

界面铁掺杂锯齿形石墨烯纳米带的自旋输运性能

邓小清 孙琳 李春先

Spin transport properties for iron-doped zigzag-graphene nanoribbons interface

Deng Xiao-Qing Sun Lin Li Chun-Xian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 068503 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.068503

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.068503>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I6>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

BN 协同掺杂金刚石电子结构和光学性质的第一性原理研究

First-principle studies of the electronic structures and optical properties of diamond crystal co-doped with B and N

物理学报.2016, 65(8): 087101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.087101>

CrMoNi 在 γ -Fe(C) 中的键合性质及对相结构稳定性的影响

The bond characters and phase stability effects of Cr Mo and Ni in bulk γ -Fe(C)

物理学报.2016, 65(3): 037101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037101>

Y 掺杂 ZnO 最小光学带隙和吸收光谱的第一性原理研究

Optical bandgap and absorption spectra of Y doped ZnO studied by first-principle calculations

物理学报.2016, 65(3): 037103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037103>

稀土 (La/Ce/Pr/Nd) 掺杂锐钛矿相 TiO₂ 磁性及光催化活性的第一性原理研究

First-principle study of the magnetism and photocatalytic activity of RE(La/Ce/Pr/Nd) doping anatase TiO₂

物理学报.2016, 65(3): 037102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037102>

CaS 电子结构和热力学性质的第一性原理计算

First-principles investigations on structure and thermodynamic properties of CaS under high pressures

物理学报.2016, 65(2): 027101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.027101>

界面铁掺杂锯齿形石墨烯纳米带的自旋输运性能*

邓小清† 孙琳 李春先

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114)

(2015年10月20日收到; 2015年12月31日收到修改稿)

基于密度泛函理论第一原理系统研究了界面铁掺杂锯齿(zigzag)形石墨烯纳米带的自旋输运性能, 首先考虑了宽度为4的锯齿(zigzag)形石墨烯纳米带, 构建了4个纳米器件模型, 对应于中心散射区的长度分别为 $N = 4, 6, 8$ 和10个石墨烯单胞的长度, 铁掺杂在中心区和电极的界面. 发现在铁磁(FM)态, 四个器件的 β 自旋的电流远大于 α 自旋的电流, 产生了自旋过滤现象; 而界面铁掺杂的反铁磁态模型, 两种电流自旋都很小, 无法产生自旋过滤现象; 进一步考虑电极的反自旋构型, 器件电流显示出明显的自旋过滤效应. 探讨了带宽分别为5和6的纳米器件的自旋输运性能, 中心散射区的长度为 $N = 6$ 个石墨烯单胞的长度, FM态下器件两种自旋方向的电流值也存在较大的差异, β 自旋的电流远大于 α 自旋电流. 这些结果表明: 界面铁掺杂能有效调控锯齿形石墨烯纳米带的自旋电子, 对于设计和发展高极化自旋过滤器件有重要意义.

关键词: 石墨烯纳米带, 自旋输运, 自旋过滤效应, 第一性原理方法

PACS: 85.75.-d, 81.05.ue, 31.15.E-

DOI: 10.7498/aps.65.068503

1 引言

石墨烯由单层的碳原子构成, 在力学、电学和磁性等方面表现出优良特性, 引起了广大科学工作者的关注^[1-3]. 目前, 已设计开发了一些基于石墨烯的功能性电子器件, 包括石墨烯整流器件^[4]、开关器件^[5]、自旋极化过滤器件^[6]、场效应管^[7]等. 若沿石墨烯某个特定方向进行切割, 可以得到一维石墨烯纳米带. 与二维石墨烯相比, 石墨烯纳米条带具有更小的尺寸效应和更优越的电磁特性. 与碳纳米管相似, 石墨烯纳米带有两种边界类型: 锯齿(zigzag)形^[8-10]和扶手椅(armchair)形^[11-13]. 其中, 锯齿形石墨烯纳米带(ZGNR)的导带与价带主要局域在带边缘, 即具有局域边缘态, 固有的边缘悬挂键构成了Fermi能级附近的本征态, 从而边缘的功能化修饰能实现对其电子特性的调控. 如单氢饱和的ZGNR, 其基态为反铁磁态(AFM), 当边缘

分别用单氢和双氢饱和时, 基态为铁磁态(FM)^[6], 且电子结构表现为双极化自旋半导体特征, 通过p型和n型掺杂可以调制电子自旋朝上和朝下状态的转换, 从而实现电子自旋过滤. 对于石墨烯的电磁特性功能化的研究方面, 常见的调控手段主要有边缘修饰^[14]、掺杂^[15]、引入缺陷^[16]或外场调节等^[17]. 如氢饱和的扶手椅形石墨烯的电子结构表现为非磁半导体, 当边缘采用Mn-F2饱和时, 则呈现出半金属性^[11]. 在锯齿形石墨烯纳米带中掺杂硼原子或氮原子时, 由于掺杂位置的不同而呈现半导体或半金属性^[18]. 另外用3d过渡金属Ni, Ti, Cr, Mn, Fe, Co掺杂或吸附在纳米带表面或边缘, 可以使得纳米带呈现铁磁或反铁磁态, 并且这些金属的电子态对体系的电荷输运有重要影响^[19-21]. 从掺杂位置和方式上, 以前对金属掺杂的研究主要集中在石墨烯纳米带的边缘钝化、表面吸附以及中心位置的替代掺杂. 作为纳米器件, 其输运特性受到以下因素的影响: 一方面来自于电极和中

* 国家自然科学基金(批准号: 61371065, 61201080)、湖南省自然科学基金(批准号: 2015JJ3002)、湖南省重点学科建设项目和湖南省高校科技创新团队支持计划和长沙理工大学创新项目资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xq_deng@163.com

心分子的本征结构 [22,23]; 另一方面为电极与中心分子之间的界面特性 [24,25]. 由于以前的研究很少考虑过渡金属掺杂在器件界面的情况, 事实上, 纳米器件的实验中, 界面环境对器件的输运起着至关重要的作用, 因此, 本文利用第一性原理方法, 以锯齿 (zigzag) 形石墨烯纳米带为研究对象, 研究界面铁掺杂的自旋输运性能, 对石墨烯纳米带分 FM, AFM 及电极的反自旋构型态 (AP) 三种情况分别进行考虑. 发现纳米器件在 FM 和 AP 态下能产生自旋过滤效应; 而在 AFM 态下, 无法产生自旋过滤效应. 这些结果表明: 界面铁掺杂能有效调控锯齿形石墨烯纳米带的电子输运, 对于设计和发展高极化自旋过滤器件有重要意义.

2 模型和方法

以铁掺杂的锯齿形石墨烯纳米带为研究对象, 分子和电极均为石墨烯, 如图 1 所示, 石墨烯与电极之间用铁连接, 器件由三个部分组成, 即左电极、右电极以及中心散射区. 根据中心区域的长度, 构建了 4 个纳米器件模型 M1—M4, 对应于中心散射区的长度分别为 $N = 4, 6, 8$ 和 10 个石墨烯单胞的长度. 体系的自旋电流可以由 Landauer-Buttiker 公式求出 [26,27]:

$$I_{\sigma} = (e/h) \int_{-V/2}^{V/2} T_{\sigma}(E, V) dE,$$

其中, e 和 h 分别为基本电荷和普朗克常量, $[-V/2, +V/2]$ 为能量积分区间, $T_{\sigma}(E, V)$ 对应电子能量 E 、外加偏压为 V 时体系的透射系数.

体系的几何结构优化和自旋输运特性的计算等均利用基于非平衡态格林函数和密度泛函理

论的第一原理方法 (ATK 软件) 进行 [28,29]. 采用 Quasi Newton 算法优化时, 每个原子上的作用力小于 $0.05 \text{ eV}/\text{\AA}$. 所有原子的价电子轨道的基函数选为 DZP (double ζ + polarization), 并通过 Siesta 局域化数字轨道进行具体运算, 电子交换关联势设为广义梯度近似. 对于能量截断半径 (mesh cutoff), 数值越高越接近真实值, 但耗时也越长, 本文取 150 Ry.

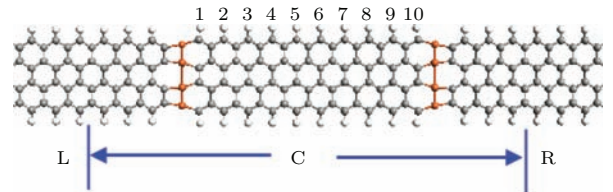


图 1 器件模型 M4 结构示意图 其中 L, C 和 R 分别表示左电极, 中心散射区和右电极, 模型 M1—M4 对应中心散射区的长度分别为 $N = 4, 6, 8$ 和 10 个单胞的长度
Fig. 1. The geometric structure of M4, L, R, and C means the left, the central scattering region, and right electrodes, and the length of scattering region is N unit cells, here, $N = 4, 6, 8, 10$.

3 计算结果与讨论

3.1 FM 态下的自旋输运特性

如图 2 (a)—(d), 给出的是 M1, M2, M3, M4 四种模型在 FM 态下的自旋极化密度 ($\nabla\rho = \rho_{\alpha} - \rho_{\beta}$), 纳米带上下边缘自旋方向是相同的. 从图形可知, M1—M4 中心散射区长度越来越大, 磁性主要分布在纳米带的边缘以及铁原子上, 并且铁原子上的磁矩与纳米带边缘是反向的. 比较而言, 随着中心区长度的增加, 即两边铁原子的距离越长, 中心区纳米带锯齿边缘的磁性变得越来越弱.

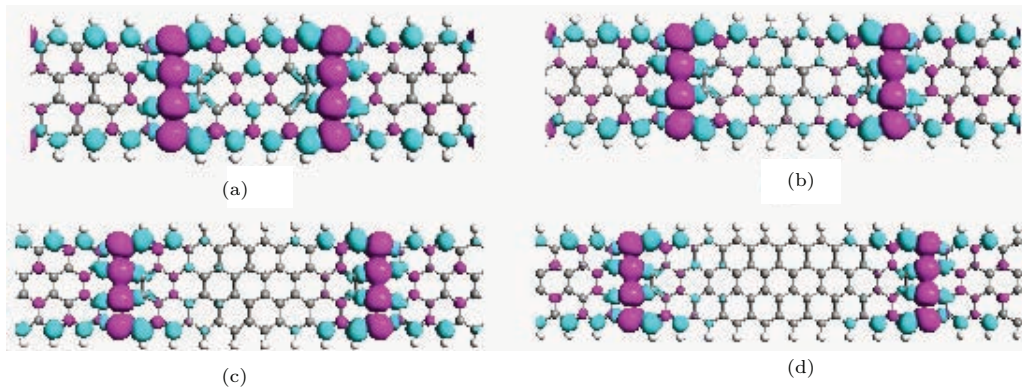


图 2 (网刊彩色) M1—M4 的自旋极化密度
Fig. 2. (color online) Spin density for M1—M4.

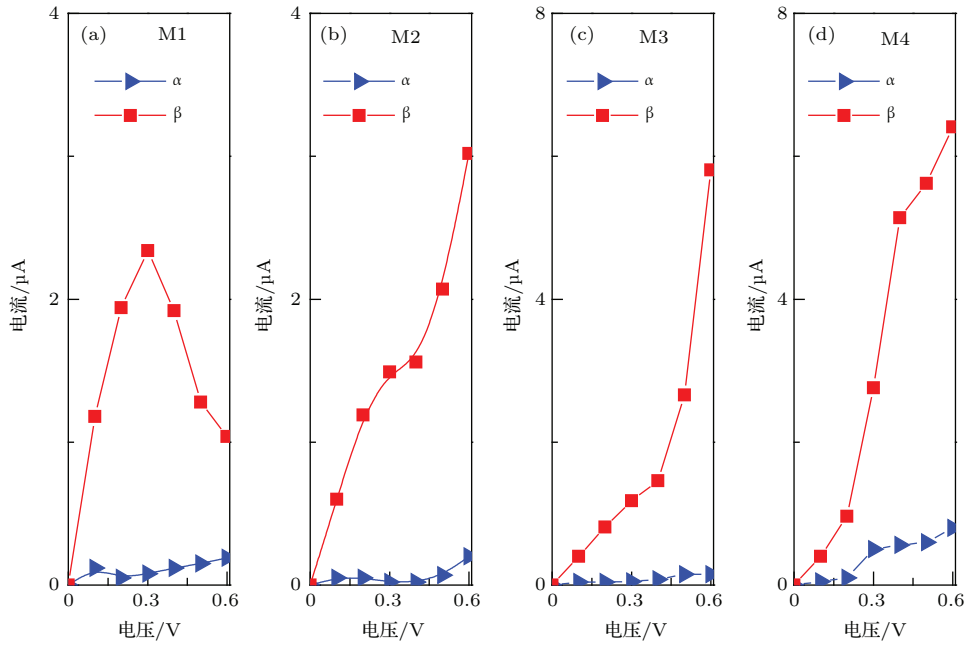


图3 (网刊彩色) M1—M4的自旋电流-电压曲线

Fig. 3. (color online) The spin I - V curve for M1–M4.

为了比较四种模型的电子输运性能, 我们计算了M1—M4在电压0—0.6 V间的自旋电流, 如图3(a)—(d)所示. 从图中可以看出, 在相同电压下, 每个模型的两种自旋方向的电流值存在较大的差异, β 自旋的电流随着电压的增大快速增加, 而 α 自旋电流却随电压的增大一直保持比较小的数值, 也就是说 β 自旋的电流远大于 α 自旋电流, 即表现出自旋过滤行为. 自旋过滤效率可用如下公式表示: $|(I_\alpha - I_\beta)/(I_\alpha + I_\beta)|$. 计算表明, 在偏压范围内, 器件的自旋过滤效率在80%到95%之间. 另外, M2—M4中, 无论是 α 自旋还是 β 自旋, 电流都随着电压的增大而增大; 而M1中, α 自旋和 β 自旋的电流先随电压的增大而增大, 当电压达到0.3 V后, 电流随着电压的增大而减小, 出现了负微分电阻现象.

图4是在0.2 V偏压下的透射谱, 根据自旋电流计算公式:

$$I_\sigma = (e/h) \int_{-V/2}^{V/2} T_\sigma(E, V) dE,$$

透射曲线与能量偏压窗围成的面积表示电流大小, 图中的能量偏压窗为 $[-0.1, 0.1]$ eV, 可以看出偏压窗内, 四种模型的 α 自旋的透射系数都保持特别小的值, 几乎为零; 而 β 自旋的共振透射峰位于偏压窗外, 但是偏压窗内的最大透射系数并不为零, 依次为0.29, 0.16, 0.18和0.44, 因而 β 自旋的电流值

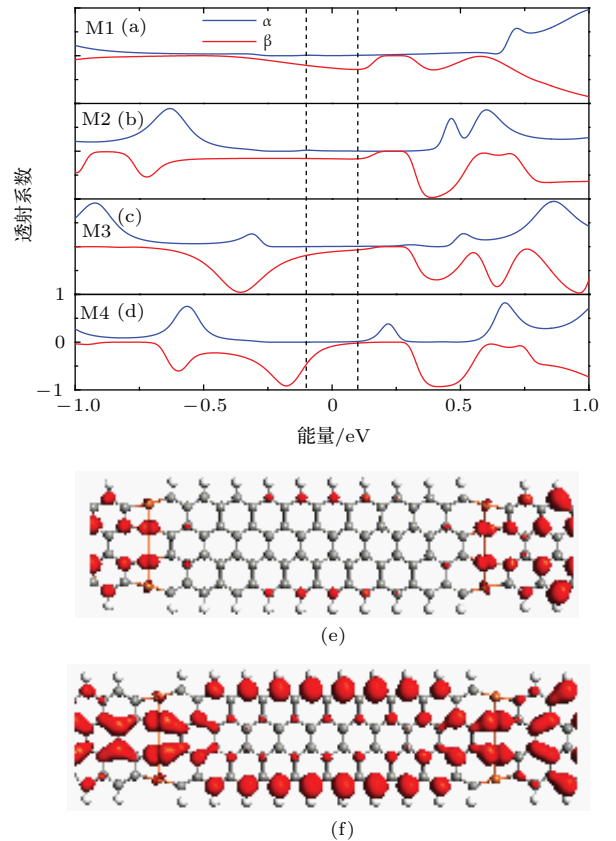


图4 (网刊彩色) (a)—(d) M1—M4在0.2 V偏压下的透射谱, 黑色虚线为能量偏压窗; (e)和(f) M4在费米能处的 α 和 β LDOS

Fig. 4. (color online) (a)–(d) Transmission spectrum for M1–M4 at 0.2 V bias, the region between two black dotted lines indicate the bias window; (e) and (f) the LDOS of α - and β -spin for M4 at E_F .

明显大于 α 自旋. 为了进一步解释透射谱, 以M4为例, 我们计算了0.2 V偏压下费米能处两种自旋的局域态密度(LDOS), 如图4(e)和图4(f)所示. 图(a)为 α 自旋态, 中心区几乎没有态密度的分布, 因此该能量处的电子透射很弱, 对应图4(d)中费米能处几乎为零的 α 自旋电子透射系数; 图4(b)为 β 自旋态, 态密度主要分布在纳米带的边缘, 铁原子和电极部分也有分布, 意味着费米能处的 β 自旋态电子的透射主要通过中心纳米带的边缘进行.

3.2 其他自旋构型下的运输特性

由于外磁场的方向也会影响电子的自旋输运, 我们以M1为例, 研究了不同磁性构型下的自旋输运, 如图5所示. 图5(a)给出了模型M1在FM, AP

和AFM态的电流-电压曲线, 其中FM是指整个器件的自旋设置为同一个方向, AP指器件左右部分的自旋方向设置为反平行, AFM为纳米带的上下两个边缘是反平行的. 图5(b)和图5(c)给出了模型M1在AP和AFM态下的自旋极化密度图, 可以看出铁原子与附近的碳原子的自旋总是反平行的. 从图5(a)可以看出, FM态中, β 自旋的电流随电压增加快速增大, AP态下, β 自旋的电流在0.2 V电压后才快速上升, 两个态下, α 自旋电流值都明显小于 β 自旋, 因此表现为自旋过滤效应; 而AFM态中, β 自旋的电流和 α 自旋的电流都比较小, 电流数值也比较接近, 因此不能产生自旋过滤效应.

为了更深入地理解图5(a), 我们给出0.4 V偏压下, M1在FM, AP和AFM下的透射谱和能带图, 能量偏压窗为 $[-0.2, 0.2]$ eV, 如图6(a)–(c)所示, 这些数据能够直观地展现模型M1的电子结构和量子输运行为. 对于FM态, 从图6(a)左边的电极能带的布洛赫态可以看出, π 能带具有关于 σ 平面的奇对称分布, 而 π^* 能带是具有关于 σ 平面的偶对称分布的, 两者之间是不能透射的^[30]. 在偏压窗内 $[-0.2, 0.2]$ eV, 左右电极的 β 自旋的 π 能带是有重叠的, β 自旋电子可以从左电极的 π 能带透射到右电极的 π 能带上, 然而, 尽管左右电极的 α 自旋的 π^* 能带也有重叠, 但是 α 自旋的电子透射却为零, 因为电子的透射还与分子的能级轨道相关. 对于AP体系, 从图6(b)可以看出, 在偏压窗内, 左右电极 β 自旋的 π^* 和 π 能带均有所重叠, 所以对于 β 自旋的电子, 可以从左电极的 π^* 和 π 能带透射到右电极的 π^* 和 π 能带上, 但是, 在偏压窗内, 左电极只有 α 自旋 π^* 能带, 而右电极是 α 自旋 π 能带, α 自旋的电子不能从左电极透射到右电极. 图6(c)中, 由于自旋构型为AFM态, α 自旋和 β 自旋的能带是简并的, 并且价带和导带之间有能隙存在. 在偏压窗内, 左电极和右电极之间的能带没有重叠, 因此, 电子无法从左电极透射到右电极, 这就是为什么低电压下电流为零的原因. 随着电压的增大, 左右电极的电势发生改变, 左电极和右电极之间的能带能够重叠, 电子也就能透射了.

对于图6(a)中费米能处的 α 自旋情况, 表1给出了0.4 V偏压下, M1在FM态下费米能附近的4条 α 和 β 自旋轨道分布, 对于 α 自旋, -0.18405 eV轨道分布较均匀, 我们称之为离域, 有利于电子的

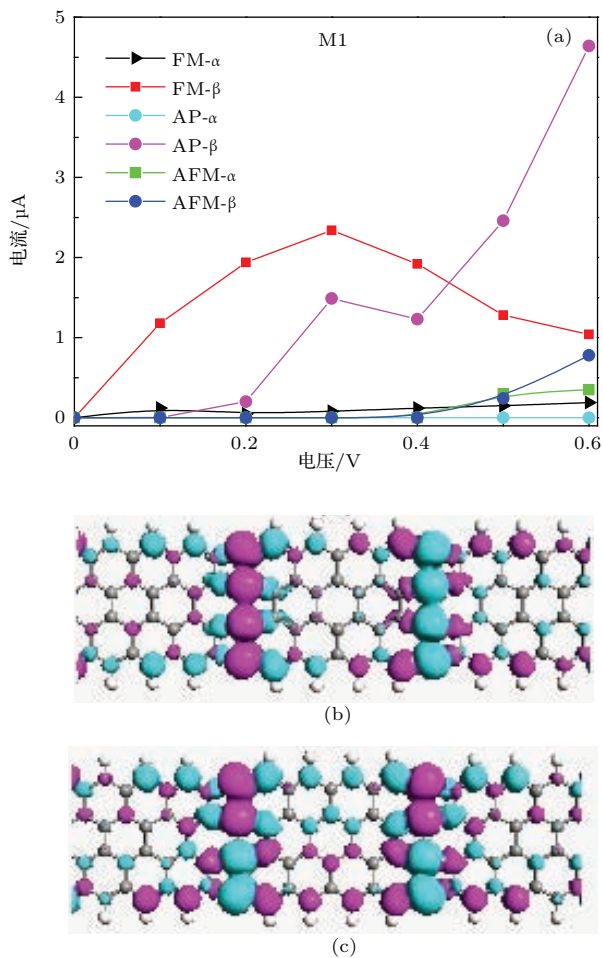


图5 (网刊彩色) (a) M1在FM, AP和AFM态的自旋电流-电压曲线; (b), (c) M1在AP和AFM态下的自旋极化密度图

Fig. 5. (color online) (a) The spin I - V curve for M1 at FM, AP, and AFM state; (b), (c) spin density for M1 at AP, and AFM state.

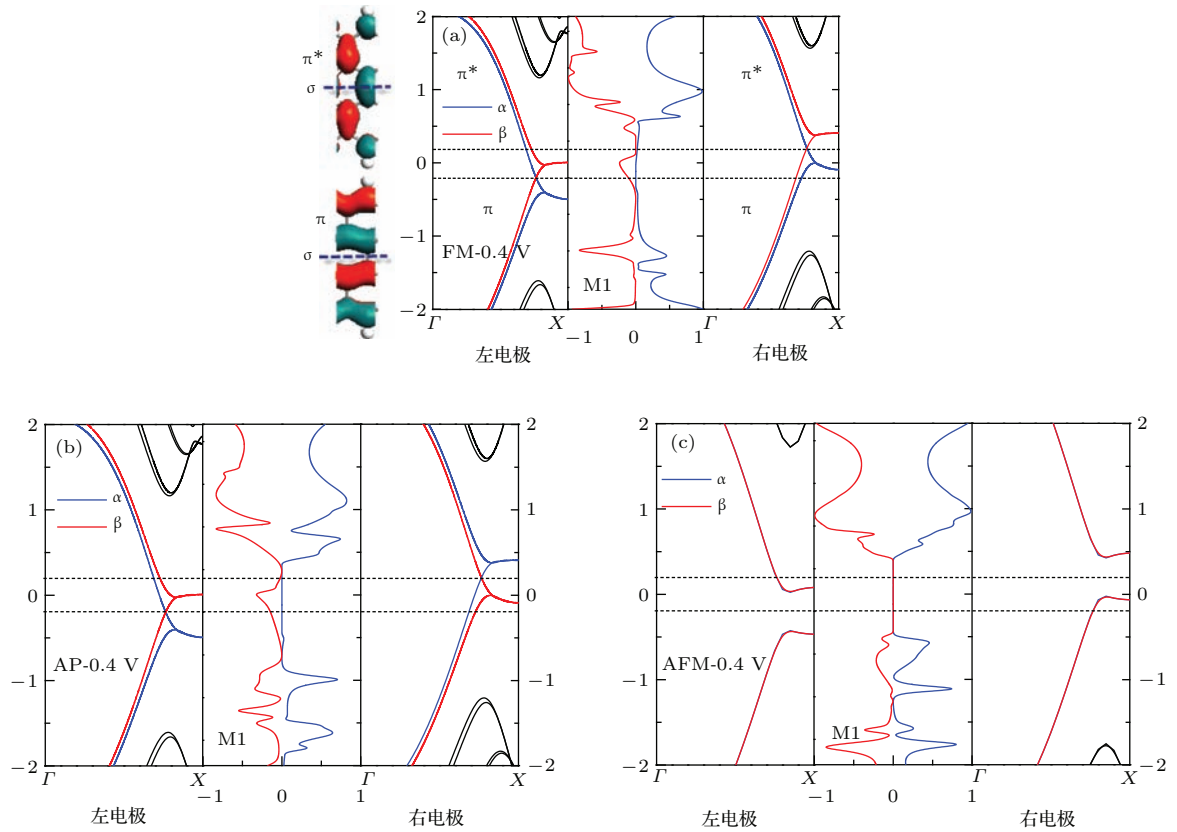
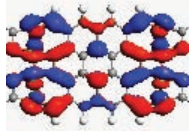
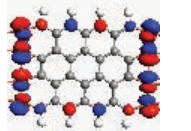
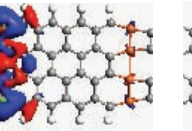
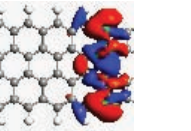
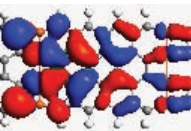
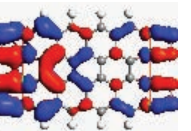
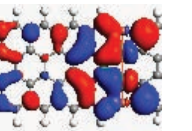
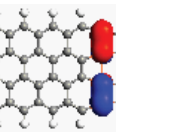


图6 (网刊彩色) (a)–(c) 为 0.4 V 偏压下, M1 在 FM, AP 和 AFM 下的透射谱和能带图

Fig. 6. (color online) (a)–(c) Band structure for the left electrode, transmission spectrum, and band structure for the right electrode for M1 at 0.4 V at FM, AP, and AFM state; the region between two black dotted lines indicate the bias window.

表1 (网刊彩色) 0.4 V 偏压下, M1 在 FM 态下费米能附近的分子轨道分布
Table 1. (color online) The MPSH for M1 at 0.4 V near the Fermi energy.

MPSH	1	2	3	4
α 能级	 -0.18405 eV	 -0.08346 eV	 0.08459 eV	 0.17672 eV
β 能级	 -0.1278 eV	 -0.0908 eV	 0.0188 eV	 0.1613 eV

透射, -0.08346 eV 轨道主要分布在铁原子和纳米带的边缘部分, 这个能量处的电子透射主要由纳米带的边缘进行; 但是由于第 1 和 2 号轨道所在的能量处左右电极的能带不匹配, 因此电子无法透射. 尽管在 0 到 0.2 eV 能量范围内, 左电极和右电极的 α 自旋 π^* 能带有重叠, 但是从轨道分布来看, 0.08459 eV 和 0.17672 eV 两个轨道都非常局域, 能

量为 0.08459 eV 的轨道局域在中心区的左端, 而能量为 0.17672 eV 的轨道则局域在中心区的右端, 这两个轨道的局域都使得电子无法透射. 对于 β 自旋, -0.1278 eV, -0.0908 eV 和 0.0188 eV 这三个轨道分布较均匀, 这些离域的轨道有利于电子传输, 从而在费米能附近的偏压窗内有较高的电子透射谱, 如图 6 (a) 所示. 然而 0.1613 eV 能量的轨道局域在

右端的铁原子上,使得该能量处的电子无法透射,同时, β 自旋电子不可以从左电极的 π^* 能带透射到右电极的 π 能带上,因此对应此能量处的透射谱为零.

3.3 不同带宽下的输运特性

由于锯齿形石墨烯纳米带的电子输运能力与带宽是相关的,宽度为偶数的石墨烯纳米带两个带边缘关于 σ 平面对称,如图6(a)所示,因此电子输运会受到限制,纳米器件的电流远小于宽度为奇数的石墨烯纳米带^[28].为此,本文也探讨了带宽分别为5和6的纳米器件的自旋输运性能,对应于中心散射区的长度为 $N=6$ 个石墨烯单胞的长度.为了方便,对应的纳米器件为M5和M6.我们计算了FM态下M5和M6在电压0—0.6 V的自旋电流,如图7所示.从图中可以看出,在相同电压下,M5和M6的两种自旋方向的电流值也存在较大的差异, β 自旋的电流随着电压的增大快速增加,而 α 自旋电流却随电压的增大一直保持比较小的数值,也就是说 β 自旋的电流远大于 α 自旋电流,即表现出自旋过滤行为.同时,相比于M2和M6(带宽为偶数),M5(带宽为奇数)的自旋电流值明显大一些.

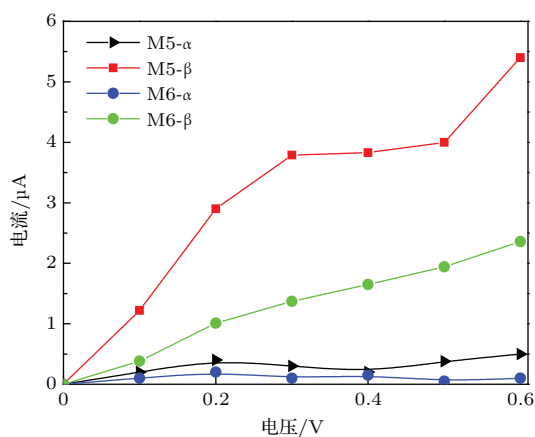


图7 (网刊彩色) M5和M6在FM态的自旋电流-电压曲线
Fig. 7. (color online) The spin I - V curve for M5 and M6 at FM state.

4 结 论

利用基于密度泛函理论的第一性原理方法,对锯齿形石墨烯纳米带进行铁掺杂,发现在FM和AP自旋构型下, β 自旋的电流远大于 α 自旋的电流,在AFM态中, β 自旋电流与 α 自旋电流都很小且数值接近.因此铁掺杂的石墨烯在FM态和AP态中可以产生自旋过滤效应,在AFM态下无法产

生自旋过滤效应,对于不同带宽的ZGNR(带宽为奇数和偶数),纳米器件的自旋过滤行为依然存在.

参考文献

- [1] Zeng J, Chen K 2013 *J. Mater. Chem. C* **1** 4014
- [2] Shayeganfar F 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 12681
- [3] Duong D L, Lee S Y, Kim S K, Lee Y H 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 243104
- [4] An Y, Wang K, Yang Z, Liu Z, Jia G, Jiao Z, Wang T, Xu G 2015 *Org. Electron* **17** 262
- [5] Masum Habib K M, Zahid F, Lake R K 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 192112
- [6] Deng X Q, Zhang Z H, Tang G P, Fan Z Q, Yang C H 2014 *Carbon* **66** 646
- [7] Soudi A, Aivazian, G, Shi S F, Xu X D, Gu Y 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 033115
- [8] An Y P, Yang Z Q 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 192102
- [9] Deng X Q, Zhang Z H, Tang G P, Fan Z Q, Zhu H L, Yang C H 2014 *Sci. Rep.* **4** 4038
- [10] Fan Z Q, Zhang Z H, Deng X Q, Tang G P, Yang C H, Sun L, Zhu H L 2016 *Carbon* **98** 179
- [11] Zhu Z, Zhang Z H, Wang D, Deng X Q, Fan Z Q, Tang G P 2015 *J. Mater. Chem. C* **3** 9657
- [12] Zheng J M, Guo P, Ren Z, Jiang Z, Bai J, Zhang Z 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 083101
- [13] Zeng J, Chen K Q, He J, Fan Z Q, Zhang X J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 124502
- [14] Kan E, Li Z Y, Yang J L, Hou J G 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 4224
- [15] Kang J, Wu F M, Li J B 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 083109
- [16] Dai Q Q, Zhu Y F, Jiang Q 2013 *J. Phys. Chem. C* **117** 4791
- [17] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Nature* **444** 347
- [18] Wang Z, Hu H, Zeng H 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 243110
- [19] Cao C, Chen L N, Long M Q, Huang W R, Xu H 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 113708
- [20] Impeng S, Khngpracha P, Warakulwit C, Jansang B, Sirijaraensre J, Ehara M, Limtrakul J 2014 *RSC Adv.* **4** 12572
- [21] Wang Y, Cao C, Cheng H P 2010 *Phys. Rev. B* **82** 205429
- [22] Deng X Q, Zhang Z H, Tang G P, Fan Z Q, Qiu M 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 063107
- [23] Deng X Q, Tang G P, Guo C 2012 *Phys. Lett. A* **376** 1839
- [24] Zhang G P, Qin Z J 2011 *Chem. Phys. Lett.* **516** 225
- [25] Hu S J, Du W, Zhang G P, Gao M, Lu Z Y, Wang X Q 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 057201
- [26] Landauer R 1970 *Philos. Mag.* **21** 863
- [27] Büttiker M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1761
- [28] Yu Z L, Wang D, Zhu Z, Zhang Z H 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 24020
- [29] Deng X Q, Zhang Z H, Tang G P, Fan Z Q, Yang C H, Sun L 2015 *Carbon* **94** 317
- [30] Li Z Y, Qian H Y, Wu J, Gu B L, Duan W H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 206802

Spin transport properties for iron-doped zigzag-graphene nanoribbons interface*

Deng Xiao-Qing[†] Sun Lin Li Chun-Xian

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

(Received 20 October 2015; revised manuscript received 31 December 2015)

Abstract

By using the first-principles method based on the density-functional theory, the spin transport properties for the systems consisting of iron-doped zigzag-edged graphene nanoribbons (ZGNRs) with iron doping at the interface, where the connection is realized between electrodes and the central scattering region, are investigated theoretically. The ribbon widths of ZGNRs are four zigzag C chains (4 ZGNRs), and the length of scattering region is N unit cells (here, $N = 4, 6, 8, 10$). Results show that β -spin current is obviously greater than the α -spin current under the ferromagnetic (FM) configuration, which is the spin filtering effect. The reason of spin filtering effect comes from two aspects: a) The symmetry-dependent transport properties which arise from different coupling rules between the π and π^* subbands around the Fermi level, that are dependent on the wave-function symmetry of the two subbands; b) the distribution of molecular orbit within the bias windows, location, or delocalization. While for antiferromagnetic (AFM) spin state, both α and β spin currents are very small and both the positive and negative bias regions originate from the existence of band gap; therefore, no obvious spin filtering effect can be obtained. For antiparallel (AP) magnetism configuration, spin filtering effect also can be obtained at high bias. Next, we also investigate the other models: the ribbon width of ZGNRs is five (six) zigzag C chains, namely, 5 ZGNRs (6 ZGNRs), and the scattering region is 6 unit cells length. The currents in 6 ZGNRs are less than that of 5 ZGNRs obviously, and this difference is revealed to arise from different couplings between the conducting subbands around the Fermi level, which is dependent on the symmetry of the systems. However, both of the two models show the similar characteristic: spin filtering effect. The β spin current is obviously greater than the α -spin current with the whole bias under the ferromagnetic (FM) configuration. The analysis on the electronic structure, transmission spectra, the molecular projected self-consistent Hamiltonian (MPSH) which have been modified by the electrodes, local density (LDOS) and the spin density give an insight into the observed results for the systems. These results indicate that the iron doping at interface between electrodes and central scattering region for ZGNRs can modulate effectively the spin electrons. It is of important significance for developing high spin polarization filtering device based on GNRs.

Keywords: graphene nanoribbons, spin transport, spin filter effect, first-principles method

PACS: 85.75.-d, 81.05.ue, 31.15.E-

DOI: 10.7498/aps.65.068503

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61371065, 61201080), the Hunan Provincial Natural Science Foundation, China (Grant No. 2015JJ3002), the Construct Program of the Key Discipline in Hunan Province, the Aid Program for Science and Technology Innovative Research Team in Higher Educational Institutions of Hunan Province, and the Scientific Research Innovation Fund for Postgraduate of Changsha University of Science and Technology.

[†] Corresponding author. E-mail: xq_deng@163.com