

硼或氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运性质*

梁锦涛 颜晓红 张影 肖杨†

(南京航空航天大学应用物理系, 南京 210016)

(2018年9月23日收到; 2018年11月28日收到修改稿)

基于非共线磁序密度泛函/非平衡格林函数方法, 研究了硼或氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子透射系数. 未掺杂的石墨烯纳米带的计算结果表明磁化分布主要遵循类似于 Neel 磁畴壁的螺旋式磁化分布. 相比于未掺杂的情况, 硼/氮掺杂的石墨烯纳米带的磁化分布出现了双区域的特征, 即杂质原子附近的磁化较小, 杂质原子左(右)侧区域的磁化分布更接近于左(右)电极的磁化方向, 这为通过掺杂手段在石墨烯纳米带边缘上构建不同磁畴壁提供了可能性. 与未掺杂的透射系数不同的是, 硼/氮掺杂的石墨烯纳米带的透射系数在费米面附近随着磁化偏转角增大而减小, 表明非共线磁序引起的自旋翻转散射占据主导地位. 而在 $E = \pm 0.65$ eV 处, 出现了一个较宽的 dip 结构, 投影电子态密度的分析表明其来源于杂质原子形成的束缚态所引起的背散射. 我们的研究结果对于理解石墨烯纳米带中的非共线磁序与杂质散射以及器件设计具有一定的意义.

关键词: 石墨烯纳米带, 电子输运, 密度泛函, 非平衡格林函数

PACS: 71.15.Mb, 73.63.-b, 73.22.Pr

DOI: 10.7498/aps.68.20181754

1 引言

由于边缘电子态的存在^[1-8], 锯齿型石墨烯纳米带展示出不同于其他三维材料的电子结构和器件应用^[9-13]. 在众多优异物理性能中, 最令人期待的当属自旋电子输运^[14-20]. 早期, Fujita 等^[21]研究了锯齿型与扶手椅型石墨烯纳米带的能带结构, 预测了锯齿型石墨烯纳米带具有线性色散的边缘电子态, 并发现这一边缘态是具有磁性的. 这一研究对于后来石墨烯纳米带的自旋电子学研究具有指导意义. 在实验领域, 一个较为著名的实验来自于 van Wees 研究组, 他们采用非局域测量的方式测量了石墨烯纳米带的自旋极化输运性质, 并获得了微米级别的自旋相干长度, 表明石墨烯纳米带具有潜在的自旋电子学的应用前景^[22]. 此外, 段文晖研

究组采用密度泛函/非平衡格林函数方法计算了锯齿型石墨烯纳米带的电子结构和电子输运性能, 发现电子输运性质依赖于体系的结构对称性^[23]. Ozaki 研究组进一步研究了锯齿型石墨烯纳米带的自旋电导, 发现锯齿型石墨烯纳米带的电导与其宽度、电压和自旋属性密切相关^[24].

目前, 锯齿型石墨烯纳米带的自旋输运研究大多基于共线磁序, 也就是说, 自旋向上和自旋向下两个通道是独立的, 没有耦合在一起^[25-30]. 但是, 由于某些原因, 如交换作用竞争、自旋轨道耦合作用等, 自旋向上和自旋向下的电子态可以耦合在一起, 形成非共线磁序. 在锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序研究领域, Yazyev 等^[31]研究了锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序的稳定性, 预测了石墨烯纳米带的交换常数和自旋波频率. 更进一步, 张影

* 中央高校基本科研业务费(批准号: NS2017055)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fryxiao@nuaa.edu.cn

等^[32]研究了锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运性能,探讨了左右电极磁化在不同角度下的磁化分布与电子透射系数.这些研究结果对于设计基于锯齿型石墨烯纳米带的自旋电子器件具有一定的意义.但是,器件的模拟和设计还必须考虑到实验测量和材料制备中的现实问题,如材料中的杂质与缺陷^[33–35].一个较为直接的问题是:如果某个碳原子被一个硼或者氮原子取代,那么锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运会有着怎样的改变?针对这一问题,我们通过第一性原理方法计算了硼/氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子透射系数,揭示了掺杂对于非共线磁序和电子输运的影响,为锯齿型石墨烯纳米带的自旋器件的设计提供了更多的理论素材.

2 计算方法与结构模型

本文采用的计算方法是密度泛函/非平衡格林函数方法,计算模块是 OpenMX 软件包^[36].这一方法包含两个部分:密度泛函方法和非平衡格林函数方法.其中,密度泛函方法是基于数值原子轨道的线性展开法.为了展开波函数,我们采用数值原子轨道: C5.0-s2p1, H5.0-s2, N6.0-s2p1, B8.0-s2p1.这里的 5.0, 6.0, 8.0 代表原子轨道的截断半径(原子单位), s2p1 代表利用的 s 和 p 轨道的数目.在做两类计算时需要设置截断能,一类是计算交换关联势时的实空间积分,另一类是计算 Hartree 势.截断能一般通过测试获得,也就是通过计算不同截断能下的系统总能量,获得收敛时的截断能.这里,我们获得的截断能为 160 Ry (里德伯单位).由于要计算费米分布函数,因此需要设置电子温度.这里,我们选取电子温度为 300 K.

在计算电子输运之前,通过结构弛豫获得了掺杂石墨烯纳米带的稳定原子结构.电子输运的计算过程分为三个部分:首先,通过常规密度泛函方法计算得到左右电极的哈密顿量,以此获得电极的自能.然后,通过密度泛函方法计算得到中心区的哈密顿量,采用非平衡格林函数方法计算得到中心区的格林函数、密度矩阵和电荷密度,再用电荷密度计算得到新的哈密顿量,不断循环迭代以获得自洽收敛.最后,采用自洽后的哈密顿量和格林函数并结合 Landauer 公式来计算得到电子透射系数.

模拟结构包含三部分:左电极、中心区、右电极.其中,左右电极是石墨烯纳米带,中心区是硼/氮掺杂的石墨烯纳米带(图 1).为了获得较好的收

敛性能,增加了一些缓冲层来提高自洽效率.在图 1 中, z 轴给出了石墨烯纳米带的宽度, y 轴给出了石墨烯纳米带的长度,也就是中心区的长度.沿 z 轴方向,石墨烯纳米带的初基胞包含 16 个碳原子^[32].沿 y 轴方向,石墨烯纳米带的长度用 L_y 表示,且 $L_y = (N-1)a$, $a = 1.73a_{c-c}$, a_{c-c} 代表最近两个碳原子之间的距离, N 代表边缘上碳原子的数目(在本文中, $N = 17$).在掺杂时,将边缘上的一个碳原子用硼或氮原子来取代.所有的边缘碳原子都用氢原子饱和了.

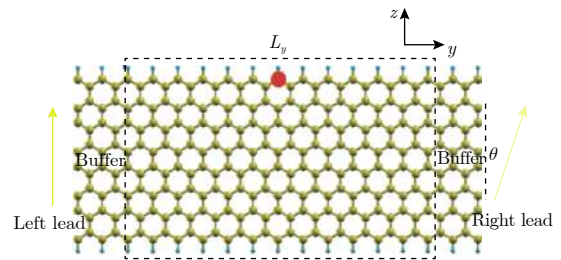


图 1 掺杂石墨烯纳米带的结构示意图,其结构由左右电极、中心区组成,左右电极磁化之间的偏转角由 θ 定义,中心区宽度由 L_y 给出,buffer 是为了计算收敛加入的缓冲层,红色小球代表掺杂原子

Fig. 1. Schematic diagram of doped ZGNR which consists of left, right leads and central region. The relative angle between two lead magnetizations is defined by θ . The length of central region is defined by L_y . The buffer regions are introduced for the consideration of convergence. The dopant atom is denoted by red sphere.

为了表示非共线磁序,设置左电极的磁化方向为 z 轴,右电极的磁化方向由偏转角 θ 来描述(图 1).在自洽过程中,左右电极的磁化大小和方向保持固定,而中心区的每一个原子的磁矩大小和方向可以自由地弛豫.在自洽计算中,初始磁化分布设置成螺旋式的磁化分布:沿着输运方向,相邻两个碳原子的磁矩之间的夹角由 $\frac{\pi}{N-1}$ 决定,与 Neel 磁畴壁的磁化分布类似^[32].计算结果表明,石墨烯纳米带的磁矩主要由边缘碳原子 ($0.25\mu_B$) 贡献,次边缘碳原子的磁矩 ($0.05\mu_B$) 较小,再向内部则更小.另外,锯齿型石墨烯纳米带的最低能量的磁化分布对应的是上边缘与下边缘的磁化反铁磁耦合.我们的计算表明,相比于本文考虑的上下边缘的铁磁耦合,锯齿型石墨烯纳米带(包含 36 个原子的原胞)的反铁磁耦合的总能量要低约 8 meV.在本文中,我们考虑的左右电极都是上下边缘的铁磁耦合,这主要是由于大多数磁隧道结中的电极都是铁磁体.为了获得上下边缘的铁磁耦合,可以通过在器件中施加外磁场的方法.

3 计算结果与讨论

掺杂石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运包含了两类效应: 非共线磁序和掺杂效应. 首先来探讨未掺杂石墨烯纳米带的结果, 以此来分析非共线磁序的影响. 图 2(a) 给出了左右电极磁化偏转角 $\theta = 0^\circ$ 时弛豫得到的磁化分布, 这一分布属于共线磁序, 所有磁化的方向都沿着 z 轴, 这一结果与其他研究者的计算结果是一致的^[32]. 当右电极磁

化方向逐渐偏离 z 轴时 (图 2(b)—(f)), 中心区变成了螺旋式排列的非共线磁序. θ 越大, 每一个磁化相对于 z 轴的偏转就越大. 如前所述, 左右电极磁化的大小和方向是保持固定的. 在这一边界条件下, 为了获得中心区磁化分布的最稳定的状态, 磁交换作用使得中心区右侧的磁化向右电极靠拢, 中心区左侧的磁化向左电极靠拢, 而中间的磁化介于二者之间, 这就使得螺旋式的磁化分布变成了较为有利的状态.

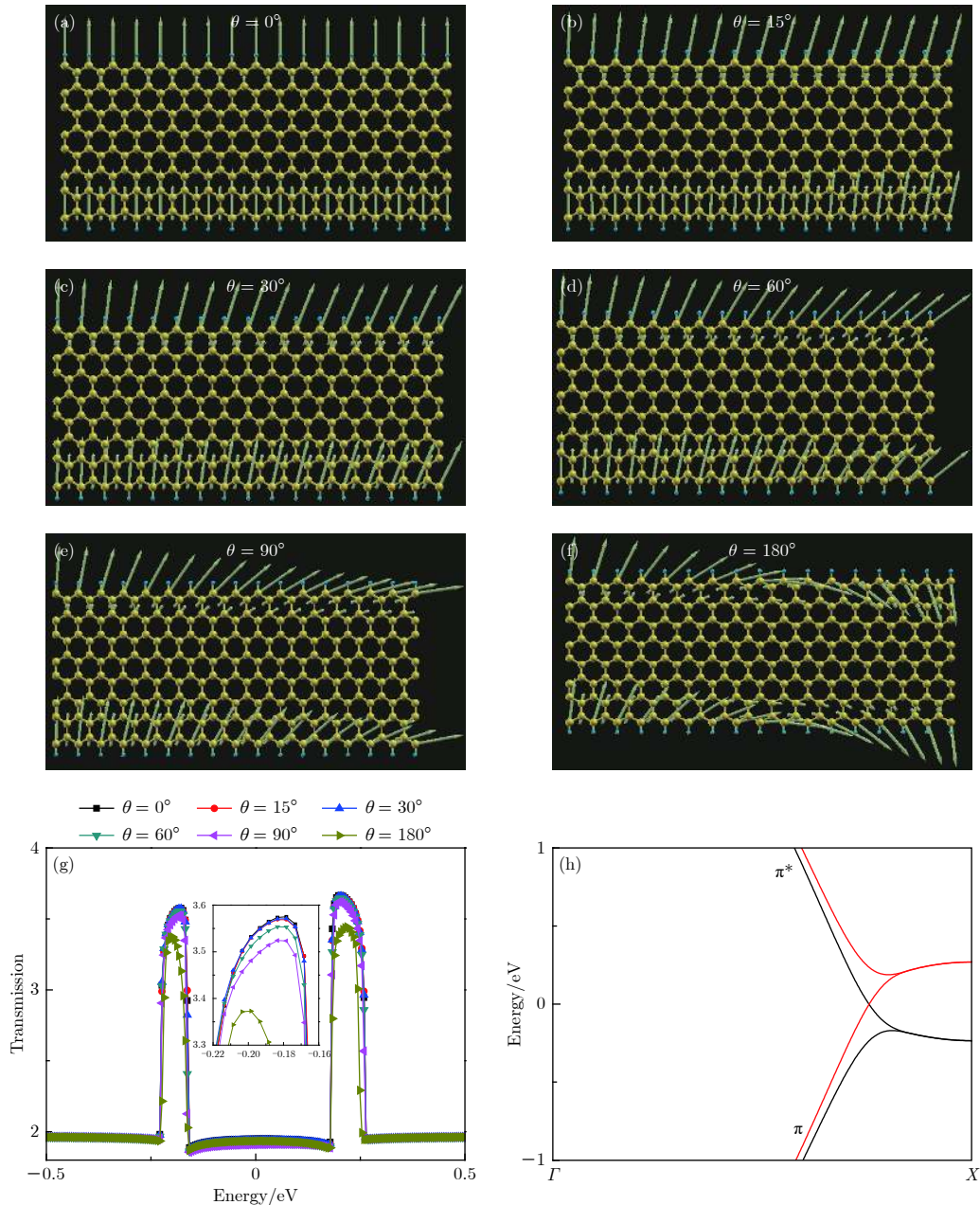


图 2 (a)—(f) 不同角度下的未掺杂石墨烯纳米带的磁化分布; (g) 透射系数; (h) 能带结构 (红色与黑色分别代表自旋向上和自旋向下)

Fig. 2. (a)—(f) Magnetization distribution; (g) transmission; (h) band structure of undoped ZGNR (red and black lines in (h) denote up-spin and down-spin).

图 2(g) 给出了几个不同角度下的透射系数 T . 当 $\theta = 0^\circ$ 时, 透射系数在能量位于 $(-0.22 \sim -0.17)$ eV 或 $(0.17 \sim 0.22)$ eV 时, 透射系数约为 4. 对于其他能量, 透射系数约为 2. 我们分析了锯齿型石墨烯纳米带的能带结构 (图 2(h)), 在上述能量范围内存在 4 个电子态, 而其他能量范围内仅有 2 个电子态. 显然, 这与我们对于完美的未掺杂系统的电子输运行为的理解是一致的, 也就是说, 某一能量处的透射系数完全由该能量处的电子态的数目来决定. 此外, 透射系数曲线存在两类不同的行为: 1) 在能量位于 $(-0.22 \sim -0.17)$ eV 或者 $(0.17 \sim 0.22)$ eV 内时, 透射系数随着左右电极磁化偏转角 θ 增大而逐渐减小, 数值拟合表明透射系数满足公式 $T \propto \cos \theta$; 2) 对于其他能量, 透射系数几乎保持不变. 为了解释这一问题^[32], 引入 Tersoff 和 Hamann^[37] 提出并由 Chantis 等^[38] 拓展到非共线磁序的电子隧穿理论. 按照这一理论, 当左右电极磁化方向为 θ 时, 透射系数^[32,38,39] 可以表示为

$$T \propto P(E) \cos \theta, \quad (1)$$

这里 $P(E)$ 为自旋极化率. 当能量位于 $(-0.22 \sim -0.17)$ eV 时, 在能带结构中 (图 2(h)), 存在一个

自旋向上和三个自旋向下的电子态, 所以, 自旋极化率 $P(E)$ 不等于零. 根据 (1) 式, 透射系数满足 $T \propto \cos \theta$ 的关系. 当能量为费米能时, 能带结构中只有一个自旋向上和一个自旋向下的电子态, 自旋极化率 $P(E) = 0$, 因此, 透射系数不随 θ 改变而改变. 这样, (1) 式就很好地解释了非共线磁序下透射系数与能量和偏转角 θ 之间的关系^[32].

接下来探讨边缘碳原子被一个硼或氮原子替换之后的磁化分布与电子输运性质. 图 3 给出了氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带在不同角度 θ 时的磁化分布. 当 $\theta = 0^\circ$ 时, 氮原子的掺杂使得干净石墨烯纳米带的铁磁序 (图 3(a)) 被打破. 对于靠近电极的边缘碳原子, 由于远离氮原子, 磁矩大小和方向没有明显的变化. 当逐渐向氮原子靠近时, 磁矩大小逐渐降低, 氮原子的磁矩最小. 这种掺杂引起的石墨烯纳米带的磁化抑制现象主要是来自于氮原子与碳原子的轨道杂化作用^[40], 这种轨道杂化能够有效地抑制杂质原子及其附近原子的磁矩. 为了反映这种轨道杂化作用的影响, 我们将电子态密度投影到边缘上的碳原子和氮原子上 (图 4). 由于锯齿型石墨烯纳米带在费米面附近的电子特征主要由边缘态来贡献, 因此仅考虑投影到边缘原子的态密

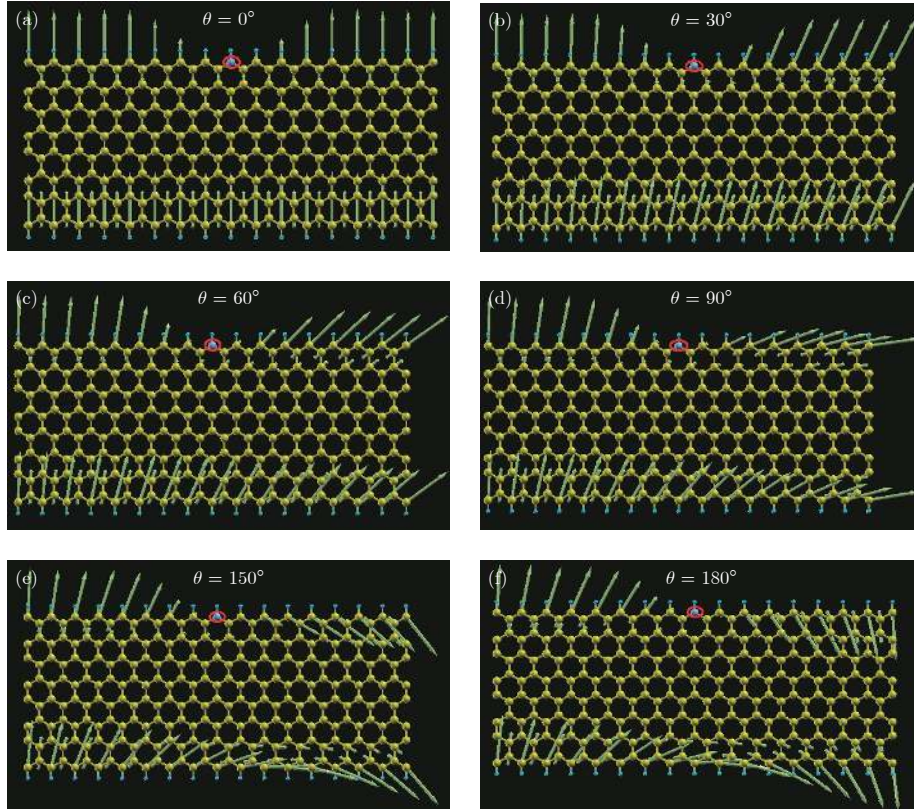


图 3 氮原子掺杂的石墨烯纳米带在不同角度下的磁化分布

Fig. 3. Magnetization distribution of N-doped ZGNR.

度. 选择三个有代表性的原子来进行态密度的分析, C1 代表上边缘最远离硼原子的碳原子, C8 代表上边缘最靠近氮原子的碳原子, B/N 代表掺杂硼/氮原子. 对于未掺杂的石墨烯纳米带 (图 4(a)), 三个位置上的投影态密度曲线几乎重合, 这与上边缘碳原子磁化的铁磁分布是一致的. 当存在氮原子掺杂时 (图 4(c)), 在远离掺杂原子的 C1 位置上, 电子态密度与未掺杂类似, 即存在两个由边缘态贡献的峰, 表明其受到掺杂原子的影响较小. 而在 C8 碳原子位置上, 由于靠近掺杂原子, 既可以看到边缘态贡献的峰, 也可以看到在 $E = -0.65$ eV 处形成的一个较宽的新峰. 这个新峰的位置与氮原子的投影态密度的峰位完全重合, 且幅度相同, 表明氮原子与附近碳原子形成了强的轨道杂化作用. 这一现象在硼原子掺杂时也可以看到 (图 4(b)), 只是新峰的位置位于 $E = +0.65$ eV 处.

当 θ 增大到 30° 时, 上边缘的磁化分布明显分为两个区域: 氮原子的左侧和右侧区域. 在左侧区域, 碳原子的磁化几乎与左电极磁化方向一致 (即 $\theta = 0$), 而右侧区域原子的磁化大多保持在右电极磁化方向上, 氮原子成为这两个区域的分界点. 当 θ 进一步增大时, 如 $60^\circ - 180^\circ$, 左侧区域的碳原子磁化稍微偏离左电极磁化方向, 但整个上边缘磁化分布的双区域的特征依然明显. 这种双区域特征是左右电极磁化与掺杂原子共同作用的结果. 由于氮

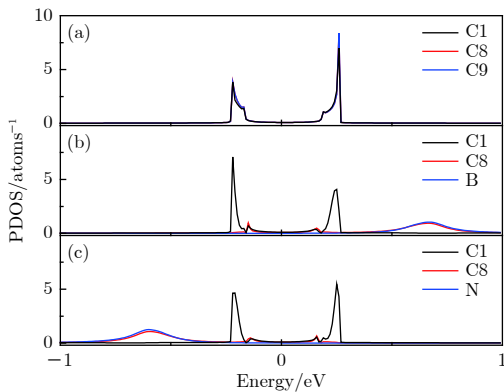


图 4 石墨烯纳米带投影到几个原子上的电子态密度 (a) 未掺杂; (b) 硼掺杂; (c) 氮掺杂. C1 代表中心区上边缘的最左边的碳原子, C8 代表掺杂原子左侧的最近邻碳原子, B/N 代表掺杂原子, C9 代表未掺杂时上边缘最中心的碳原子

Fig. 4. Projected density of states: (a) Undoped; (b) B-doped; (c) N-doped ZGNR. C1 denotes the leftmost carbon atom on the upper edge. C8 denotes the left nearest neighboring carbon atom of the dopant. B/N is boron/nitrogen atom. C9 denotes the central carbon atom in the upper edge of undoped ZGNR.

原子掺杂抑制了掺杂位置附近的磁化, 使得氮原子位置的磁化对附近碳原子磁化的交换作用减小, 螺旋式磁化分布开始从中心处崩塌. 左边区域原子靠近左电极, 由于左电极磁化的交换作用, 左边区域原子的磁化方向更倾向于左电极, 而右边区域原子磁化则更接近于右电极, 所以形成了这种双区域特征. 我们的测试计算表明, 当上边缘中心替换更多的掺杂原子使得掺杂区域扩大时, 这种双区域特征变得更加明显. 这一双区域特征对于在石墨烯纳米带边缘上进行掺杂以获得不同长度的磁畴壁来获得不同性能的纳电子器件具有一定的意义.

图 5 给出了硼原子掺杂的石墨烯纳米带在不同角度下的磁化分布, 和氮原子掺杂相比, 上述的双区域特征依然存在. 为了更为清晰地说明双区域特征, 我们在图 6 中给出了 $\theta = 30^\circ$ 时上边缘碳原子磁化大小与方向随着原子位置的变化关系. 首先, 对于磁化大小 (图 6(a)), 未掺杂的边缘碳原子的磁化大小基本不随原子位置变化而变化, 约为 $0.25\mu_B$. 当硼或氮原子掺杂时, 电极附近的碳原子磁化大小改变得并不明显, 但越靠近掺杂原子, 碳原子磁化越来越小, 这与图 3 和图 5 的结果是一致的. 另外, 可以看到, 硼掺杂和氮掺杂时边缘碳原子的磁化大小是相同的. 我们知道, 掺杂既可以改变轨道杂化, 也可以导致电荷转移. 这里, 由于轨道杂化导致磁矩降低, 这一因素是主导性的, 而电荷转移的方向对于磁化大小的影响并不明显. 对于磁化方向 (图 6(b)), 当没有硼/氮掺杂时, 可以看到磁化方向随着原子位置逐渐增大. 这里, 磁化方向是由磁化矢量与 z 轴之间的夹角 α 决定的. 在我们的自洽计算中, 初始磁化方向是通过公式 $\alpha = i \frac{\pi}{N-1}$ 来确定的, 也就是说磁化方向 α 与原子位置 i 呈线性关系. 但是, 图 6(b) 给出的弛豫结果却明显偏离线性关系, 这表明弛豫在自洽计算获得磁化方向时是极为重要的. 此外, 硼或氮掺杂后的磁化方向与未掺杂的结果明显不同, 存在明显的双区域特征. 对于氮掺杂的磁化分布, 可以看到右边区域 (原子位置为 1—8) 的磁化方向 (红色曲线) 与未掺杂的 (黑色曲线) 情况一致, 表明这一区域的磁化分布偏离右电极磁化方向, 更接近于螺旋式磁化分布. 与右边区域相反, 左边区域 (原子位置为 -8—-1) 的磁化分布与未掺杂的情况不同, 更接近于左电极的磁化方向. 此外, 对于硼掺杂的磁化分布 (蓝色曲线), 右边区域更加远离右电极磁化方向, 而左边区域原子的磁化方向几乎与左电极磁化一致 (α 接近于零). 从这些结果可以看到, 通过

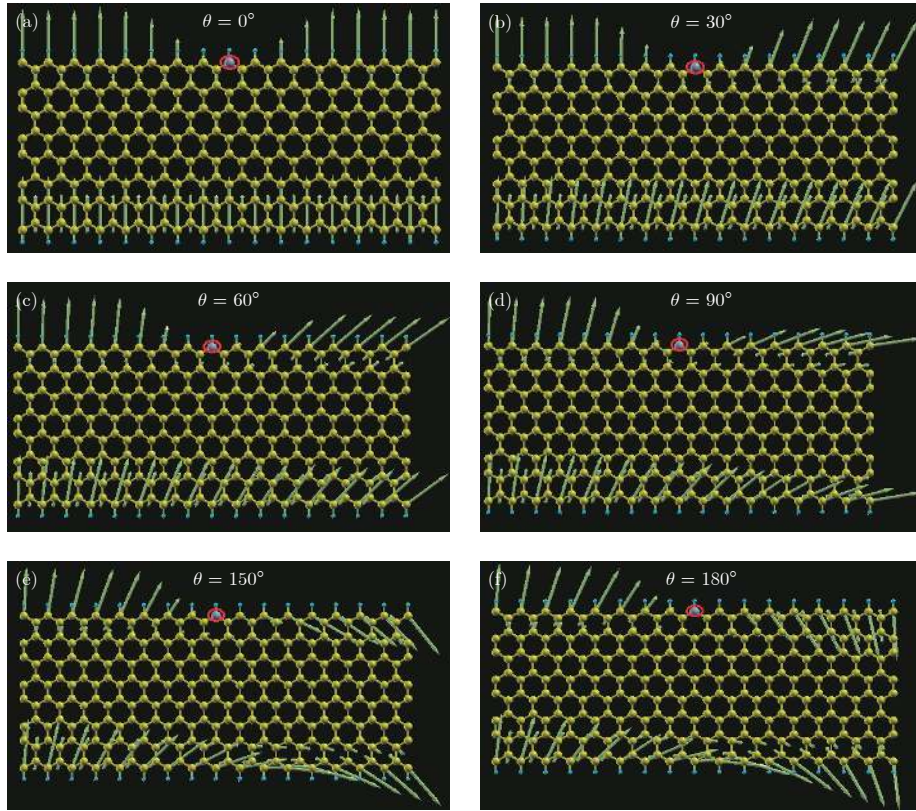


图 5 硼原子掺杂的石墨烯纳米带在不同角度下的磁化分布

Fig. 5. Magnetization distribution of B-doped ZGNR.

选择硼原子或者氮原子掺杂, 可以调制磁化分布的双区域特征, 这为设计基于石墨烯纳米带的自旋电子器件提供了理论素材.

图 7 给出了硼或氮原子掺杂的石墨烯纳米带的透射系数. 由于考虑的石墨烯纳米带包含了非共线磁序和掺杂, 因而电子输运将会受到这两类效应的影响. 第一类效应是非共线磁序效应, 即 (1) 式, 这一效应主要反映了当磁化方向非共线时的自旋翻转散射. 第二类效应是杂质所产生的束缚态, 这一束缚态对传导电子形成背散射, 降低透射系数. 对于氮掺杂的透射系数 (图 7(a)), 我们先与未掺杂的结果比较. 当 $\theta = 0^\circ$ 时, 相比于未掺杂的结果 (图 2(g)), 掺杂引起了 ± 0.2 eV 附近的透射系数的显著降低, 但在其他能量, 如费米面 ($E = 0$ eV) 处, 透射系数依然为 2, 与未掺杂的情况是相同的. 我们知道, ± 0.2 eV 附近的电子态对应于边缘电子态, 因而掺杂实际上是通过改变石墨烯纳米带的边缘原子结构, 从而影响边缘电子态及其透射系数. 我们再看不同磁化偏转角的情况, 当 θ 变化时, 透射系数的变化主要表现在两个区域, 一个区域是 $E = -0.65$ eV 附近, 另一个是费米面附近. 在第一个区域, 即 $E = -0.65$ eV 附近, 存在一个较宽

的 dip 且透射系数基本不随偏转角的变化而改变. 在另一个区域, 即费米面附近, 透射系数随着偏转角增大而逐渐减小. 这一特征表明: 在第一个区域中, 杂质散射效应占据主导地位, 引起透射系数降低的自旋翻转散射并不明显; 而在第二个区域, 自旋翻转散射效应更具优势, 杂质散射效应并不太突出. 为了解释这一现象, 我们在图 7(b) 中给出了投影在氮原子上和其他碳原子上的投影电子态密度. 通过与未掺杂石墨烯纳米带的比较, 可以看到碳原子的投影态密度主要由边缘电子态贡献, 而氮原子的投影态密度则主要由位于 $E = -0.65$ eV 附近的新峰来贡献, 这个新峰对应着氮原子贡献的束缚态, 束缚态的能量位置与透射系数中 dip 的位置一致, 表明图 7(a) 中的 dip 结构代表着氮原子束缚态引起的传导电子的强的背散射. 而在其他能量位置, 如费米面附近, 氮原子的束缚态贡献不大, 因此电子输运由自旋翻转散射来决定. 图 7(c) 给出了硼原子掺杂的石墨烯纳米带的透射系数, 其主要特征与氮原子掺杂的结果类似, 只是由于硼原子的电荷转移方向与氮原子相反, dip 结构出现在 $E = +0.65$ eV 处, 与图 7(d) 中给出的硼原子的束缚态的能量位置是一致的.

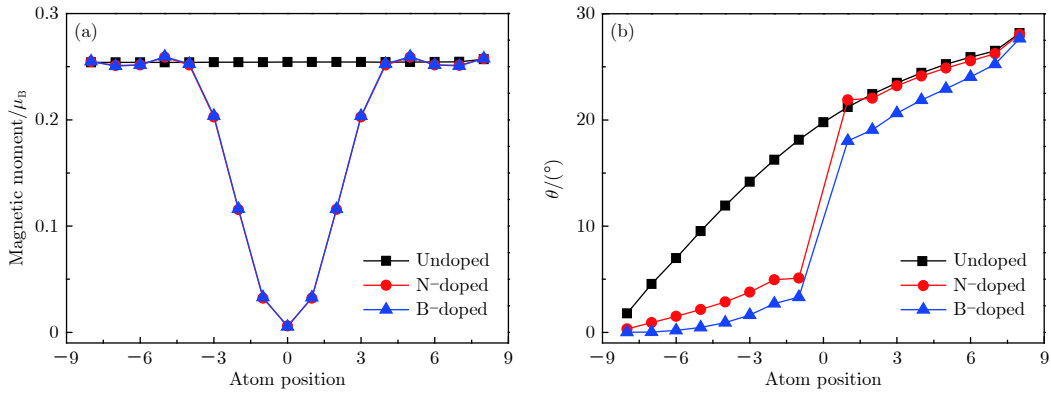


图 6 $\theta = 30^\circ$ 时未掺杂与硼/氮掺杂的石墨烯纳米带的上边缘碳原子的 (a) 磁矩大小和 (b) 方向与碳原子位置之间的关系
Fig. 6. (a) Size and (b) direction of magnetic moment of atoms in upper edge of ZGNR as function of atom position at $\theta = 30^\circ$.

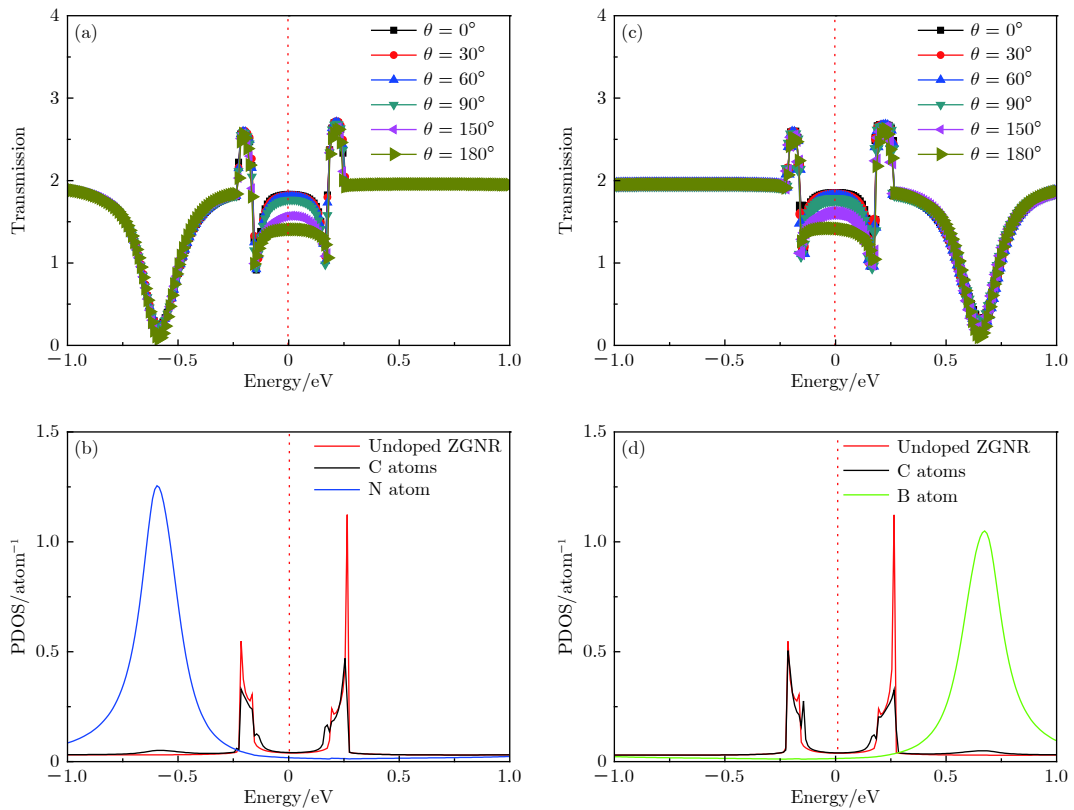


图 7 掺杂石墨烯纳米带的透射系数和投影态密度与能量之间的关系 (a), (b) 为氮掺杂; (c), (d) 为硼掺杂
Fig. 7. Transmission (top panel) and projected density of states (bottom panel) of doped ZGNRs as function of energy: (a), (b) N-doping; (c), (d) B-doping.

4 结 论

通过第一性原理计算研究了硼/氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运性质, 着重探讨了非共线磁序与透射系数在掺杂后的改变. 当没有掺杂时, 石墨烯纳米带的边缘原子磁化分布主要是螺旋式的. 但是, 在硼/氮掺杂之后, 螺旋式磁化分布被打破. 由于杂质原子与碳原子的轨道杂化, 杂质原子附近的磁化被极大地抑制. 当左右电

极磁化偏转角 θ 较小时, 由于左边区域靠近左电极, 左电极磁化的交换作用使得左边区域更靠近左电极, 而右边区域的磁化更靠近右电极. 这种双区域特征主要来源于杂质原子对磁化的抑制以及左右电极对磁化的拉拽. 对于透射系数, 在掺杂后的费米面附近, 边缘态电子的透射系数随着磁化偏转角逐渐降低, 表明在费米面处非共线磁序引起的自旋翻转散射比杂质散射更强. 然而, 掺杂后在费米面上下 0.65 eV 处, 透射系数表现出一个较宽的 dip

结构, 投影电子态密度的分析表明它主要来源于杂质原子形成的束缚态. 本文获得的磁化分布的双区域特征以及透射系数的特征对于设计基于石墨烯纳米带的自旋电子器件具有一定意义.

参考文献

- [1] Peng B, Zhang H, Shao H Z, Xu Y F, Ni G, Zhang R, Zhu H Y 2016 *Phys. Rev. B* **94** 245420
- [2] Wang W X, Zhou M, Li X Q, Li S Y, Wu X S, Duan W H, He L 2016 *Phys. Rev. B* **93** 241403
- [3] Cui P, Zhang Q, Zhu H B, Li X X, Wang W Y, Li Q X, Zeng C G, Zhang Z Y 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 026802
- [4] Pan J B, Du S X, Zhang Y Y, Pan L D, Zhang Y F, Gao H J, Pantelides S T 2015 *Phys. Rev. B* **92** 205429
- [5] Chen X B, Liu Y Z, Gu B L, Duan W H, Liu F 2014 *Phys. Rev. B* **90** 121403
- [6] Wang Z F, Jin S, Liu F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 096803
- [7] Yue Q, Chang S G, Tan J C, Qin S Q, Kang J, Li J B 2012 *Phys. Rev. B* **86** 235448
- [8] Hu X H, Zhang W, Sun L T, Krasheninnikov A V 2012 *Phys. Rev. B* **86** 195418
- [9] Hu T, Zhou J, Dong J M, Kawazoe Y 2012 *Phys. Rev. B* **86** 125420
- [10] Zheng X H, Wang X L, Huang L F, Hao H, Lan J, Zeng Z 2012 *Phys. Rev. B* **86** 081408
- [11] Zhou J, Hu T, Dong J M, Kawazoe Y 2012 *Phys. Rev. B* **86** 035434
- [12] Liu Y, Wang G, Huang Q S, Guo L W, Chen X L 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 225505
- [13] Cheng Y C, Wang H T, Zhu Z Y, Zhu Y H, Han Y, Zhang X X, Schwingenschlgl U 2012 *Phys. Rev. B* **85** 073406
- [14] Xiang H J, Huang B, Li Z Y, Wei S H, Yang J L, Gong X G 2012 *Phys. Rev. X* **2** 0111003
- [15] Zhang J C, Huang X P, Yue Y A, Wang J M, Wang X W 2011 *Phys. Rev. B* **84** 235416
- [16] Lin X Q, Ni J 2011 *Phys. Rev. B* **84** 075461
- [17] Li Y C, Chen X B, Zhou G, Duan W H, Kim Y, Kim M, Ihm J 2011 *Phys. Rev. B* **83** 195443
- [18] Li W, Sevinli H, Roche S, Cuniberti G 2011 *Phys. Rev. B* **83** 155416
- [19] Zhang Z H, Guo W L, Zeng X C 2010 *Phys. Rev. B* **82** 235423
- [20] Wang Z F, Li Q X, Zheng H X, Ren H, Su H B, Shi Q W, Chen J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 113406
- [21] Fujita M, Wakabayashi K, Nakada K, Kusakabe K 1996 *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** 1920
- [22] Tombros N, Jozsa C, Popinciuc M, Jonkman H T, van Wees B J 2007 *Nature* **448** 571
- [23] Huang B, Liu F, Wu J, Gu B L, Duan W H 2008 *Phys. Rev. B* **77** 153411
- [24] Ozaki T, Nishio K, Weng H M, Kino H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075422
- [25] Deng X Q, Sun L, Li C X 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 068503 (in Chinese) [邓小清, 孙琳, 李春先 2016 物理学报 **65** 068503]
- [26] 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]
- [27] Lin Q, Chen Y X, Wu J B, Kong Z M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 097103 (in Chinese) [林琦, 陈余行, 吴建宝, 孔宗敏 2011 物理学报 **60** 097103]
- [28] Li J, Zhang Z H, Wang C Z, Deng X Q, Fan Z Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 036103 (in Chinese) [李骏, 张振华, 王成志, 邓小清, 范志强 2013 物理学报 **62** 036103]
- [29] Hu X H, Xu J M, Su L T 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 047106 (in Chinese) [胡小会, 许俊敏, 孙立涛 2012 物理学报 **61** 047106]
- [30] 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]
- [31] Yazyev O V, Katsnelson M I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 047209
- [32] Zhang Y, Yan X H, Guo Y D, Xiao Y 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 174303
- [33] Li H D, Wang L, Lan Z H, Zheng Y S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 155429
- [34] Xu B, Yin J, Weng H G, Xia Y D, Wan X G, Liu Z G 2010 *Phys. Rev. B* **81** 205419
- [35] Wang B, Wang J, Guo H 2009 *Phys. Rev. B* **79** 165417
- [36] Ozaki T, Kino H 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045121
- [37] Tersoff J, Hamann D R 1985 *Phys. Rev. B* **31** 805
- [38] Chantis A N, Smith D L, Fransson J, Balatsky A V 2009 *Phys. Rev. B* **79** 165423
- [39] Slonczewski J C 1989 *Phys. Rev. B* **39** 6995
- [40] Press M R, Liu F, Khanna S N, Jena P 1989 *Phys. Rev. B* **40** 399

Non-collinear magnetism and electronic transport of boron or nitrogen doped zigzag graphene nanoribbon*

Liang Jin-Tao Yan Xiao-Hong Zhang Ying Xiao Yang[†]*(Department of Applied Physics, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)*

(Received 23 September 2018; revised manuscript received 28 November 2018)

Abstract

Zigzag graphene nanoribbon (ZGNR) is important for novel carbon-based spintronic applications. Currently, most of ZGNR spintronic studies focus on the collinear magnetism where the up-spin and down-spin are separated clearly. But in some cases, e.g. doping and adsorption, the magnetization profile can be modulated and thus noncollinear magnetism can occur. In order to shed light on possible noncollinear magnetism in ZGNR, we study non-collinear magnetism and electronic transport of boron or nitrogen-doped zigzag graphene nanoribbon based on noncollinear density functional theory and non-equilibrium Green's function method. For pristine ZGNR, our results show that the ZGNR presents helical magnetization distribution due to noncollinear magnetization in left and right lead. As the ZGNR is doped with boron and nitrogen atoms, the ZGNR shows a characteristic two-zone feature in the magnetization distribution. Near the dopant site, the magnetic moment of carbon atom is small. However, the magnetic moments of carbon atoms in the left (right) region of dopant are close to those of the left (right) lead. Such a feature provides the possibility of constructing domain walls with various widths on the edge of ZGNR. Moreover, the transmission at the Fermi level ($E = 0$ eV) decreases with the increase of relative angle between magnetizations of left and right lead, indicating that the spin-flip scattering dominates the electronic transport. However, at $E = \pm 0.65$ eV, there is a transmission dip with low transmission, which implies that the dopant induces the strong backscattering. To understand the origin of this dip, we calculate the density of states (DOS) and project the DOS onto each atom of doped ZGNR. The projected DOS shows a large and broad peak at $E = -0.65$ eV for N-doped ZGNR but at $E = +0.65$ eV for B-doped ZGNR. The consistency between the position of dip in transmission and the position of peak in DOS indicates that the transmission dip mentioned above is attributed to strong backscattering from the dopant-induced bound state. Our theoretical results are expected to be useful for understanding the noncollinear magnetism and spin scattering in the doped ZGNR-based devices. Also, our work provides a considerable insight into the design of ZGNR-based nanoelectronic devices, such as the transistor based on spin transfer torque effect.

Keywords: graphene nanoribbon, electronic transport, density functional, non-equilibrium Green's function**PACS:** 71.15.Mb, 73.63.-b, 73.22.Pr**DOI:** [10.7498/aps.68.20181754](https://doi.org/10.7498/aps.68.20181754)

* Project supported by the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. NS2017055).

† Corresponding author. E-mail: fryxiao@nuaa.edu.cn