
- [23] HENRICKSON L E. Nonequilibrium photocurrent modeling in resonant tunneling photodetectors [J]. *Journal of Applied Physics*, 2002, 91(10): 6273-6281.
- [24] MAASSEN J, HARB M, MICHAUD-RIOUX V, et al. Quantum transport modeling from first principles [J]. *Proceedings of the IEEE*, 2012, 101(2): 518-530.
- [25] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18): 3865.
- [26] GANICHEV S D, RÖSSLER U, PRETTL W, et al. Removal of spin degeneracy in p-SiGe quantum wells demonstrated by spin photocurrents [J]. *Physical Review B*, 2002, 66(7): 75328.
- [27] JIANG Peng, TAO Xixi, HAO Hua, et al. Two-dimensional centrosymmetrical antiferromagnets for spin photogalvanic devices [J]. *NPJ Quantum Information*, 2021, 7(1): 21.
- [28] LI Yuejun, SHANG Xiaofei, ZHOU Yanhong, et al. Realizing pure spin current by the photogalvanic effect in armchair graphene nanoribbons with nano-constriction engineering [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, 25(4): 2890-2896.
- [29] CHEN Yenchia, CAO Ting, CHEN Chen, et al. Molecular bandgap engineering of bottom-up synthesized graphene nanoribbon heterojunctions [J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10(2): 156-160.
- [30] MA Ruguang, LIN Gaoxin, ZHOU Yao, et al. A review of oxygen reduction mechanisms for metal-free carbon-based electrocatalysts [J]. *NPJ Computational Materials*, 2019, 5(1): 78.

## The Effect of Magnetic Modulation on the Transport Properties of Silicene Devices

SHANG Xiaofei, CAO Rufeng, XUE Jun, LI Yuejun, ZHOU Yanhong\*  
(College of Science, East China Jiaotong University, Nanchang Jiangxi 330013, China)

**Abstract:** Based on a first principles approach, we have investigated the response of silicene devices to external magnetic fields and their optoelectronic transport properties. Two silicon device structures have been constructed based on the spin-magnetic configuration of the left and right leads: a P configuration with parallel magnetic moments and an AP configuration with anti-parallel magnetic moments. It is found that by adjusting the magnetic field, the device's electron transmission could be switched between the conducting and insulating states. In addition to this, the two devices obtain different photocurrents under the photogalvani effect. Interestingly, the pure spin current in the AP configuration is neither dependent on the energy of the photon nor is it affected by the angle of polarization of the incident light, whereas the P configuration is not. Mechanisms to achieve conductance switching by adjusting orbital symmetry and methods to generate pure spin currents through magnetic field modulation could be considered in the design of future electronic devices from silicene.

**Key words:** photogalvani effect; spatial inversion symmetry; orbital symmetry; spin density

(责任编辑: 冉小晓)