

功能化扶手椅型石墨烯纳米带异质结的磁器件特性

朱朕 李春先 张振华

Magnetic device properties for a heterojunction based on functionalized armchair-edged graphene nanoribbons

Zhu Zhen Li Chun-Xian Zhang Zhen-Hua

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 65, 118501 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.118501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.118501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I11>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于钴和坡莫合金纳米磁体的全自旋逻辑器件开关特性研究

[Switching characteristics of all spin logic devices based on Co and Permalloy nanomagnet](#)

物理学报.2016, 65(9): 098501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.098501>

界面铁掺杂锯齿形石墨烯纳米带的自旋输运性能

[Spin transport properties for iron-doped zigzag-graphene nanoribbons interface](#)

物理学报.2016, 65(6): 068503 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.068503>

面内形状各向异性对自旋转矩振荡器零场振荡特性的影响

[Effect of the intrinsic in-plane shape anisotropy on the oscillation characteristics of zero-field spin torque oscillator](#)

物理学报.2015, 64(19): 198502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.198502>

应力调制的自旋转矩临界电流

[Spin-torque critical current tuned by stress](#)

物理学报.2014, 63(13): 138501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.138501>

铁磁/半导体(绝缘体)/铁磁异质结中渡越时间与两铁磁层磁矩夹角变化的关系

[Relations between traversal time in ferromagnetic/semiconductor\(insulator\)/ferromagnetic heterojunction and the relative magnetic moment angle in two ferromagnetic layers](#)

物理学报.2013, 62(20): 208502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.208502>

# 功能化扶手椅型石墨烯纳米带异质结的磁器件特性\*

朱朕 李春先 张振华†

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114)

(2016年1月21日收到; 2016年3月6日收到修改稿)

石墨烯在未来纳米电子器件领域具有广泛的应用前景, 但是基于扶手椅型石墨烯纳米带 (AGNR) 的磁输运性质的研究还比较少. 本文理论上提出 AGNR 边缘桥接过渡金属 Mn 原子, 再用双 F 原子 (或双 H 原子) 饱和形成特殊化学修饰的纳米带 (AGNR-Mn-F<sub>2</sub> 或 AGNR-Mn-H<sub>2</sub>), 并运用基于第一性原理和非平衡态格林函数相结合的方法对其磁输运性质进行理论计算. 结果表明: 这两种纳米带所构成的异质结 (F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub>) 具有优良的磁器件特性, 即在很宽的偏压范围内, 能实现 100% 的自旋极化, 且在 P (在左右电极垂直加上相同方向的磁场) 和 AP 构型 (在左右电极垂直加上相反方向的磁场) 时, 分别具有单自旋和双自旋过滤效应; 同时发现, 这种异质结也具有双自旋二极管效应, 它的最大整流比可达到 10<sup>8</sup>. 此外, 改变开关磁场的方向, 即从一种磁构型变换为另一种磁构型时, 能产生明显的自旋阀效应, 其巨磁阻高达 10<sup>8</sup>%. 这意味着这种特殊的异质结能同时实现优良的自旋过滤、双自旋二极管及巨磁阻效应, 这对于发展自旋磁器件有重要意义.

**关键词:** 石墨烯纳米带异质结, 自旋过滤效应, 自旋二极管效应, 巨磁阻效应

**PACS:** 85.75.-d, 71.15.-m, 72.25.-b, 73.63.-b

**DOI:** 10.7498/aps.65.118501

## 1 引言

石墨烯是一种在二维平面内单层碳原子排列成的蜂窝状晶格二维材料. 由于其本身高的电子迁移率、弱的轨道耦合、超精细的相互作用<sup>[1-3]</sup>等, 预期在未来纳米器件方面将具有广泛的应用前景<sup>[4-6]</sup>. 在目前的研究中, 基于石墨烯纳米带的纳米电子学研究非常广泛, 研究发现它们具有许多有趣的器件特性<sup>[7-15]</sup>, 特别是人们通过边缘修饰<sup>[16,17]</sup>、表面吸附<sup>[18,19]</sup>、内部掺杂<sup>[16,20,21]</sup>以及引入拓扑缺陷<sup>[22]</sup>等方法对石墨烯纳米带进行功能化, 使其表现出更卓越电子特性和器件性质. 如利用 B, N 原子掺杂, 在掺杂位置变化时石墨烯纳米带能表现出半导体和半金属性质的改变<sup>[23]</sup>.

同时研究还发现: B—N 成键掺杂比单独的 B 或 N 原子以及 B/N 非成键掺杂都稳定, 而且 B—N 成键掺杂可以通过改变掺杂位置来调节纳米带的带隙大小<sup>[24]</sup>; 此外, B, N 原子分别对左右电极掺杂时会对电子输运表现出特别的耦合选择性<sup>[25]</sup>. 当锯齿型石墨烯纳米带 (ZGNR<sub>S</sub>) 内部引入拓扑缺陷时, 相关器件在一定偏压下呈现负微分电阻现象<sup>[10]</sup>, 在其单边缘引入 V 形缺陷, 也能够观测到同样的现象, 同时出现自旋过滤效应, 并且电子的输运与 V 形缺陷的尺度密切相关<sup>[11]</sup>. 当 ZGNR 两边缘分别用 CH<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub> 以及 OH 基团进行边缘修饰时, ZGNR 则由半导体转化为半金属<sup>[13,26]</sup>. 此外, 还有一些研究则是运用金属原子边缘修饰 ZGNRS<sup>[23]</sup>, 例如 Wang 等<sup>[27]</sup>系统地研究了金属原

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61371065, 51302022) 和湖南省自然科学基金 (批准号: 12JJ3004, 14JJ2076, 2015JJ3002, 2015JJ2009, 2015JJ2013) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lgzhang@sohu.com.

子钝化的 ZGNR(M-ZGNR), 并且, 选取了两大类金属原子, 即 1) 过渡金属原子(TM) Fe, Co 和 Ni; 2) 贵金属(NM) 原子 Cu, Ag 和 Au. 计算结果表明 TM-ZGNR 在费米能级附近表现出强的自旋极化, NM-ZGNR 与 H-ZGNR 具有相类似的性质. 在基于 ZGNR<sub>S</sub> 的纳米电子器件研究中, Zeng 等<sup>[9]</sup> 提出了一种异质节结构, 异质节是由边缘 H 原子钝化的 ZGNR (ZGNR-H) 和边缘 O 原子钝化的 ZGNR (ZGNR-O) 共同构成的纳米带结构, 计算结果表明该异质节具有较好的双自旋过滤效果和巨磁阻效果. Chen 等<sup>[28]</sup> 研究了边缘单 H 化 (ZGNR-H) 和边缘双 H 化 (ZGNR-H<sub>2</sub>) 的纳米带构成的异质节的输运性质, 同样实现了 100% 的自旋极化率, 器件的整流比高达 10<sup>5</sup> 数量级.

总之, 目前对石墨烯的电子学研究主要集中在不同边缘修饰、不同的掺杂以及不同形状的缺陷对 ZGNRs 电子输运的影响. 事实上, AGNRs 是更稳定的纳米结构. 在本文中, 我们提出一种基于 AGNRs 的异质结 F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub>, 计算表明此几何结构能在很宽的偏压范围内表现出优良的自旋过滤效果、自旋二极管效应及巨磁电阻效应, 这也许对设计磁器件有重要应用价值.

## 2 计算模型及理论方法

图 1 所示为我们提出的异质结 F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub>, 它是由 AGNR-Mn-F<sub>2</sub> 和 AGNR-Mn-H<sub>2</sub> 两种纳米带构成, 两种纳米带来源于 AGNR 边缘的两次钝化. 首先用过渡金属 Mn 原子桥接在 AGNR 边缘相邻的两个碳原子之间形成 AGNR-Mn 结构, 以饱和碳原子的悬挂键增加纳米带的几何稳定性. 同时考虑到 Mn 原子有较多的价电子, 需对其未饱和的悬挂键进一步钝化以充分消除其化学活性. 我们分别利用双 F 原子饱和双 H 原子进行第 2 次钝化, 以形成特殊边缘修饰的 AGNR: AGNR-Mn-F<sub>2</sub> 和 AGNR-Mn-H<sub>2</sub>. 我们的边形成能 (edge formation energy) 计算表明: AGNR-Mn-F<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>) 的边形成能比 AGNR-Mn-F(H) 及 AGNR-Mn 低很多, 所以 AGNR-Mn-F<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>) 是相对最稳定的几何结构. 纳米带的宽度用二聚碳链的数目 *N* 来定义, 这里选取宽度 *N* = 7 的 AGNR 作为代表进行研究. 图 1 所示的由 AGNR-Mn-F<sub>2</sub> 和 AGNR-Mn-H<sub>2</sub> 异质结所构成的纳米电子器件可分为三个部分: 左电极, 右

电极和中心散射区 (器件区). 左右电极分别由两个半无限长的 AGNR-Mn-F<sub>2</sub> 和 AGNR-Mn-H<sub>2</sub> 构成, 在图中则是用两个单胞组成的超原胞 (supercell) 代表. 两个半无限长的纳米带设置为在器件区中间连接.

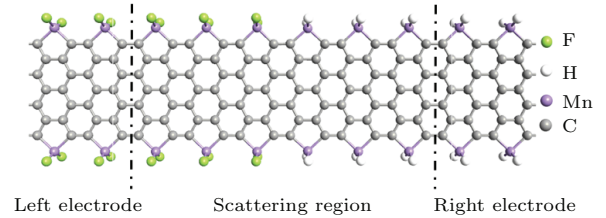


图 1 F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub> 构成的器件模型 器件分为三个部分: 左电极、右电极和中心散射区

Fig. 1. The device model based on the heterojunction F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub>. Such a device is divided into three regions: left electrode, central scattering region, and right electrode.

器件模型的几何结构优化、电子结构以及输运计算是利用基于密度泛函理论和非平衡态格林函数方法相结合的第一性原理. 原子实采用 Troullier Martins 赝势进行近似处理, 同时用局域轨道展开价电子态, 考虑原子极化的影响, 我们选用 DZP(double ζ+ polarization) 作为基函数组. 交换关联函数选取自旋极化的局域密度近似 (LSDA). 在第一布里渊区采用 1 × 1 × 300 的 *k* 点抽样, 即在 *x*, *y* 和 *z* 方向分别取 1, 1 和 300 个点. 能量截断半径 (Mesh cut-off) 的取值为 250 Ry. 为了消除模型与“像”之间的相互作用, 设置 15 Å 的真空层. 电子结构以及输运计算前, 对器件模型进行几何优化, 直到每个原子上的残存力 (residual force) 小于 0.01 eV/Å, 优化后得到边缘的 C—C 键、C—Mn 键、Mn—F 键及 Mn—H 键长分别为 1.45, 1.95, 1.72 及 1.6387 Å. 连接同一个 Mn 原子的两个 F 原子和 H 原子的空间距离分别为 3.2 和 3.02 Å. 在计算中, 我们将左右电极化学势的平均值作为费米能级, 并且将这个平均值定义为 0 eV. 自旋极化电流计算运用类 Landauer 公式<sup>[29–31]</sup>:

$$I_{\sigma}(V_b) = \frac{e}{h} \int T_{\sigma}(E, V_b) [f_L(E, V_b) - f_R(E, V_b)] dE,$$

这里  $T_{\sigma}(E, V_b)$  自旋相关的透射系数,  $f_L(E, V_b)$  和  $f_R(E, V_b)$  分别表示左右电极的费米-狄拉克分布函数,  $\sigma$  分别代表  $\alpha$  自旋和  $\beta$  自旋.

### 3 计算结果与分析

为了研究图 1 所示的异质结的磁输运特性, 我们设置两种磁构型, 如图 2(a) 和图 2(b) 所示, 即: (a) P 构型, 对左、右电极垂直施加同方向外磁场, 使整个器件呈现出铁磁态耦合, 此时左右电极均是  $\alpha$  自旋为多子 (majority); (b) AP 构型, 在左、右电极上垂直施加反向外磁场, 使得左电极的自旋方向与右电极的自旋恰好相反, 也就是说, 左电极是  $\alpha$  自旋为多子而右电极则是  $\beta$  自旋为多子.

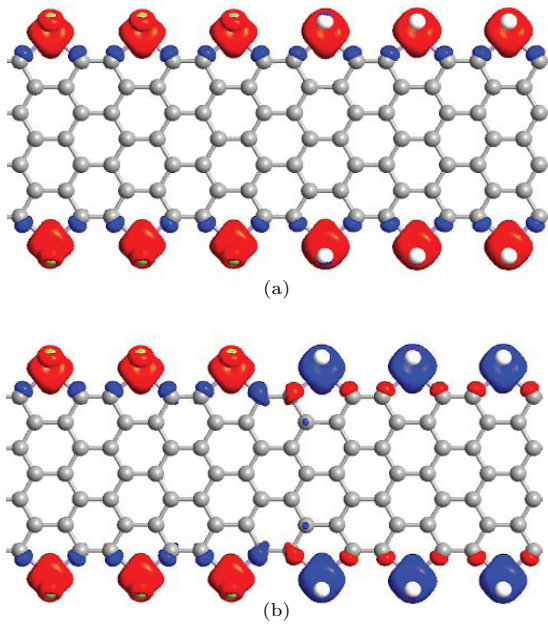


图 2 计算时设置的两种不同类型磁构型 (a) P 构型; (b) AP 构型  
Fig. 2. Two types of magnetic configurations: (a) P configuration and (b) AP configuration.

图 3(a) 和图 3(b) 所示为本文计算的分别在 P 构型和 AP 构型下的异质结的伏安 ( $I$ - $V$ ) 特性. 很明显, 无论在 P 构型或 AP 构型下, 在较大的偏压范围内 ( $-0.6$ — $0.6$  V) 电流都有非常明显的自旋极化. 在 P 构型下, 如图 3(a) 所示, 对于  $\alpha$  自旋的电子, 无论是在正偏压还是负偏压下都可以穿过器件; 但对  $\beta$  自旋电子, 隧穿通道是关闭的, 不能通过器件, 即此时的  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  结构表现出良好的单自旋方向的自旋过滤效应. 而在 AP 构型情况下, 如图 3(b) 所示, 在较大偏压范围内 ( $-0.6$ — $0.6$  V) 电流也出现了非常明显的自旋极化, 但完全不同于 P 构型, 即在不同极性偏压下, 不同自旋方向的电子被过滤掉, 具体而言, 在正偏压下

$\alpha$  自旋的电子能通过器件而产生  $\alpha$  自旋电流, 但  $\beta$  自旋电子被完全阻挡; 当施加负偏压时, 只有  $\beta$  自旋的电子通过器件, 但  $\alpha$  自旋的电子隧穿被抑制. 这说明在 AP 构型情况下  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  结构具有双自旋过滤效应.

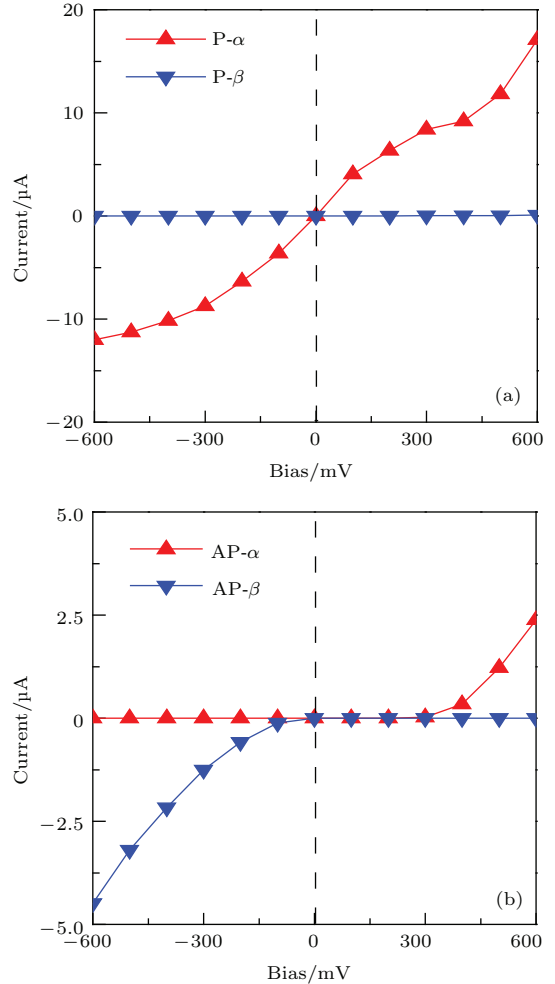


图 3  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  器件在  $-0.6$ — $0.6$  V 偏压范围内的自旋极化的  $I$ - $V$  曲线 (a) P 构型; (b) AP 构型  
Fig. 3. The spin-resolved  $I$ - $V$  characteristics in the bias region from  $-0.6$  V to  $0.6$  V in the device based on the  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$ : (a) For P configuration; (b) for AP configuration.

为了解释极化电流是产生的物理原因, 我们以 P 构型在  $0$  V 及  $\pm 0.6$  V 偏压时的情况作为代表, 给出电极能带与器件透射谱的关系, 如图 4(a) — (c) 所示. 在每一个图中, 左、右两边分别是在不同偏压下左、右电极的能带结构, 显然它们是自旋劈裂的, 中间为在该偏压下器件的透射谱. 在  $0$  V 时, 如图 4(b) 所示, 可以看出左电极对应的纳米带 AGNR-Mn- $F_2$  及右电极对应的纳米带 AGNR-Mn- $H_2$  都是宽带隙磁性半金属 (half-metal), 它们的带



隙分别约为1.2 eV 及 0.97 eV. 所谓半金属, 就是对一种自旋态来说是金属(子能带能穿过 Fermi 能级), 而对另一种自旋态来说是半导体(子能带不能穿过 Fermi 能级). 人们普遍认为, 宽带隙半金属对于实现高性能磁器件有特别重要的意义. 我们的计算表明: AGNR-Mn 及 AGNR-Mn-H(F) 在铁磁态时不是半金属或仅是窄带隙半金属, 只有 AGNR-Mn-H<sub>2</sub>(F<sub>2</sub>) 实现了宽带隙半金属性质. 一般说来, 对于考虑自旋的电子隧穿, 仅当左、右电极同种自旋的子能带互相对齐时, 这种自旋的电子才能从一个电极通过散射区隧穿到另一个电极, 出现与这种自旋相对应的透射峰, 因此如果电极的能带有明显的自旋劈裂, 那么器件的透射峰自然也是自旋相关的. 在 0 V 时, 左右电极  $\alpha$  自旋子能带在较大的能量范围内互相对齐, 从而导致了在 Fermi 能级附近较大能量范围内出现大的  $\alpha$  自旋透射峰. 而左右电极  $\beta$  自旋子能带仅在远离 Fermi 能级的上方互相对齐, 所以其透射峰出现在远离 Fermi 能级的地方, 如图 4 (b) 所示. 当施加偏压  $-0.6$  V 时, 如图 4 (a) 所示, 由于偏压效应, 使得左(右)电极 Fermi 能级及所有能带向下(上)移动  $0.3$  eV, 在偏压窗  $-0.3$ — $0.3$  eV 内(两黑色虚线内), 只有左右电极  $\alpha$  自旋的子能带能对齐, 所以该器件在  $-0.6$  V 偏压时仅有  $\alpha$  自旋的电流, 而  $\beta$  自旋电流不出现. 而在  $0.6$  V 时, 如图 4 (c), 其偏压效应与  $-0.6$  V 时恰好相反, 即左(右)电极 Fermi 能级及所有能带向上(下)移动  $0.3$  eV, 在偏压窗  $-0.3$ — $0.3$  eV 内(两黑色虚线内), 也只有左右电极  $\alpha$  自旋的子能带能对齐, 所以该器件在  $0.6$  V 偏压时也仅有  $\alpha$  自旋的电流, 而无  $\beta$  自旋电流. 这些结论与我们在图 3 (a) 中看到的极化电流情形完全一致. 图 3 (b) 中的极化电流也可做同样的解释, 此处从略.

通过如图 3 所示的  $I$ - $V$  曲线图, 我们已经看到了 F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub> 异质结有明显的磁器件效应, 接下来我们定量地计算这些性能. 定义与自旋相关的自旋极化率为

$$SP_{\sigma} = \frac{I_{\sigma}}{I_{\text{total}}} \times 100\% \quad (\sigma = \alpha, \beta),$$

磁电阻 (magnetoresistance, MR) 为

$$MR = \frac{I_P - I_{AP}}{I_{AP}} \times 100\%,$$

以及自旋相关的整流比定义为

$$RR_{\sigma} = \frac{|I_{\sigma}(\pm V)|}{|I_{\sigma}(\mp V)|} \quad (\sigma = \alpha, \beta),$$

计算结果如图 5 所示. 图 5 (a) 很清楚地反映出在 P 构型时, 能够实现接近 100% 的自旋极化, 且在正负偏压下只对单一自旋 ( $\alpha$ -自旋) 通道是打开的. 然而在 AP 构型时, 如图 5 (b) 所示, 可以看出 AP 构型也能够呈现接近 100% 的自旋极化, 但属于不同的自旋, 即呈现双自旋过滤效应, 这表明只需改变偏压的极性就能获得不同自旋方向的极化电流 ( $\alpha$  或  $\beta$  自旋电流). F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub> 结构无论 P 构型

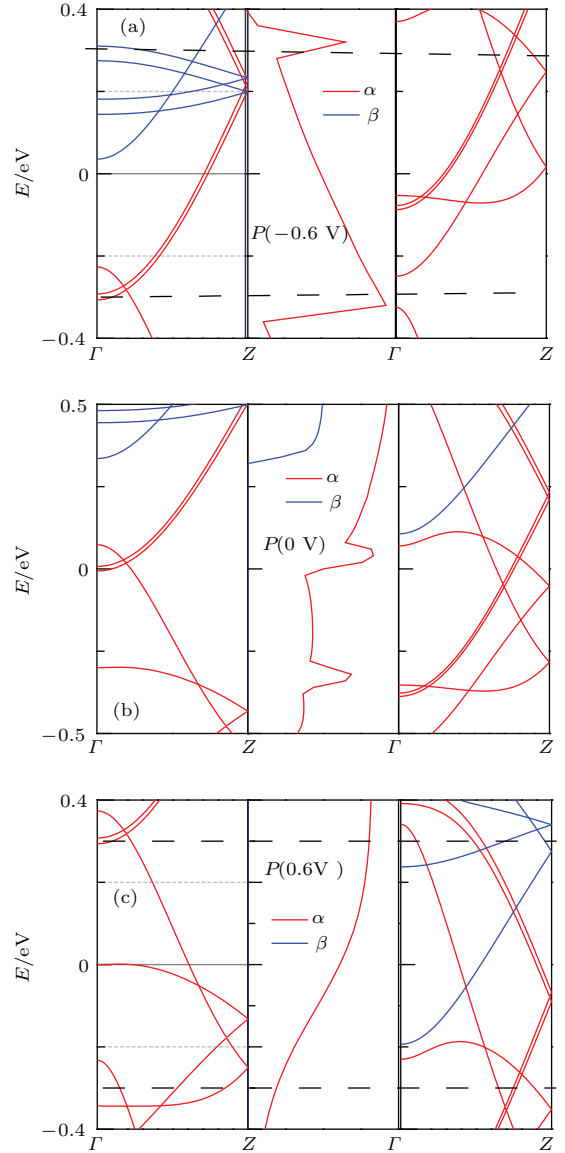


图 4 (网刊彩色) 在 P 构型下 F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub> 器件透射谱与两电极能带之间的关系 (a), (b) 和 (c) 分别为  $-0.6$  V, 0 V 和  $0.6$  V 偏压时的情况, 黑色虚线之间表示偏压窗

Fig. 4. (color online) The relation of the transmission spectrum and electrode band structures in the F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub> based device at several typical biases, 0 and  $\pm 0.6$  V, under AP configuration: (a) For  $-0.6$  V; (b) for 0 V; (c) for  $0.6$  V. The region between two black dotted lines indicates the bias window.

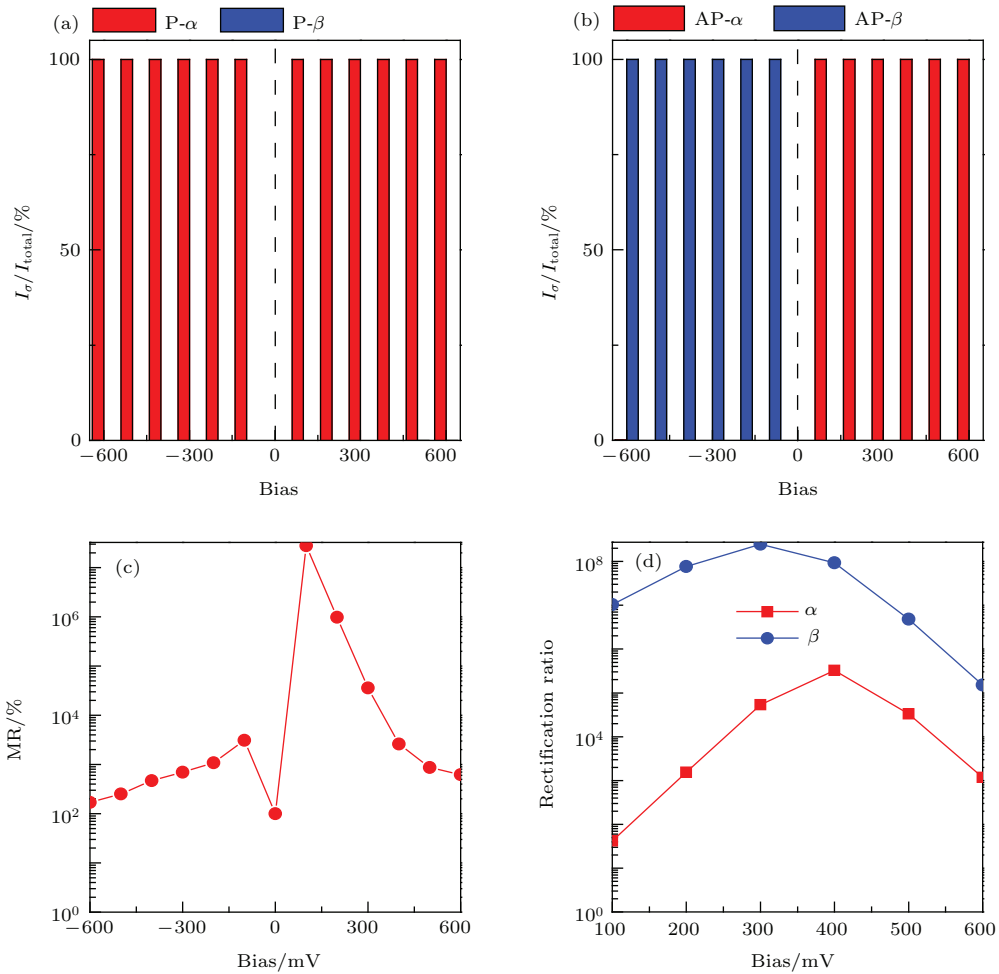


图5 (网刊彩色) (a), (b)  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  器件分别在 P 构型和 AP 构型情况下的自旋极化率; (c) 不同偏压下的巨磁阻; (d) 在 AP 构型情况下自旋极化电流的整流比  
 Fig. 5. (color online) The spin polarizations for  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  based device under P configuration (a) and under AP configuration (b), and (c) for the giant magnetoresistance effect and (d) for the rectification ratio under AP configuration.

或 AP 构型都能在很大偏压范围内保持优良的自旋过滤效应, 明显地优于以前所研究的 H 饱和的 ZGNR 结构, 基于 H-ZGNR 的磁器件仅在 AP 构型时才出现自旋过滤, 且被限制在很小的偏压范围内. 此外, 改变施加在电极上的磁场方向(从一种磁构型切换到另一种磁构型时), 这个开关磁场能产生自旋阀效应, 如图 5(c) 所示, 其巨磁阻高达  $10^8\%$ . 图 5(d) 所示为在 AP 构型时磁器件的整流比, 其最高值可达  $10^8$  数量级, 特别值得注意的是:  $\alpha$ -自旋电流与  $\beta$ -自旋电流的整流方向是不同的,  $\alpha$ -自旋态为正向整流,  $\beta$ -自旋态为反向整流. 这说明基于  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  的磁器件能够实现优良的双自旋二极管效应.

### 4 结 论

我们从理论上提出  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  异质结, 通过计算得到了该结构的电子输运性能, 发现基于  $F_2$ -AGNR-Mn- $H_2$  的磁器件能在很宽的偏压范围内, 能实现 100% 的自旋极化, 且在 P 和 AP 构型时, 分别具有单自旋和双自旋过滤效应. 同时发现这种磁器件具有双自旋二极管效应, 它的最大整流比能达到  $10^8$ . 此外, 改变开关磁场的方向, 即从一种磁构型变为另一种磁构型时, 能产生明显的自旋阀效应, 其巨磁阻高达  $10^8\%$ . 这意味着这种特殊的异质结能同时实现自旋过滤、双自旋二极管及巨磁阻效应, 这对于发展自旋磁器件有重要意义.

参考文献

- [1] Huertas-Hernando D, Guinea F, Brataas A 2006 *Phys. Rev. B* **74** 155426
- [2] Fischer J, Trauzettel B, Loss D 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155401
- [3] Bolotin K I, Sikes K J, Jiang Z, Klima M, Fudenberg G, Hone J 2008 *Solid State Commun.* **146** 351
- [4] Kim T W, Gao Y, Acton O, Yip H L, Ma H, Chen H 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 023310
- [5] Obradovic B, Kotlyar R, Heinz F, Matagne P, Rakshit T, Giles M D 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 14210
- [6] Rivero P, Jimenez-Hoyos C A, Scuseria G E 2013 *J. Phys. Chem. B* **117** 12750
- [7] Zeng M, Shen L, Zhou M, Zhang C, Feng Y 2011 *Phys. Rev. B* **83** 115427
- [8] Ozaki T, Nishio K, Weng H, Kino H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 115274
- [9] Zeng M, Shen L, Yang M, Zhang C, Feng Y 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 053101
- [10] Ren Y, Chen K Q 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 044514
- [11] Zhang X J, Chen K Q, Tang L M, Long M Q 2011 *Phys. Lett. A* **375** 3319
- [12] Chen Y, Hu H F, Wang X W, Zhang Z J, Cheng C P 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 196101 (in Chinese) [陈鹰, 胡慧芳, 王晓伟, 张照锦, 程彩萍 2015 物理学报 **64** 196101]
- [13] Wu M, Wu X, Zeng X C 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 3937
- [14] Qiu M, Liew K M 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 11709
- [15] Wang Y, Cao C, Cheng H P 2010 *Phys. Rev. B* **82** 2889
- [16] Wagner P, Ewels C P, Adjizian J J, Magaud L, Pochet P, Roche S 2013 *J. Phys. Chem.* **117** 26790
- [17] Li B, Xu D H, Zeng H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 117102 (in Chinese) [李彪, 徐大海, 曾晖 2014 物理学报 **63** 117102]
- [18] Song L, Zheng X, Wang R, Zeng Z 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 12145
- [19] Cao C, Wu M, Jiang J, Cheng H P 2010 *Phys. Rev. B* **81** 205424
- [20] Cocchi C, Prezzi D, Calzolari A, Molinari E 2010 *J. Phys. Chem. C* **133** 124703
- [21] Wang D, Zhang Z H, Deng X Q, Fan Z Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 207101 (in Chinese) [王鼎, 张振华, 邓小清, 范志强 2013 物理学报 **62** 207101]
- [22] Jaiswal N K, Srivastava P 2013 *Nanotech* **12** 685
- [23] Jaiswal N K, Srivastava P 2011 *Solid State Commun.* **151** 1490
- [24] Xiao J, Yang Z X, Xie W T, Xiao L X, Xu H, Ouyang F P 2012 *Chin. Phys. B* **21** 027102
- [25] Santos E J, Sánchez Portal D, Ayuela A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 125433
- [26] Longo R C, Carrete J, Ferrer J, Gallego L J 2010 *Phys. Rev. B* **81** 115418
- [27] Wang Y, Cao C, Cheng H P 2010 *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* **82** 2889
- [28] Qiu M, Liew K M 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 064319
- [29] Landauer R 1970 *Philos. Mag.* **21** 863
- [30] Li J, Zhang Z H, Wang D, Zhu Z, Fan Z Q, Tang G P 2014 *Carbon* **69** 142
- [31] Zhou Y H, Zeng J, Tang L M, Chen K Q, Hu W P 2013 *Org. Electron.* **14** 2940

# Magnetic device properties for a heterojunction based on functionalized armchair-edged graphene nanoribbons\*

Zhu Zhen Li Chun-Xian Zhang Zhen-Hua<sup>†</sup>

(School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

( Received 21 January 2016; revised manuscript received 6 March 2016 )

## Abstract

Graphene is predicted to hold a promising use for developing future miniaturized electronic devices. However, the magnetic transport properties based on the armchair-edged graphene nanoribbons (AGNRs) is less studied in currently existing work. So in this work the special chemical modified nanoribbons based on the edge of the AGNR bridged by the transition metal Mn atom and passivated subsequently by two F atoms or two H atoms (AGNR-Mn-F<sub>2</sub> or AGNR-Mn-H<sub>2</sub>) are proposed theoretically. Our calculations from first-principle method based on the spin-polarized density functional theory combined with the non-equilibrium Green's function technique show that the heterojunction F<sub>2</sub>-AGNR-Mn-H<sub>2</sub> consisting of such two types of nanoribbons possesses the excellent magnetic device features, namely, the spin polarization is able to reach almost 100% in a very large bias region, and under P magnetic configuration (the external magnetic fields applied perpendicularly to two electrodes are set to point to the same direction), the single spin filtering effects can be realized, while under the AP configuration (the external magnetic fields applied perpendicularly to two electrodes are set to point to the opposite directions), the dual spin filtering effects can be realized. It is also found that such a heterojunction features dual diode-like effect, and its rectification ratio is up to be 10<sup>8</sup>. Additionally, changing the direction of switching magnetic field, namely, changing the magnetic configurations from one kind of case to another, would lead to an obvious spin valve effect, and the giant magnetoresistance approaches to 10<sup>8</sup>%. These findings suggest that the excellent spin polarization, dual diode-like effect, and giant magnetoresistance effect can be realized simultaneously for this heterojunction, therefore, it holds good promise in developing spintronic devices.

**Keywords:** graphene nanoribbon heterojunction, spin filter effect, spin diode-like effect, giant magnetoresistance effect

**PACS:** 85.75.-d, 71.15.-m, 72.25.-b, 73.63.-b

**DOI:** 10.7498/aps.65.118501

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61371065, 51302022) and Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12JJ3004, 14JJ2076, 2015JJ3002, 2015JJ2009, 2015JJ2013).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: lgzhang@sohu.com.