

氮化硼纳米带功能化碳纳米管的热自旋输运性质

肖佳勇 谭兴毅 杨贝贝 任达华 左安友 傅华华

Thermal spin transport properties in a hybrid structure of single-walled carbon nanotubes and zigzag-edge boron nitride nanoribbons

Xiao Jia-Yong Tan Xing-Yi Yang Bei-Bei Ren Da-Hua Zuo An-You Fu Hua-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 057301 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20181968

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181968>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

低维纳米材料量子热输运与自旋热电性质——非平衡格林函数方法的应用

Quantum thermal transport and spin thermoelectrics in low-dimensional nano systems: application of nonequilibrium Green's function method

物理学报. 2015, 64(18): 186302 <https://doi.org/10.7498/aps.64.186302>

过渡金属掺杂的扶手椅型氮化硼纳米带的磁电子学特性及力-磁耦合效应

Magneto-electronic properties and mechano-magnetic coupling effects in transition metal-doped armchair boron nitride nanoribbons

物理学报. 2017, 66(23): 238501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.238501>

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): 68503 <https://doi.org/10.7498/aps.65.068503>

NiFe/Pt薄膜中角度相关的逆自旋霍尔效应

Angle dependent inverse spin Hall effect in NiFe/Pt thin film

物理学报. 2015, 64(24): 247202 <https://doi.org/10.7498/aps.64.247202>

双自旋过滤隧道结中的隧穿时间

Tunneling times in double spin-filter junctions

物理学报. 2016, 65(22): 227302 <https://doi.org/10.7498/aps.65.227302>

掺杂三角形硼氮片的锯齿型石墨烯纳米带的磁电子学性质

Magneto-electronic properties of zigzag graphene nanoribbons doped with triangular boron nitride segment

物理学报. 2017, 66(24): 246101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.246101>

氮化硼纳米带功能化碳纳米管的热自旋输运性质*

肖佳勇¹⁾ 谭兴毅^{1)†} 杨贝贝¹⁾ 任达华¹⁾ 左安友¹⁾ 傅华华²⁾

1) (湖北民族大学信息工程学院, 恩施 445000)

2) (华中科技大学物理学院, 武汉 430074)

(2018年11月5日收到; 2018年12月9日收到修改稿)

热自旋电子学器件结合了自旋电子学和热电子学各自的优点, 对人类可持续发展具有重要作用. 本文研究了锯齿形 BN 纳米带 (ZBNRs) 共价功能化碳纳米管 (SWCNT) 的电子结构, 发现 ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT 为磁性半金属, n ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT ($n = 2-8$) 为磁性金属; n ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT ($n = 1-8$) 为双极化铁磁半导体; 4ZBNRs-B-(4, 4)SWCNT 和 4ZBNRs-N-(4, 4)SWCNT 为磁性半金属, 4ZBNRs-B-(m , m)SWCNT ($m = 5-9$) 为磁性金属; 4ZBNRs-N-(m , m)SWCNT ($m = 5-9$) 为双极化铁磁半导体. 然后, 基于锯齿形 BN 纳米带共价功能化碳纳米管设计了新型热自旋电子学器件, 发现基于 ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT 的器件具有热自旋过滤效应; 而 8ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT 和 n ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT ($n = 1, 8$) 都存在自旋相关塞贝克效应. 这些发现表明 BN 纳米带功能化碳纳米管在热自旋电子学器件方面具有潜在的应用.

关键词: 热自旋电子学, 自旋相关塞贝克效应, 热自旋过滤效应

PACS: 73.22.-f, 71.15.Mb, 75.50.Dd, 85.75.-d

DOI: 10.7498/aps.68.20181968

1 引言

热自旋电子学即研究电子自旋的热响应的学科, 主要利用热能产生和控制自旋流, 在低能耗器件以及新型热电转换技术上具有广阔的应用前景, 因而备受关注. 该领域的里程碑式发现为自旋塞贝克效应 (SSE)^[1,2], 随后自旋塞贝克二极管 (SSD)^[3-5] 和负微分自旋塞贝克效应 (NDSSE)^[6-9] 的发现使其在实际应用方面成为可能. 最近, 从理论上预测了一些新的热自旋相关现象, 如自旋相关塞贝克效应 (SDSE)、自旋相关塞贝克二极管 (SDSD)^[10,11], 为热自旋电子学开辟了新的方向.

碳基材料被认为是用于制备热自旋电子学器件的理想材料^[12,13]. 最近几年, 相继报道了一些基于碳基纳米结构的热自旋电子学器件^[14-21]; Zeng 等^[15-17] 于 2011 年在外场磁化的锯齿型石墨

烯纳米带 (ZGNRs) 以及锯齿型纳米带异质结中均发现了 SSE; Ni 等^[18] 在锯齿型石墨烯纳米带异质结中不仅发现了完美的 SSE, 同时还发现了热致庞磁阻效应 (CMR); Li 等^[19] 在石墨烯为电极的分子结中发现了 SDSE; Liu 等^[20] 在不同边缘缺陷的锯齿状石墨烯纳米带中发现了 SDSE 和 SDSD; 本课题组在边缘氢化的扶手椅型石墨烯纳米带中也发现了 SDSE 和 SDSD^[21]. 然而, 由于石墨烯纳米带的机械性能弱, 在一个扭曲力或者面内压缩下很容易被扭曲, 从而限制了石墨烯纳米带的应用^[22]. 另一方面, 由石墨烯纳米带卷曲形成的单壁碳纳米管也显示了多种热自旋电子学性质. Zeng 等^[23] 在对部分氢化的单壁碳纳米管的自旋输运的研究中发现了 SSE, 并伴有明显的奇偶效应. 但是, 部分氢化的碳纳米管很难制备. 因此, 寻找一种稳定且容易制备的碳基热自旋电子学材料仍然是一个挑战. 幸运的是, 研究人员预测了一种石墨烯纳米带 (GNRs) 和碳纳米管 (SWCNT) 的复合结构, 即

* 国家自然科学基金 (批准号: 11864011) 和湖北省自然科学基金 (批准号: 2018CFB390) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tanxy@hbmy.edu.cn

(m, m) SWCNT/ n -ZGNR, 发现其具备稳定的结构且是一种拥有自旋的铁磁半导体^[24,25]. 与此同时, 已有人通过在铜箔上对功能化 SWCNTs 进行简单热处理而获得了一种石墨烯-纳米管复合结构^[26,27]. 本课题组亦研究了 $(6, 6)$ SWCNT/ n -ZGNR 复合结构的热自旋输运性质, 发现该结构在热自旋电子学器件中具有潜在的应用^[28]. 在碳基材料的启发下, 人们开始关注 h-BN 纳米片、BN 纳米管以及 BN 纳米带 (BNNRs). 比如, 边沿未饱和的 BNNRs 为磁性金属这一结论在实验和理论中均得到了证实^[29,30]. 由于锯齿型 BNNRs(n -ZBNNRs) 中, 边缘连接着 N 原子或 B 原子, 当边沿的 B 原子被 H 原子修饰时 (n -ZBNNRs-BH), 其表现出有趣的半金属性^[31–33]; 当边沿的 B 和 N 原子均被 H 原子修饰时 (n -ZBNNRs-1H1H) 转变为非磁性半导体. 既然 BN 纳米带具有上述有趣的性质, 那么如何利用 BN 纳米带调控碳基材料的电子结构是一个有意义的问题. 最近, 基于 BNNRs 和 GNRs 的复合结构被提出并成功制备^[34–43]. Du 等^[34] 发现扶手椅型 $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ SWNTs 是无隙半导体, 而锯齿型 $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ SWNTs 是窄禁带半导体. Zhu 等^[44] 研究了 BNNRs 和 GNRs 复合结构的热自旋输运性质, 发现了自旋塞贝克效应和 CMR 效应. 然而, 基于 BNNRs 和 SWNTs 的复合结构的热自旋电子器件的研究很少, 其热自旋输运性质还不明确. 本文利用非平衡态格林函数结合第一性原理的方法研究了 BN 纳米带功能化碳纳米管的电子结构, 发现 ZBNNRs-N-(6, 6)SWCNT 为磁性半金属 (N 原子与碳纳米管链接), n ZBNNRs-N-(6, 6)SWCNT 为磁性金属 (n 为 ZBNNRs 的宽度, $n = 2–8$); n ZBNNRs-B-(6, 6)SWCNT 为双极化半导体 (B 原子与碳纳米管链接, n 为 ZBNNRs 的宽度, $n = 1–8$). 然后, 基于 BN 纳米带功能化碳纳米管设计了新型热自旋电子学器件, 发现基于 ZBNNRs-N-(6, 6)SWCNT 的器件具有自旋过滤效应; 而 8 ZBNNRs-N-(6, 6)SWCNT 和 n ZBNNRs-B-(6, 6)SWCNT ($n = 1, 8$) 都存在自旋相关塞贝克效应. 这些发现表明 BN 纳米带功能化碳纳米管在热自旋电子学器件方面具有潜在的应用.

2 计算方法与模型

n ZBNNRs-B-(6, 6)SWCNT 的复合结构如图 1(a) 所示; n ZBNNRs-N-(6, 6)SWCNT 的复合结构如图 1(b) 所示. 为研究 BN 纳米带功能化碳纳米管的热自旋输运性质, 设计了一个简单的热自旋电子

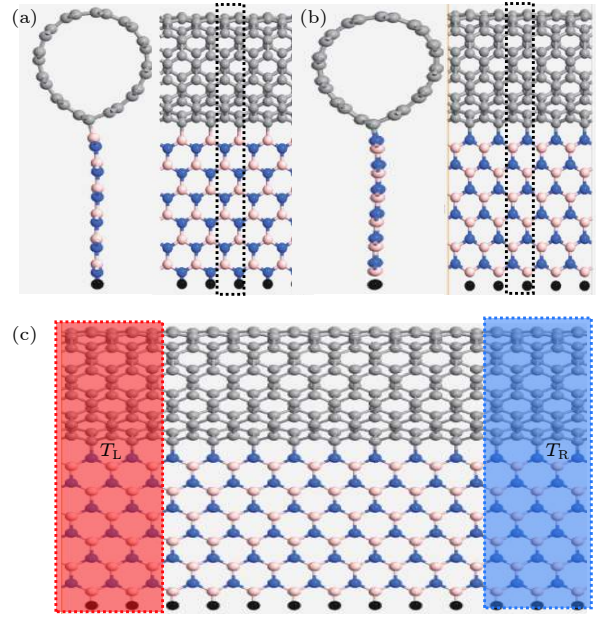


图 1 (a) n ZBNNRs-B-(6, 6)SWCNT 结构; (b) n ZBNNRs-N-(6, 6)SWCNT 结构; (c) 器件结构图; 图中灰色表示碳原子, 黑色表示氢原子, 蓝色表示氮原子, 棕色表示硼原子

Fig. 1. (a) Structure of n ZBNNRs-B-(6, 6)SWCNT; (b) the structure of n ZBNNRs-N-(6, 6)SWCNT; (c) the schematic illustration of the device. Gray, black, blue and brown balls indicate carbon, hydrogen, nitrogen and boron atoms, respectively.

学器件, 如图 1(c) 所示. 从左至右依次为源极、中心散射区、漏极, 且源极温度为 T_L , 漏极温度为 T_R , 两极之间的温差为 $\Delta T = T_L - T_R$.

计算过程中, 使用 ATK 软件包进行原胞优化和电子结构计算, 选取双数值极化基组, 截断能为 200 Ry. 芯电子选用规范守恒赝势来描述, 交换-关联函数选取 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 形式的广义梯度近似 (GGA). 器件的自旋相关电流可由下述方程得出:

$$I^{\uparrow(\downarrow)} = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ T^{\uparrow(\downarrow)}(E) [f_L(E, T_L) - f_R(E, T_R)] \right\} dE, \quad (1)$$

式中 e 为电子电荷; h 为普朗克常量; $T_{L(R)}$ 为左(右)电极的温度. $f_{L(R)}(E, T_{L(R)})$ 为左(右)电极的平均费米-狄拉克分布, 定义式如下:

$$f_{L(R)}(E, T_{L(R)}) = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{E - \mu_{L(R)}}{k_B T_{L(R)}} \right] \right\}^{-1}, \quad (2)$$

式中 $\mu_{L(R)}$ 为左(右)电极的化学势; $T^{\uparrow(\downarrow)}(E)$ 为自旋分量的输运系数, 其定义式为

$$T^{\uparrow(\downarrow)}(E) = \text{Tr} [I_L G^r I_R G^a], \quad (3)$$

式中 $G^{r(a)}$ 为推迟(超前)格林函数, $I_{L(R)}$ 为左

(右) 电极的耦合矩阵.

3 计算结果与讨论

3.1 电子结构

为研究 BN 纳米带宽度对石墨烯纳米管电子结构的影响, 给出 $n\text{ZGNR-N-(6, 6)SWCNT}$ 和 $n\text{ZGNR-B-(6, 6)SWCNT}$ 两种复合结构在不同宽度 (n) 下的能带结构, 分别如图 2 和图 3 所示. 图中实线表示自旋向上的能带, 虚线表示自旋向下的能带, 费米能级设置在零能级处. 显然, 导带电子自旋向下, 价带电子自旋向上. 从图 2 可以看出, 在 $n = 1-8$ 时 $n\text{ZGNR-N-(6, 6)SWCNT}$ 呈现出铁磁态. 当 $n = 1$ 时 (图 2(a)), 自旋向上电子具有半导体特征, 而自旋向下电子显示出金属特性, 故 $\text{ZGNR-N-(6, 6)SWCNT}$ 的电子态是半金属; 当 $n = 2-8$ 时 (图 2(b)-(h)), 自旋向上和自旋向下

通道均穿过了费米能级, 因此, $n\text{ZGNR-N-(6, 6)SWCNT}$ ($n = 2-8$) 均为金属性. 从图 3 可以看出, 在 $n = 1-8$ 时 $n\text{ZGNR-B-(6, 6)SWCNT}$ 自旋向上和自旋向下能带劈裂, 同样具有铁磁性; 而且其自旋向上和自旋向下通道均具有半导体特征, 即在费米能级附近均出现了一条禁带, 因此 $n\text{ZGNR-B-(6, 6)SWCNT}$ 为双极化铁磁半导体, 表明该结构在自旋半导体方面具有潜在的应用.

为研究纳米管半径对复合结构电子结构的影响, 给出 $4\text{ZGNR-B}(m, m)\text{SWCNT}$ 和 $4\text{ZGNR-N}(m, m)\text{SWCNT}$ ($m = 4-9$) 两种复合结构的能带结构, 如图 4 以及图 2(d), 图 3(d) 所示. 同样实线表示自旋向上的能带, 虚线表示自旋向下的能带, 费米能级设置在零能级处. 显然, 导带电子自旋向下, 价带电子自旋向上.

从图 4, 图 2(d) 和图 3(d) 可以看出, $m = 4-9$ 时, $4\text{ZGNR-B}(m, m)\text{SWCNT}$ 和 4ZGNR-N

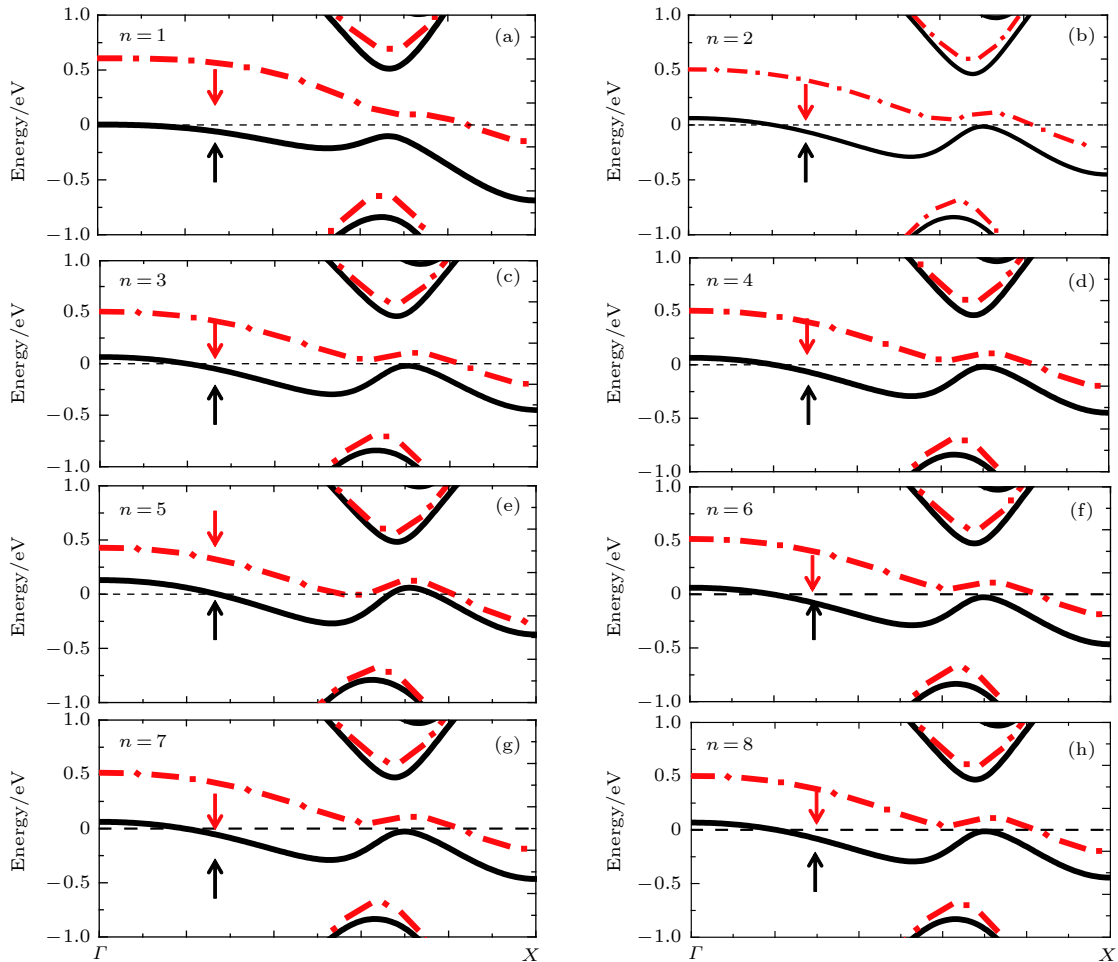


图 2 $n\text{ZGNR-B-(6, 6)SWCNT}$ 的能带结构图

Fig. 2. The band structures of $n\text{ZGNR-B-(6, 6)SWCNT}$.

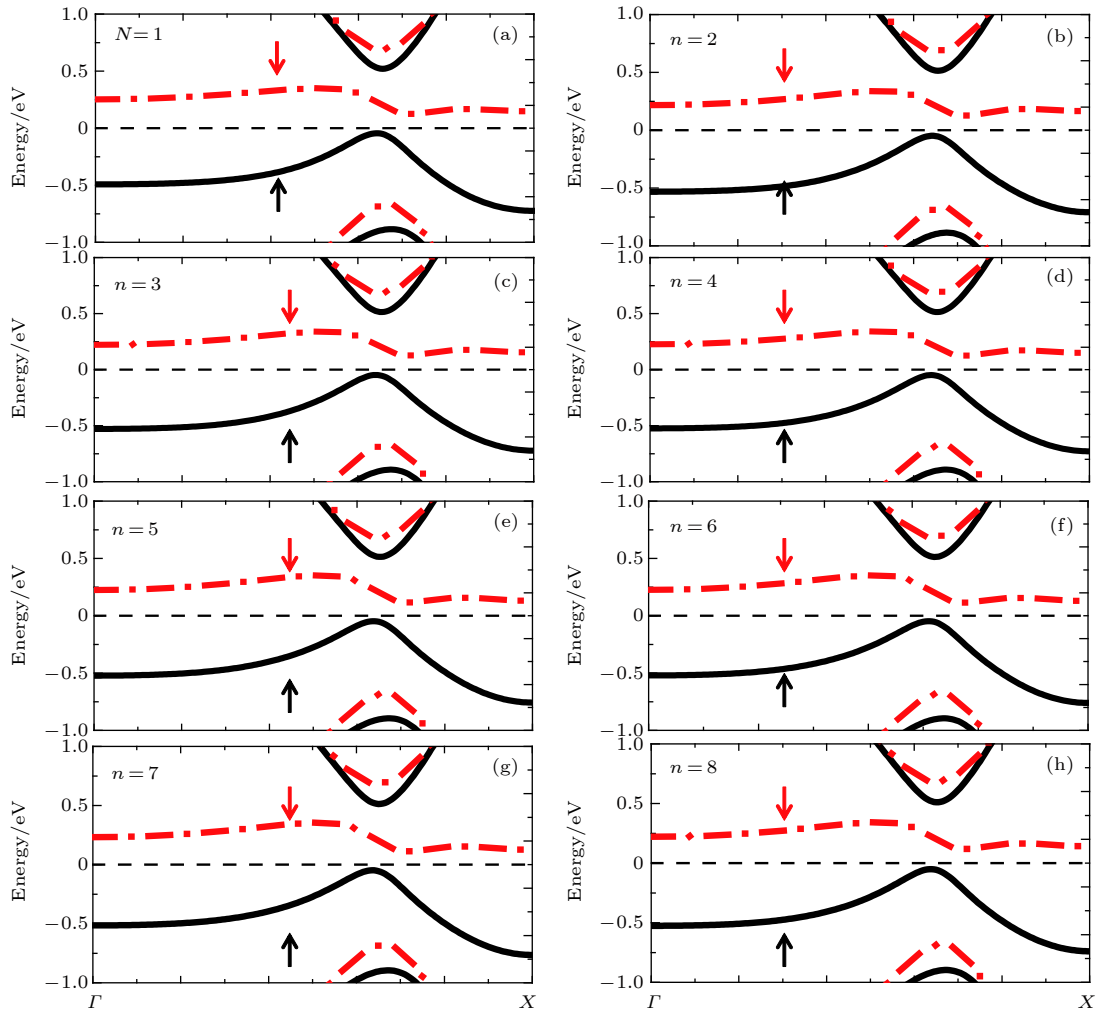


图 3 n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 的能带结构图
 Fig. 3. Band structures of n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT.

N-(m, m)SWCNT 均呈现出铁磁态. 当 $m = 4$ 时 (图 4(a), 图 4(g)), 自旋向上电子具有半导体特征, 而自旋向下电子显示出金属特性, 故 4ZGNR-B-(4, 4)SWCNT 和 4ZGNR-B-(4, 4)SWCNT 的电子态都是半金属; 当 $m = 5-9$ 时 (图 4(b)-(e)), 4ZGNR-B-(m, m)SWCNT ($m = 5-9$) 的自旋向上和自旋向下通道均穿过了费米能级, 因此均为金属性; 4ZGNR-N-(m, m)SWCNT ($m = 5-9$) 的自旋向上和自旋向下通道均具有半导体特征, 即为双极化铁磁半导体. 此外, 还对 BN 纳米带功能化锯齿形碳纳米管的电子结构进行了研究, 发现其为非磁性的半导体材料, 如图 5 所示.

为解释上述能带结构产生的原因, 给出了 n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 和 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT 两种复合结构 (以 $n = 1, 8$ 为例) 的电荷密度 ($\rho^\uparrow + \rho^\downarrow$) 和自旋极化密度 ($\rho^\uparrow - \rho^\downarrow$) 分布图

(图 6). 由图 6 可见, 由于 N, C 和 B 原子的电负性依次降低, 电子更趋向于占据 N 原子位置, 使得复合结构的电荷密度主要分布在 N 原子上, 同时 C 原子有较少分布, 而 B 原子没电荷分布, 如图 6(a), (c), (e), (g) 所示. n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 复合结构中, 由于 N 原子电负性大于 C 原子, 所以自旋极化密度分布在 C 原子以及和碳纳米管相接的 N 原子上, 而 B 原子没分布, 如图 6(b) 和图 6(d) 所示; n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT 复合结构中, B 原子的电负性小于 C 原子, 因此自旋极化密度主要分布在 C 原子上, 而 B, N 原子均无分布, 如图 6(f) 和图 6(h) 所示. 上述分析说明 N, C 和 B 原子的电负性决定了复合结构的能带结构.

为了研究 n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 和 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT 两种结构的热自旋输运性质, 并根据前面电子结构的讨论结果, 选取 $n = 1, 8$ 为

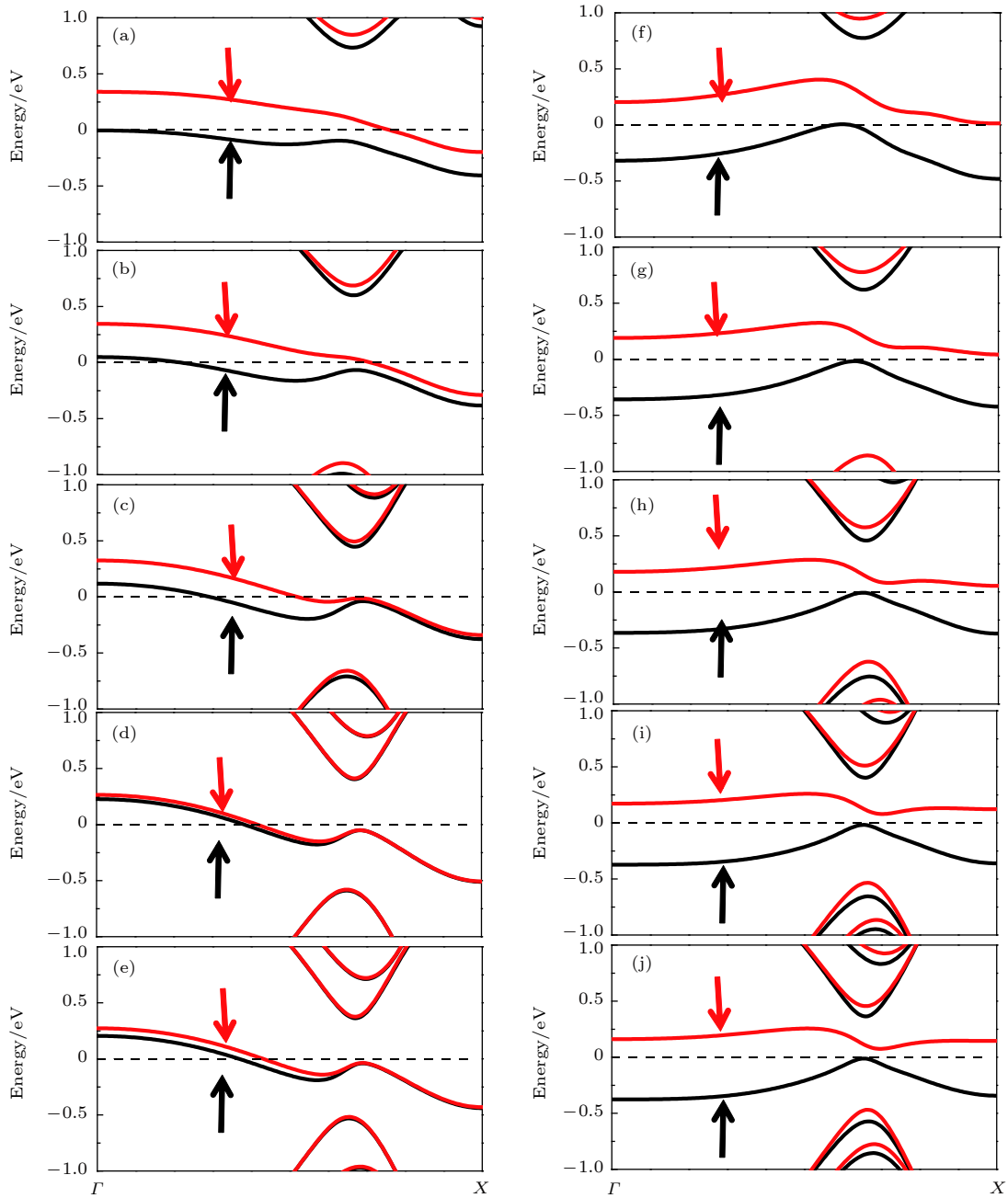


图 4 4ZGNR-B-(m, m)SWCNT 和 4ZGNR-N-(m, m)SWCNT($m = 5-9$) 的能带结构图
 Fig. 4. Band structures of 4ZGNR-B-(m, m)SWCNT and 4ZGNR-N-(m, m)SWCNT($m = 5-9$).

代表, 构建热电子学器件. 图 7 给出了 n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 和 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT($n = 1, 8$) 的热自旋电流 (包括自旋向上的电流 I_{up} 和自旋向下的电流 I_{dn}) 随 T_L 和 ΔT 的变化曲线. 图 7(a) 为 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT($n = 1$) 时不同的 ΔT (分别为 2, 4, 6 K) 下热自旋电流随 T_L 的变化曲线, 显然器件存在一个阈值温度 T_{th} , 当 T_L 低于 T_{th} 时, 没有自旋电流产生; 当 T_L 高于 T_{th} 时, 自旋向上的电流 (I_{up}) 随温度升高成线性增加, 而自

旋向下的电流 (I_{dn}) 变化很小, 说明产生了自旋过滤效应. 图 7(b) 为 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT ($n = 1$) 时且 T_L 分别为 200, 250, 300 K 时下热自旋电流随 ΔT 的变化曲线, 发现在相同 T_L 情况下, 随着 ΔT 的增加, I_{up} 线性增加, 而 I_{dn} 变化很小, 同样说明器件存在自旋过滤效应. 图 7(c) 为 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT ($n = 8$) 时不同的 ΔT (分别为 2, 4, 6 K) 下热自旋电流随 T_L 的变化曲线, 同样存在一个阈值温度 T_{th} , 当 T_L 低于 T_{th} 时, 没有自旋电流

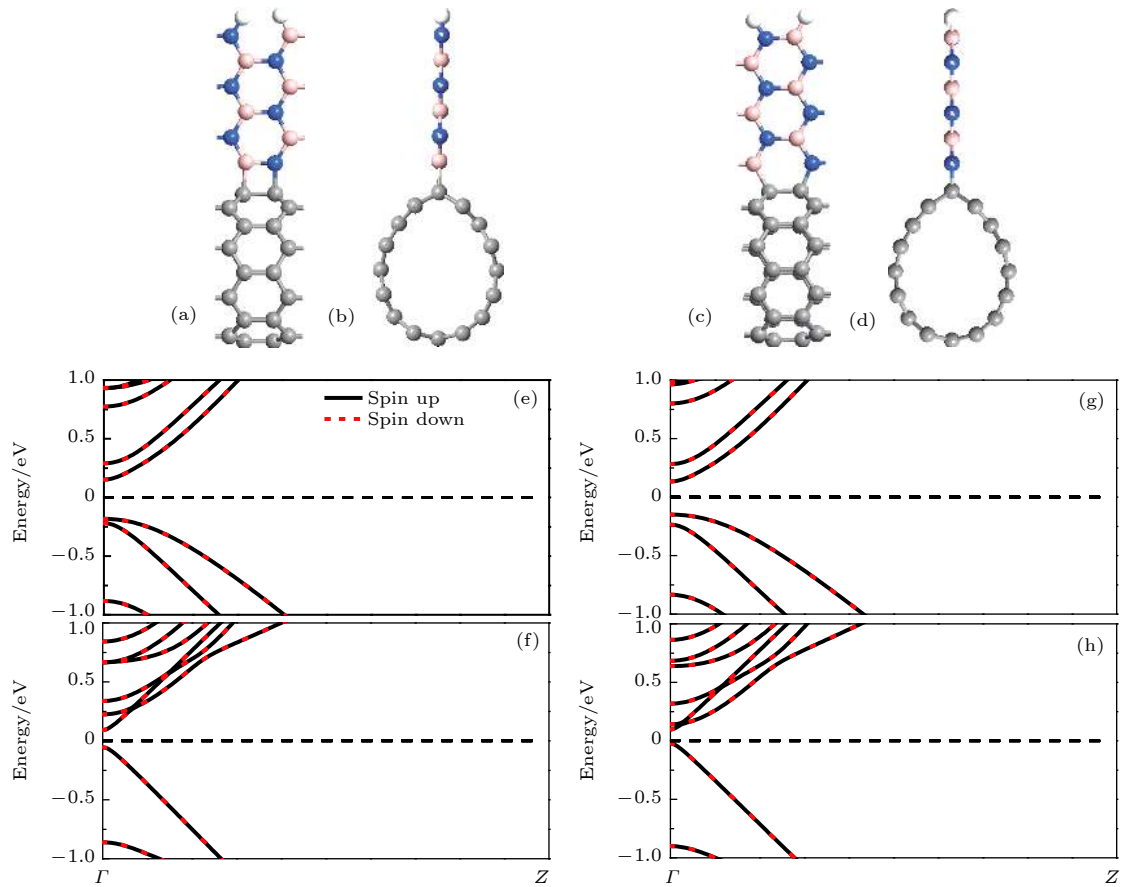


图 5 (a)–(d) 分别为 6ABNRs-(8, 0)SWCNT 的结构图, 其中 (a), (b) 结构中 BN 与 C 形成四边形, (c), (d) 结构中 BN 与 C 形成六边形; (e), (f) 为与之对应的能带结构图, 显然为非磁性半导体结构; (g), (h) 为 6ABNRs-(9, 0)SWCNT 的能带结构图, 同样呈现为半导体特征

Fig. 5. (a)–(d) Structure of 6ABNRs-B-(8, 0)SWCNT: (a), (b) the carbon, nitrogen and boron atoms form a quadrilateral structure; (c), (d) the carbon, nitrogen and boron atoms form a hexagonal structure. Gray, white, black, blue and brown balls indicate carbon, hydrogen, nitrogen and boron atoms, respectively. (e), (f) The band structures of 6ABNRs-B-(8, 0)SWCNT. (g), (h) The band structures of 6ABNRs-B-(9, 0)SWCNT.

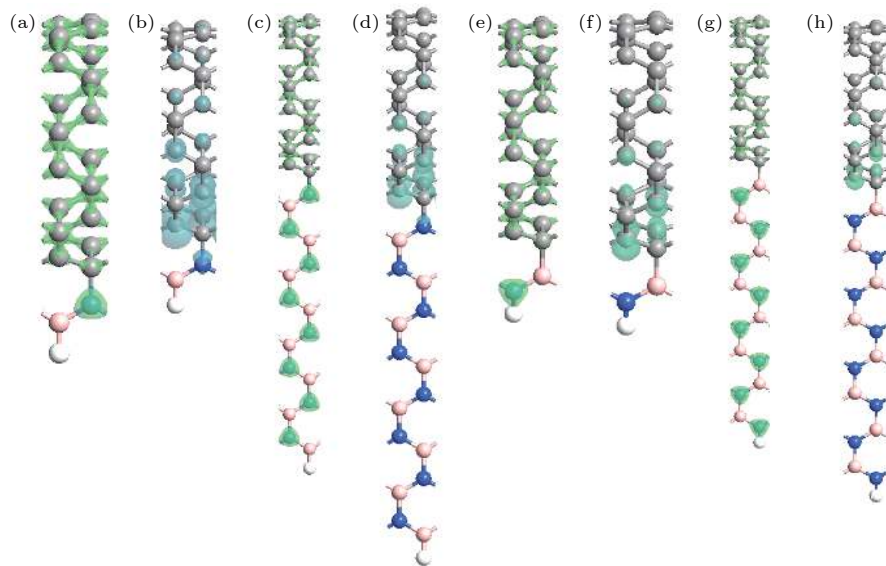


图 6 n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 和 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT ($n = 1, 8$) 的电荷密度和自旋极化密度分布图, 图中灰色表示碳原子, 白色表示氢原子, 蓝色表示氮原子, 棕色表示硼原子

Fig. 6. Electric densities and spin densities distribution of n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 和 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT ($n = 1, 8$). Gray, white, blue and brown balls indicate carbon, hydrogen, nitrogen, and boron atoms, respectively.

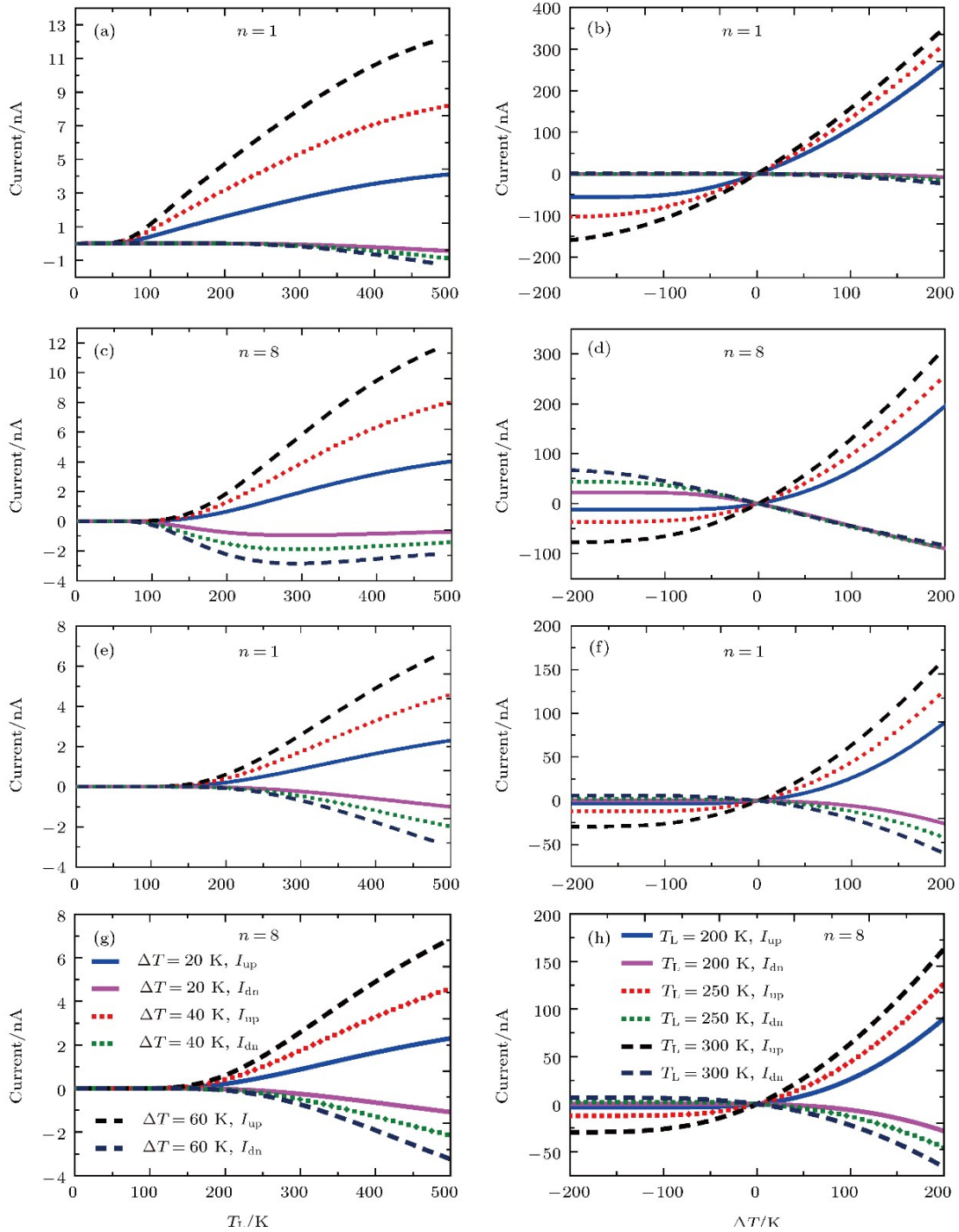


图 7 自旋相关电流随 T_L 和 ΔT 的变化曲线

Fig. 7. Spin-dependent currents versus $\Delta T/T_L$ for some selected values of $T_L/\Delta T$.

产生; 当 T_L 高于 T_{th} 时, 自旋向上的电流 (I_{up}) 和自旋向下的电流 (I_{dn}) 随温度升高而线性增加, 说明器件中存在着自旋相关塞贝克效应. 为进一步证明自旋相关塞贝克效应的存在, 还研究了该结构在 T_L 分别为 200, 250, 300 K 时 ΔT 对热自旋电流的影响, 如图 7(d) 所示, 发现随着 ΔT 的增加, 产生相反方向的 I_{up} 和 I_{dn} , 即说明器件存在自旋相

关塞贝克效应. $nZGNR-N-(6, 6)SWCNT(n = 1, 8)$ 热自旋电流随 T_L 和 ΔT 的变化曲线如图 7(e)–(h) 所示, 可以看出热自旋电流随温度变化与 $nZGNR-N-(6, 6)SWCNT(n = 8)$ 具有相似的规律, 说明器件中同样存在着明显的自旋相关塞贝克效应. 以上结果表明, BN 纳米带功能化碳纳米管在低能耗热自旋电子学器件方面具有潜在的应用.

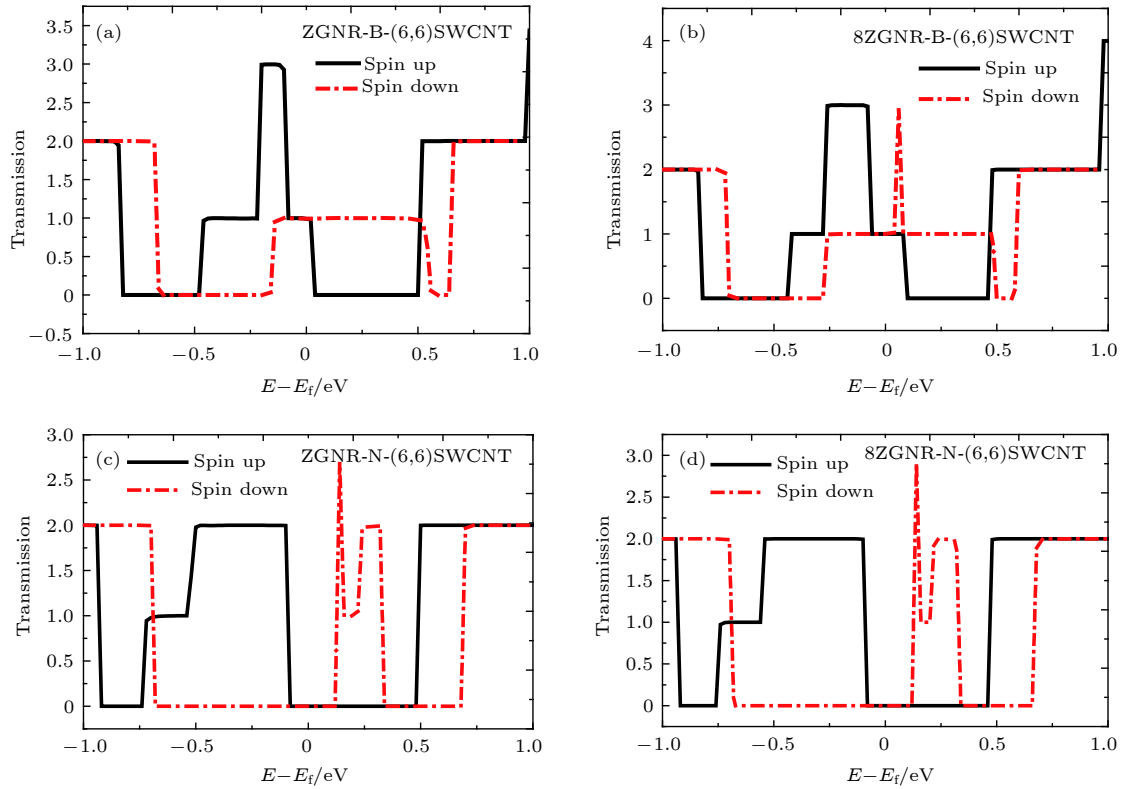


图 8 器件输运谱图

Fig. 8. Spin dependent transmission spectra for devices.

为了进一步了解上述现象发生的机理, 给出了 n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT 和 n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 两种器件在 $n = 1$ 和 8 时的输运谱, 如图 8 所示. 众所周知, 电子通常分布在费米能级以上, 而空穴一般分布在费米能级以下. 随着温度的升高, 在费米能及以上会出现更多的电子, 同时在费米能级以下也将出现更多的空穴. 由于 T_L 高于 T_R , 导致左电极的电子和空穴浓度均高于右电极, 即左右电极间存在电子和空穴的浓度梯度, 所以电子和空穴都将从左电极流向右电极, 从而形成负的电子流 I_e 和正的空穴流 I_h . 另一方面, 自旋极化电流还取决于系统的输运系数 $T^{\uparrow(\downarrow)}(E)$ 和左右电极的费米-狄拉克分布, 所以当输运谱关于费米能级对称时, I_e 和 I_h 会相互抵消, 从而导致只存在自旋流, 相应的电荷流 I_{ch} 为零. 从图 8 可以看出, 四个器件的输运谱均不关于费米能级对称, 故其电荷流 I_{ch} 均不为零.

4 结 论

利用密度泛函理论研究了复合结构 n ZGNR-B-(m, m)SWCNT 和 n ZGNR-N-(m, m)SWCNT

($n = 1-8, m = 4-9$) 的自旋极化能带结构, 发现当 $n = 1$ 时, n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT 为铁磁半金属; 而当 $n = 2-8$ 时, n ZGNR-B-(6, 6)SWCNT 为铁磁金属; 在 n ZGNR-N-(6, 6)SWCNT 结构中, 不论 n 取何值, 对应器件均为双极化铁磁半导体; 4ZBNRs-B-(4, 4)SWCNT, 4ZBNRs-N-(4, 4)SWCNT 为磁性半金属, 4ZBNRs-B-(m, m)SWCNT ($m = 5-9$) 为磁性金属; 4ZBNRs-N-(m, m)SWCNT ($m = 5-9$) 为双极化铁磁半导体. 然后, 探究了两种结构的在 $n = 1$ 和 8 时的热自旋输运性质, 通过分析器件中热自旋电流随 T_L 和 ΔT 的变化曲线, 发现了自旋过滤效应和自旋相关塞贝克效应. 最后, 为进一步了解自旋相关塞贝克效应的产生机理, 探讨了与之对应的器件输运谱, 发现器件中有电荷流的产生. 结果表明, n ZGNR-N-(m, m)SWCNT 和 n ZGNR-B-(m, m)SWCNT 两种材料在热自旋电子学器件方面具有潜在的应用.

参考文献

- [1] Uchida K, Takahashi S, Harii K, Leda J, Koshibae W, Ando K, Maekawa S, Saitoh E 2008 *Nature* **455** 778
- [2] Uchida K, Xiao J, Adachi H, Ohe J, Takahashi S, Leda J,

- Ota T, Kajiwara Y, Umezawa H, Kawai H, Bauer G E W, Maekawa S, Saitoh E 2009 *Nat. Mater.* **9** 894
- [3] Ezawa M 2009 *Eur. Phys. J. B* **67** 543
- [4] Borlenghi S, Wang W W, Fangohr H, Bergqvist L, Delin A 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 047203
- [5] Fu H H, Wu D D, Gu L, Wu M H, Wu R 2015 *Phys. Rev. B* **92** 045418
- [6] Ren J 2013 *Phys. Rev. B* **88** 220406(R)
- [7] Ren J, Zhu J X 2013 *Phys. Rev. B* **87** 241412(R)
- [8] Fu H H, Gu L, Wu D D 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 12742
- [9] Ren J, Fransson J, Zhu J X 2014 *Phys. Rev. B* **89** 214407
- [10] Wu D D, Liu Q B, Fu H H, Wu R 2017 *Nanoscale* **9** 18334
- [11] Liu Q B, Wu D D, Fu H H 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 27132
- [12] Avouris P, Chen Z, Perebeinos V 2007 *Nat. Nanotechnol.* **2** 605
- [13] Nair R R, Blake P, Grigorenko A N, Novoselov K S, Booth T J, Stauber T, Peres N M R, Geim A K 2008 *Science* **320** 1380
- [14] Cai J, Ruffieux P, Jaafar R, Bieri M, Braun T, Blankenburg S, Muoth M, Seitsonen A P, Saleh M, Feng X, Müllen K, Fasel R 2010 *Nature* **466** 470
- [15] Zeng M G, Feng Y P, Liang G C 2011 *Nano Lett.* **11** 1369
- [16] Zeng M G, Shen L, Zhou M, Zhang C, Feng Y P 2011 *Phys. Rev. B* **83** 115427
- [17] Zeng M, Feng Y, Liang G 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 123114
- [18] Ni Y, Yao K L, Fu H H, Gao G Y, Zhu S C, Wang S L 2013 *Sci. Rep.* **3** 1380
- [19] Li J W, Wang B, Xu F M, Wei Y D, Wang J 2016 *Phys. Rev. B* **93** 195426
- [20] Liu Q B, Wu D D, Fu H H 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 27132
- [21] Tang X Q, Ye X M, Tan X Y, Ren D H 2018 *Sci. Rep.* **8** 927
- [22] Lou P 2014 *Phys. Status Solidi RRL* **8** 187
- [23] Zeng H L, Gou Y D, Yan X H, Zhou J 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 21507
- [24] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 121104(R)
- [25] Padilha J E, Lima M P, Silva A J R D, Fazzio A 2011 *Phys. Rev. B* **84** 113412
- [26] Soler J M, Artacho E, Gale J D, García A, Junquera J, Ordejón P, Sánchez-Portal D 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 2745
- [27] Perdew J P, Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **46** 12947
- [28] Ye X M, Tang X Q, Tan X Y, Ren D H 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 19424
- [29] Yao K, Fu H 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 13502
- [30] Wang B G, Wang J, Gou H 2001 *J. Phys. Soc. Jpn.* **70** 2645
- [31] Rejec T, Ramsak A, Jefferson J H 2002 *Phys. Rev. B* **65** 235301
- [32] Broido D A, Mingo N 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 096105
- [33] Saha K K, Markussen T, Thygesen K S, Nikolic B K 2011 *Phys. Rev. B* **84** 041412(R)
- [34] Du A, Chen Y, Zhu Z, Lu G, Smith S C 2009 *J. Am. Chem. Soc.* **131** 1682
- [35] Dutta S, Manna A, Pati S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 096601
- [36] He J, Chen K Q, Fan Z Q, Tang L M, Hu W P 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 193305
- [37] Tang S, Cao Z 2010 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** 2313
- [38] Yu Z, Hu M L, Zhang C X, He C Y, Sun L Z, Zhong J 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 10836
- [39] Liu Y, Wu X, Zhao Y, Zeng X C, Yang J 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 9442
- [40] Wang Y, Ding Y, Ni J 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 5995
- [41] Tang C, Kou L, Chen C 2012 *Chem. Phys. Lett.* **523** 98
- [42] Christenholz C L, Obenchain D A, Peebles R A, Peebles S A 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 16104
- [43] Wang Y, Li Y, Chen Z 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 25051
- [44] Zhu L, Li R, Yao K L 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 4085

Thermal spin transport properties in a hybrid structure of single-walled carbon nanotubes and zigzag-edge boron nitride nanoribbons*

Xiao Jia-Yong¹⁾ Tan Xing-Yi^{1)†} Yang Bei-Bei¹⁾ Ren Da-Hua¹⁾
Zuo An-You¹⁾ Fu Hua-Hua²⁾

1) (School of Information Engineering, Hubei University for Nationalities, Enshi 445000, China)

2) (School of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(Received 5 November 2018; revised manuscript received 9 December 2018)

Abstract

The spin caloritronics device, because of the characteristics of spintronics and thermoelectronics, plays an important role in human sustainable development. A lot of spin caloritronic devices based carbon materials (such as graphene nanoribbons, carbon nanotubes) have been reported. However, there are few studies of the thermal spin transport properties in a hybrid structure of single-walled carbon nanotubes and zigzag-edge BN nanoribbons, and the thermal spin transport mechanism of this structure is still unclear. In this paper, using the nonequilibrium Green's function (NEGF) combined with the first principle calculations, the electronic structures and the thermal spin transport properties of the zigzag edge BN nanoribbons functionalized single-walled carbon nanotubes are studied. It is shown that the ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT is a half-metal, while the n ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT are magnetic metals ($n = 2-8$), and the n ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT are bipolar magnetic semiconductors ($n = 1-8$). The 4ZBNRs-N-(4, 4)SWCNT and 4ZBNRs-B-(4, 4)SWCNT are half-metals, while the 4ZBNRs-B-(m, m)SWCNT ($m = 5-9$) are magnetic metals, and the 4ZBNRs-N-(m, m)SWCNT ($m = 5-9$) are bipolar magnetic semiconductors. Then, some novel spin caloritronic devices are designed based on n ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT and n ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT ($n = 1, 8$). For the ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT, when the temperature of the left electrode is increased above a critical value, the thermal spin-up current then increases remarkably from zero. Meanwhile the thermal spin-down current remains approximately equal to zero in the entire temperature region, thus indicating the formation of a thermal spin filter. For the 8ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT and n ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT ($n = 1, 8$), when a temperature gradient is produced between two electrodes, the spin-up and spin-down currents are driven in the opposite directions, which indicates that the spin-dependent Seebeck effect (SDSE) appears. In order to obtain the fundamental mechanism of thermal spin filter effect and SDSE, the Landauer-Büttiker formalism is adopted. It is found that the currents (I_{up} and I_{dn}) mainly depend on two factors: 1) the transport coefficient; 2) the difference between the Fermi-Dirac distributions of the left and right electrode. Additionally, the electron current I_e and the hole current I_h will be generated when a temperature gradient is produced between the left and right lead. Furthermore, the I_{up} and I_{dn} have the opposite directions for the spin up transmission peaks below the Fermi level while they have the opposite directions for the spin down transmission peaks above the Fermi level in the transmission spectrum, which demonstrates the presence of the SDSE in the 8ZBNRs-B-(6, 6)SWCNT and n ZBNRs-N-(6, 6)SWCNT ($n = 1, 8$). Finally, the results indicate that n ZBNR-N-(m, m)SWCNT and n ZBNR-B-(m, m)SWCNT can have potential applications in thermospin electronic devices.

Keywords: spin caloritronics, spin dependent Seebeck effect, thermal spin filter

PACS: 73.22.-f, 71.15.Mb, 75.50.Dd, 85.75.-d

DOI: 10.7498/aps.68.20181968

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11864011) and the Natural Science Foundation of Hubei Province, China (Grant No. 2018CFB390).

† Corresponding author. E-mail: tanxy@hbmy.edu.cn