

不对称边缘修饰石墨烯/硅烯纳米条带中的光诱导纯自旋流*

杨文跃¹⁾ 吴萱焯¹⁾ 杨致¹⁾ 徐利春¹⁾ 冯琳¹⁾
陈波¹⁾ 薛林^{1)†} 杨玲珍^{1)2)‡}

¹⁾ (太原理工大学物理与光电工程学院, 太原 030024)

²⁾ (太原理工大学, 精密测量物理山西省重点实验室, 太原 030024)

(2025年12月16日收到; 2026年1月20日收到修改稿)

光学伽伐尼效应 (photogalvanic effect, PGE) 已被证明可以在具有空间反演对称性的低维自旋器件中诱导不受光子能量 (photon energy, E_{ph}) 或入射光偏振/相角 (θ/φ) 限制的纯自旋流. 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理和非平衡格林函数方法, 通过氢原子和卤素原子 (F, Cl, Br) 对锯齿形石墨烯和硅烯纳米条带进行不对称边缘钝化, 其电子性能的研究表明 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR, Cl-2H 6ZSiNR, Br-2H 6ZSiNR 四种结构都属于双极化自旋半导体. 以此为基础设计具有空间反演对称结构的光电器件, 并用不同 E_{ph} 和 θ/φ 的线偏振光 (linearly polarized light, LPL) 和椭圆偏振光 (elliptically polarized light, EPL) 照射中心区域, 发现器件都有纯自旋流产生, 并且不依赖于光的偏振类型、 E_{ph} 和 θ/φ . 这种纯自旋流产生的鲁棒性源于器件结构的双极化自旋态和空间反演对称性, 研究结果为下一代自旋器件、量子计算和纳米传感的设计提供了新的方案.

关键词: 一维纳米条带, 电子性能, 纯自旋流, 光学伽伐尼效应

DOI: 10.7498/aps.75.20251722

CSTR: 32037.14.aps.75.20251722

1 引言

自旋电子学 (spintronics) 不仅考虑了电子的电荷, 还研究电子的自旋态, 旨在通过控制和利用电子的自旋实现更高效、更快速、更稳定的信息处理和存储, 为新型电子设备和技术的发展奠定了基础, 不仅是在微型化和能效提升方面, 而且在信息存储和逻辑运算设备领域也展示了巨大的潜力^[1-3]. 在自旋电子学研究领域中, 其中一个核心挑战是产生自旋流, 特别是没有伴随电荷流动的纯自旋流. 纯自旋流由于没有伴随的电荷电流和焦耳热, 成

为设计低能耗自旋电子器件的关键^[4,5]. 在磁化切换^[6]、自旋扭矩振荡器^[7]、磁化振荡的参数激励控制^[8]以及自旋转移随机存取存储器^[9,10]中已经展开广泛研究. 目前已经提出了几种产生纯自旋流的方法, 例如光学注入^[11]、自旋霍尔效应^[12]、非局部自旋注入^[13]、三端器件中生成^[14]、热驱动分子磁结^[15]和动态注入^[16].

与上述方法相比, 利用光学伽伐尼效应 (photogalvanic effect, PGE) 获得纯自旋流的方法具有非侵入性、非接触性, 并且可以实现皮秒甚至更短的响应时间等优点, 受到研究者广泛关注. 在一些低维极化体系如三角烯^[17]、单层蜂窝状三氟甲

* 国家自然科学基金 (批准号: 62104168, 61975141, 61575137) 和山西省自然科学基金 (批准号: 20210302123201, 202303021211027, 202303021211028, 202503021211045) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xuelin@tyut.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: office-science@tyut.edu.cn

基^[18]、有缺陷的硅烯^[19]和蓝色磷烯纳米管^[20]和卤化磷烯^[21]等中, PGE 被证实是低维体系产生纯自旋流的一种有效方法^[22]. 但是这一方案仍受限于严格的条件, 只有在特定的偏振角/相角 (θ/φ)、特定的光子能量 (photon energy, E_{ph}) 下才能实现纯自旋流. 如何摆脱这些限制从而获得更强大且更稳健的纯自旋流仍然是一个巨大的挑战. 2020 年 Tao 等^[23]采用石墨烯纳米条带设计双极化自旋半导体, 即价带顶和导带底具有不同自旋态, 并以此搭建具有空间反演对称性的光电器件, 展示了一种通过 PGE 产生稳健纯自旋流的方法, 其不依赖于 E_{ph} , θ/φ 和偏振特征. 在其他体系中, 如硅烯纳米条带、半硅烷等的研究也发现了类似的结果^[24-30]. 与二维体系相比, 一维体系电子性质可以通过边缘钝化有效调控, 如—H, —F, —Cl, —Br, —S, —SH, —OH, —O 等官能团都可以通过边缘钝化调控纳米条带带隙及磁性等电子性质^[31,32], 因此, 通过一维体系更易设计双极化自旋半导体, 以此构建具有空间反演对称性的光电器件, 是获得稳健纯自旋流的有效方法.

Kharwar 等^[33]研究发现, 通过氢原子和氟原子边缘钝化锯齿形硅烯纳米条带可以实现双极化自旋半导体. 本文对锯齿形石墨烯或硅烯纳米条带分别用氢原子和卤素原子 (F, Cl, Br 原子) 进行不对称边缘钝化, 并通过其能带、态密度以及磁性等电子性质的分析研究其中的双极化自旋半导体结构. 以此为基础进一步搭建具有空间反演对称性结构的光电器件, 探究其在线偏振光 (linearly polarized light, LPL) 和椭圆偏振光 (elliptically polarized light, EPL) 照射下纯自旋流的产生并分

析其中物理机制.

2 器件模型与细节

文中主要以氢原子和氟原子的不对称边缘钝化为例, 对含 6 条锯齿形碳链和硅链的石墨烯纳米条带 (6ZCNR) 和硅烯纳米条带 (6ZSiNR) 进行研究. 它们被分为两条半无限纳米条带, 左半部分上边缘被单氟化, 下边缘被双氢化, 右半部分下边缘被单氟化, 上边缘被双氢化, 分别记为 F-2H 6ZCNR 和 F-2H 6ZSiNR. 用此化学修饰后的纳米条带去搭建双探头光电器件, 如图 1 所示, 器件由 3 部分组成: 左、右电极和中心区域, 左、右电极沿传输方向 Z 延伸到 $\pm\infty$, 分别在 X 方向和 Y 方向增加了 20 Å 的真空层, 以消除相邻层间的相互作用. 在搭建 F-2H 6ZCNR(F-2H 6ZSiNR) 光电器件时, 左、右电极都取 2 个单胞 (2 u.c) 长度为 4.922 Å (7.9 Å), 中心区包含 8.5 个单胞 (8.5 u.c), 长度为 20.919 Å (33.575 Å), 如图 1 所示, 整个系统具有空间反演对称性, 反演中心位于点 O . 用不同 E_{ph} 的 LPL 和 EPL 沿 Y 方向对中心区进行照射, 包括中心散射区和缓冲层, 其中极化矢量为 \mathbf{A} , 和 Z 轴的偏振角/相角为 θ/φ , 如图 1(a), (b) 所示.

器件的光电流等输运性质采用基于非平衡格林函数 (non-equilibrium Green's function, NEGF) 和密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的 Nanocal 软件包计算^[34,35]. 在自洽模拟中, 采用双 ζ 极化 (double-zeta-polarized, DZP) 形式的原子轨道基组展开电子波函数, 等效平面波截断能量设置为 100 a.u.

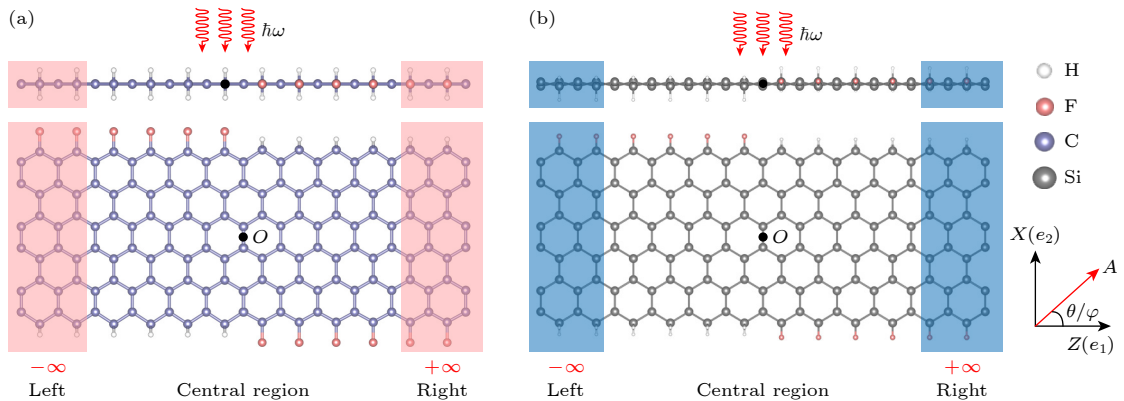


图 1 (a) F-2H 6ZCNR 和 (b) F-2H 6ZSiNR 光电器件示意图 (点 O 为对称中心)

Fig. 1. Schematic plot of photoelectric detector of (a) F-2H 6ZCNR and (b) F-2H 6ZSiNR (point O is the center of symmetry).

系统中光电流的计算采用后处理的方式, 具体说, 从中心区域流向电极 α 的自旋相关光电流为^[36]

$$I_{\alpha,\sigma}^{\text{ph}} = \frac{ie}{h} \int T_{\text{eff},\alpha,\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (1)$$

其中有效透射函数为

$$T_{\text{eff},\alpha,\sigma}(\varepsilon) = \text{Tr}\{ \Gamma_{\alpha,\sigma}(\varepsilon)[(1 - f_{\alpha}(\varepsilon)) G_{\text{ph}}^<(\varepsilon) + f_{\alpha}(\varepsilon) G_{\text{ph}}^>(\varepsilon)] \}, \quad (2)$$

其中 $\alpha(\text{L}, \text{R})$ 和 $\sigma(\uparrow, \downarrow)$ 分别为左、右电极和自旋分量; $\Gamma_{\alpha} = i(\Sigma_{\alpha}^{\text{r}} - \Sigma_{\alpha}^{\text{a}})$ 为电极 α 的展宽函数, 其中包含中心区域与电极 α 耦合信息, $\Sigma_{\alpha}^{\text{r/a}}$ 为电极 α 的自能; f_{α} 是电极 α 电子的费米-狄拉克分布; $G_{\text{ph}}^<(>) = G_0^{\text{r}} [\Sigma_{\text{ph}}^<(>) + \Sigma_{\text{L}}^<(>) + \Sigma_{\text{R}}^<(>)] G_0^{\text{a}}$ 为一阶玻恩近似中考虑在中心区域电子-光子相互作用的小于 (大于) 格林函数, $G_0^{\text{r}} (G_0^{\text{a}})$ 是不考虑在中心区域电子-光子相互作用延迟 (超前) 的格林函数, $\Sigma_{\text{ph}}^<(>)$ 表示考虑电子-光子相互作用的自能函数, 包含了偏振光偏振信息的矢量 \mathbf{A} . 对于 LPL, 偏振矢量定义为 $\mathbf{A} = \cos(\theta) \mathbf{e}_1 + \sin(\theta) \mathbf{e}_2$, 其中 θ 是偏振方向相对于矢量 \mathbf{e}_1 形成的偏振角 (图 1). $\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2$ 决定了所施加的偏振光的传播方向, 因此光沿着 Y 方向入射. 对于 EPL, 偏振矢量定义为 $\mathbf{A} = \cos(\varphi) \mathbf{e}_1 + i \sin(\varphi) \mathbf{e}_2$, 其中 φ 表示相角. 注意到 $\varphi = \pm 45^\circ/135^\circ$ 表示圆偏振光. 通常意义下, 归一化的光电流被简化为^[37,38]

$$R_{\alpha,\sigma} = \frac{I_{\alpha,\sigma}^{\text{ph}}}{eI_w}, \quad (3)$$

式中 $R_{\alpha,\sigma}$ 的量纲为 a_0^2/photon , a_0 是玻尔半径, I_w 是光通量 (单位时间内通过单位面积电子数).

构建器件采用的 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR 单胞结构, 其结构优化及电子性能计算均采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 软件包^[39-41]. 原子核与电子的相互作用通过投影缀加平面波方法 (projector augmented wave, PAW) 描述^[42], 电子交换关联泛函采用基于广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 的 PBE 泛函^[43]. 计算截断能为 500 eV 并分别使用 $1 \times 1 \times 14$ (F-2H 6ZCNR) 和 $1 \times 1 \times 8$ (F-2H 6ZSiNR) 的 Monkhorst-Pack 点网格进行不可约布里渊区采样. 能量收敛标准为每晶胞 10^{-5} eV, 且每个原子的受力均小于 0.01 eV/Å.

3 计算结果与讨论

3.1 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR 单胞电子性质

如图 2(a), (b) 所示, 构建器件采用的 F-2H 6ZCNR 和 F-2H 6ZSiNR 单胞结构优化后沿 Z 方向 (输运方向) 的晶格常数分别为 2.461 Å 和 3.950 Å, 用单个 F 原子边缘钝化的 C/Si 原子为 sp^2 杂化; 用 2 个 H 原子边缘钝化的 C/Si 原子为 sp^3 杂化. F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR 单胞的电子性能将通过能带、态密度及磁矩的计算进行研究. 首先, 为了确定 F-2H 6ZCNR 体系的磁基态, 我们构建了 $1 \times 1 \times 4$ 超胞, 并设置了 8 种初始磁序 (如补充材料图 S1 (online) 所示), 包括铁磁 (FM)、反铁磁 (AFM) 和无磁 (NM) 态. 计算结果显示当体系初始磁构型设置为图 S1(b), (f) (online) 中 AFM 和图 S1(e) (online) 的 FM 时, 计算得到相同结果, 其相邻原子磁矩呈反平行排列且大小不同, 体系总磁矩不为 0 且能量最低, 体系基态为亚铁磁. F-2H 6ZSiNR 结果与 F-2H 6ZCNR 类似, 后续的讨论均基于此基态展开.

从 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR 单胞结构的能带图, 如图 2(c), (d) 所示, 可以看到两个结构在费米能级附近都存在两条局域性较强, 自旋极化率为 100% 且自旋方向相反的双极化自旋态, 分别是自旋向下的导带和自旋向上的价带. 对于 F-2H 6ZCNR 单胞, 如图 2(a), (c) 所示, 自旋向上存在 1.300 eV 的间接带隙, 而自旋向下存在 1.421 eV 的直接带隙, 体系自旋带隙 (E_g) 为 0.507 eV, 属于双极化自旋半导体. 从原子投影态密度可以看到对费米能级附近两条能带做主要贡献的是 C_2 , C_4 和 C_{12} , 其次是 H 原子和 F 原子. 如图 2(b), (d) 所示, F-2H 6ZSiNR 也属于双极化自旋半导体, 自旋向上态存在 0.525 eV 的直接带隙, 自旋向下态存在 0.557 eV 的间接带隙, 体系自旋带隙 (E_g) 为 0.263 eV. 同 F-2H 6ZCNR 单胞类似, 对于 F-2H 6ZSiNR 单胞, 从原子投影态密度可以看到对费米能级附近自旋向下的导带和自旋向上的价带做主要贡献的是 Si_2 , Si_4 和 Si_{12} , 其次是 H 原子和 F 原子.

为了进一步探究体系自旋态的来源, 如图 2(e), (f) 所示, 分别对 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR

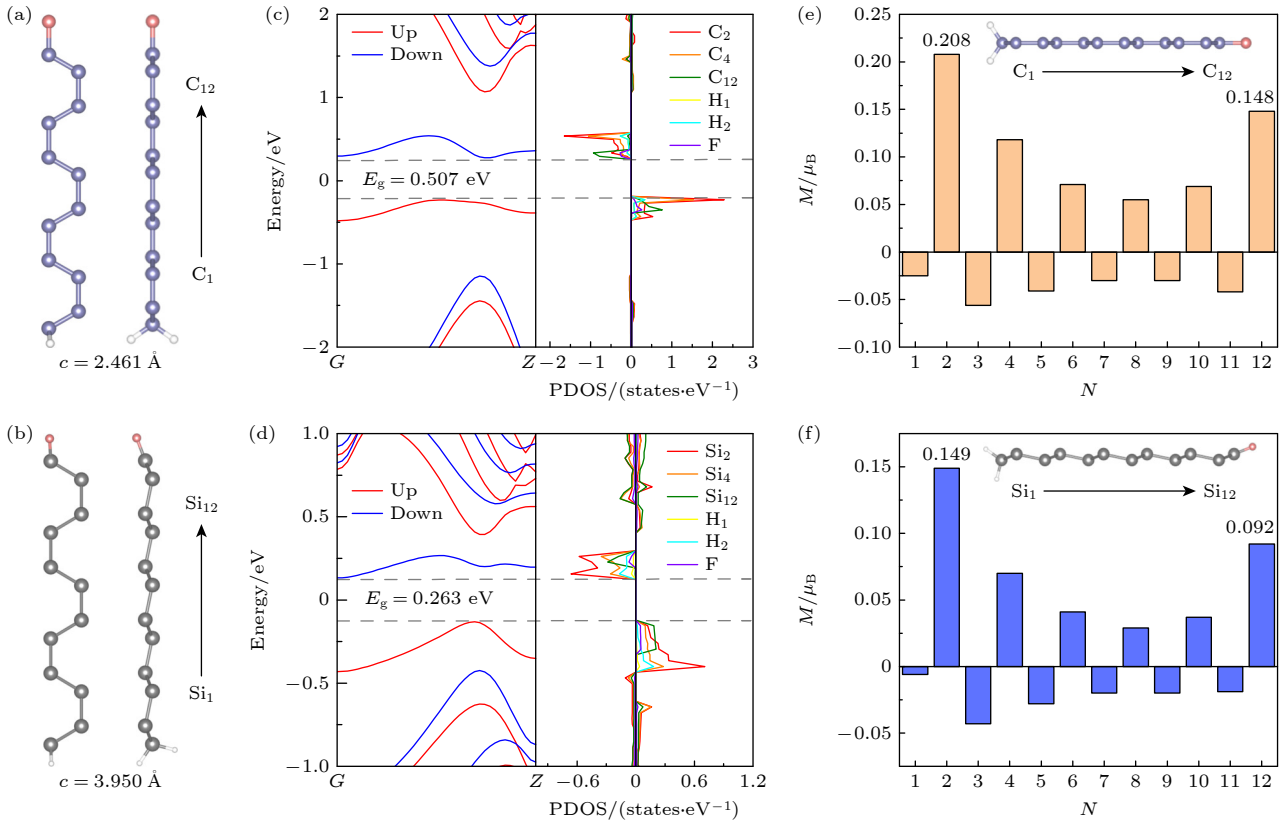


图 2 (a) F-2H 6ZCNR 和 (b) F-2H 6ZSiNR 单胞俯视图 (左) 和侧视图 (右); (c) F-2H 6ZCNR 和 (d) F-2H 6ZSiNR 单胞的能带图和原子投影态密度; (e) F-2H 6ZCNR 和 (f) F-2H 6ZSiNR 单胞的磁矩分布图, 其中 C_1 — C_{12} 和 Si_1 — Si_{12} 分别代表 C 和 Si 原子从 H 钝化端到 F 钝化端的序号, N 代表 C/N 原子从左到右对应序号

Fig. 2. Top view (left) and side view (right) of the unit cell of (a) F-2H 6ZCNR and (b) F-2H 6ZSiNR; the band structures and the PDOS (atomic projection states density) for (c) F-2H 6ZCNR and (d) F-2H 6ZSiNR; the magnetic moments distribution in the unit cell of (e) F-2H 6ZCNR and (f) F-2H 6ZSiNR (C_1 — C_{12} and Si_1 — Si_{12} denote the atomic indices of C and Si atoms from the H-passivated end to the F-passivated end, respectively. N represents the index of C/N atoms from left to right).

的单胞结构进行原子磁矩的统计. 可以看到, 结构中的原子磁矩展示出与 H-2H 6ZSiNR 体系相同的规律^[24]. F-2H 6ZCNR 单胞中边缘双氢化的 sp^3 杂化 C 原子 (C_1) 的磁矩仅为 $-0.025\mu_B$, 而其最近邻 C 原子 (C_2) 的磁矩为 $0.208\mu_B$, 远大于 C_1 的 $-0.025\mu_B$. Jiang 等^[24] 指出这是由于 C_1 上的 sp^3 杂化形成了 C_1 和 C_2 之间 π 键的终止, 致使 C_2 磁矩增大. 边缘单 F 化的 sp^2 杂化 C 原子 (C_{12}) 的磁矩为 $0.148\mu_B$, 大于 C_1 且小于 C_2 的磁矩. 此部分结果与原子投影态密度计算结果一致. F-2H 6ZSiNR 单胞中 Si 原子的磁矩计算结果与 F-2H 6ZCNR 类似, Si_2 磁矩最大 ($0.149\mu_B$), 其次是 Si_{12} 磁矩 ($0.092\mu_B$), 也与原子投影态密度计算结果吻合.

3.2 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR 器件光电流

基于自旋半导体 F-2H 6ZCNR 和 F-2H 6ZSiNR

搭建光电器件并研究其自旋光电流. 以 F-2H 6ZCNR 器件为例, 当 $\theta/\varphi = 45^\circ$ 和 90° 时, 在整个中心区域用能量从 0—2.4 eV 范围 LPL 或 EPL 照射, 其自旋光电流 (I_σ , ($\sigma = \uparrow, \downarrow$)) 和总电荷电流 ($I_c = I_\uparrow + I_\downarrow$) 随 E_{ph} 的变化如图 3(a), (b) 所示. 首先, 对于 LPL 和 EPL, 在 $E_{ph} < 0.507$ eV 时, 其光电流都为 0. 这是由于体系存在 0.507 eV 的自旋带隙, 低于该值, 电子不足以被激发, 光电流为零. 在 $E_{ph} > 0.507$ eV 时, 在两个自旋通道中获得光电流. 注意到, 两个自旋方向产生的光电流大小相等, 方向相反且自旋流 ($I_s = I_\uparrow - I_\downarrow$) 不为 0, 而总电荷电流 I_c 为 0, 这意味着体系产生纯自旋流. 此外, 当 $\theta = 45^\circ$ 和 90° 时, 无论是 LPL 还是 EPL, 光电流在 E_{ph} 约为 0.7, 1.9, 2.2 eV 等附近出现峰值. F-2H 6ZSiNR 光电器件中的光电流也发现相同的规律, 如图 3(c), (d) 所示, 在 LPL 和 EPL 照射下, 只有满足当 E_{ph} 大于自旋带隙 (0.263 eV) 才会产生两个自旋方向相反、大小相同的自旋流, 获得纯

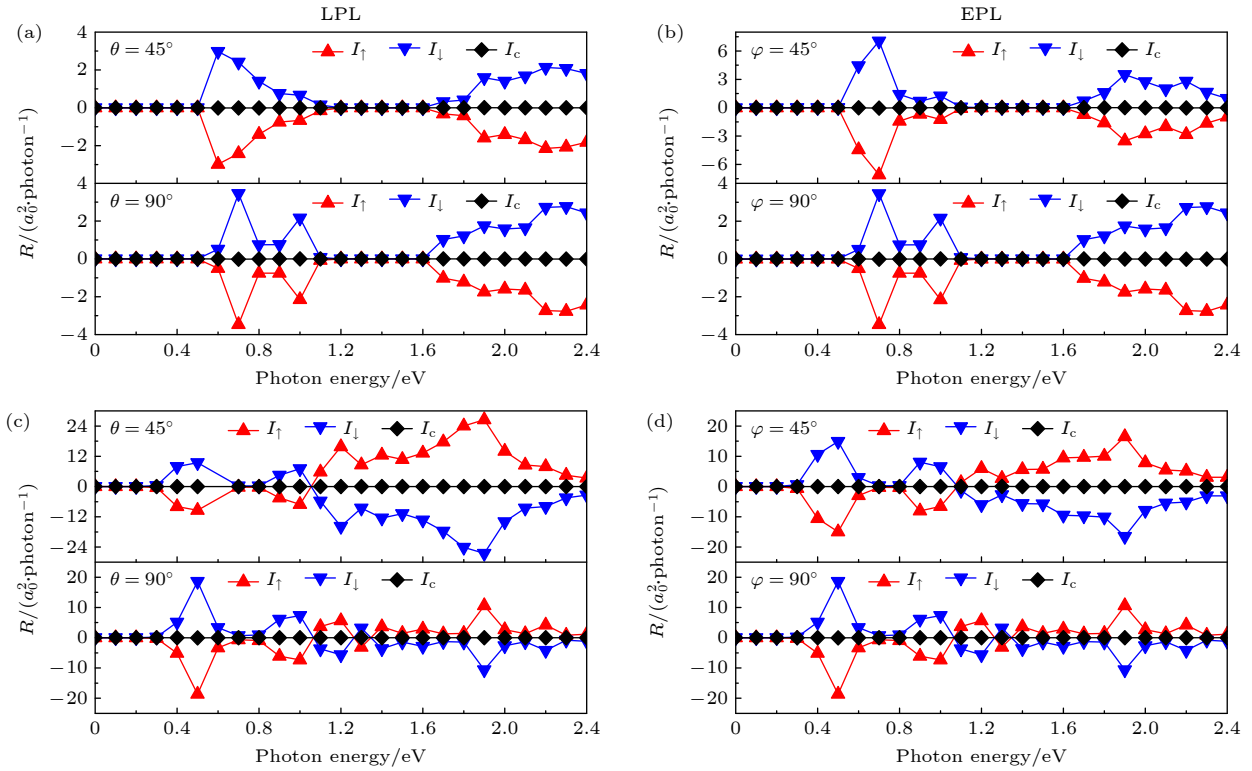


图3 (a) LPL 和 (b) EPL 照射下, $\theta/\varphi = 45^\circ$ 和 90° 时, F-2H 6ZCNR 光电流随 E_{ph} 的变化; (c) LPL 和 (d) EPL 照射下, $\theta/\varphi = 45^\circ$ 和 90° 时, F-2H 6ZSiNR 光电流随 E_{ph} 的变化

Fig. 3. Photocurrents as a function of the E_{ph} for F-2H 6ZCNR under (a) LPL and (b) EPL illumination for $\theta/\varphi = 45^\circ$ and 90° , and for F-2H 6ZSiNR under (c) LPL and (d) EPL illumination at $\theta/\varphi = 45^\circ$ and 90° .

自旋流. 在 $\theta = 45^\circ$ 和 90° 时, 无论是 LPL 还是 EPL, 光电流在 E_{ph} 为 0.5, 1.9 eV 等附近出现峰值.

为了进一步研究 θ/φ 对光电流的影响, 选取 $E_{ph} = 0.7$ eV/ 2.2 eV 这两个峰值, 计算了 F-2H 6ZCNR 器件的光电流随 θ/φ 的变化, 其中 θ/φ 的变化范围在 $0^\circ - 360^\circ$ 之间. 从图 4(a), (b) 可以看出, 当 $E_{ph} = 0.7$ eV/ 2.2 eV 时, 在 LPL (EPL) 照射下, F-2H 6ZCNR 器件的光电流满足 $I_\sigma = A \cos(2\theta + B) + C$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) ($I_\sigma = A \cos(2\varphi + B) + C$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$)), 并且对于任何 θ/φ , 两个自旋方向的光电流总是大小相同、方向相反, 说明纯自旋流的产生是与光的 θ/φ 无关. 对于 F-2H 6ZSiNR 器件, 选取 E_{ph} 为 0.5 eV 和 1.9 eV 两个峰值进行相同研究, 从图 4(c), (d) 可以发现, 在 LPL(EPL) 照射下, 两个自旋通道的光电流也都满足 $I_\sigma = A \cos(2\theta + B) + C$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) ($I_\sigma = A \cos(2\varphi + B) + C$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$)). 这里 A 为电流振荡振幅, B 为初始相位偏移量, C 为偏振无关直流背景电流. 对于任何 θ/φ , 其大小相等、方向相反, 都有纯自旋流的产生. 由此可证明对于 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR

光电器件, 纯自旋流的获取既不取决于它是 LPL 还是 EPL, 也不取决于 E_{ph} 或 θ/φ , 而是取决于自旋半导体材料的双极化自旋态和器件的空间反演对称性, 在不需 P-N 结或外部电场的情况下就可以利用 PGE 获得纯自旋流.

3.3 纯自旋流的物理机制

接下来从自旋密度分布和能带结构两个角度与空间反演对称性相结合分析器件获得纯自旋流这一特性的物理机制. F-2H 6ZCNR 和 F-2H 6ZSiNR 双极化自旋半导体器件的自旋密度分布如图 5 所示, 可以看到在具有空间反演对称性的系统中, 自旋密度分布也同样具有空间反演对称性. 因此, 器件产生的光电流总存在两个大小相同、方向相反的自旋分量, 即纯自旋流.

体系自旋半导体的特征在于其独特的能带结构, 即费米能级附近自旋极化率 100% 的双极化自旋态, 基于此构建的具有空间反演对称性的器件, 如能带图所示 (补充材料图 S2 (online)), 其左、右电极的自旋通道发生了交换. 如图 6 所示, 左电极中价带顶 (VBM) 为自旋向下, 导带底 (CBM) 为

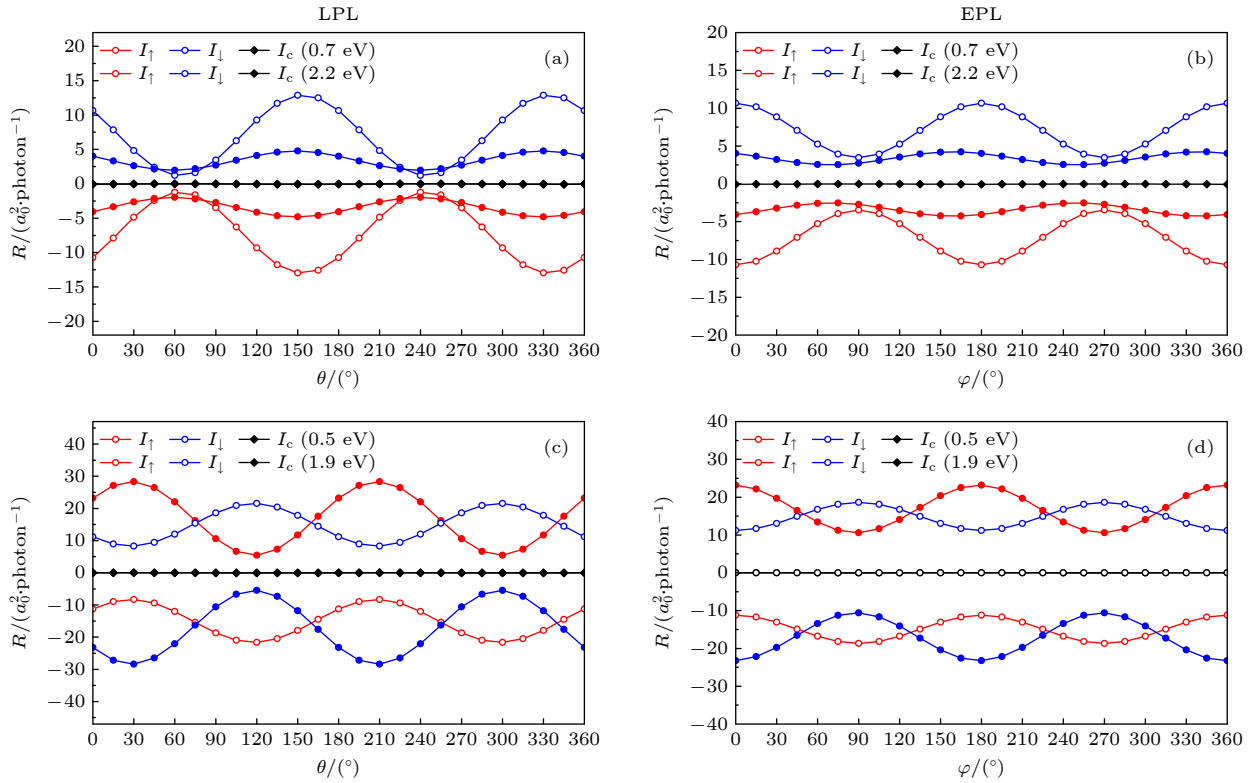


图 4 (a) LPL 和 (b) EPL 照射下, F-2H 6ZCNR 在 $E_{\text{ph}} = 0.7/2.2$ eV 时其光电流随 θ/φ 的变化; (c) LPL 和 (d) EPL 照射下, F-2H 6ZSiNR 在 $E_{\text{ph}} = 0.5/1.9$ eV 时其光电流随 θ/φ 的变化

Fig. 4. Photocurrents as a function of the θ/φ for F-2H 6ZCNR under (a) LPL and (b) EPL illumination with $E_{\text{ph}} = 0.7/2.2$ eV, and for F-2H 6ZSiNR under (c) LPL and (d) EPL illumination with $E_{\text{ph}} = 0.5/1.9$ eV.

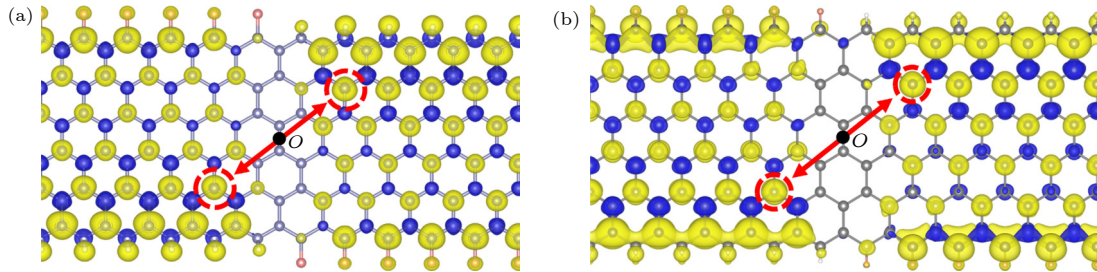


图 5 (a) F-2H 6ZCNR 和 (b) F-2H 6ZSiNR 器件中心散射区的自旋密度分布图(点 O 为对称中心, 黄色代表自旋向上, 蓝色代表自旋向下)

Fig. 5. Spin density distribution in the central scattering region of the (a) F-2H 6ZCNR and (b) F-2H 6ZSiNR devices (point O is the symmetry center, yellow represents spin up, blue represents spin down).

自旋向上, 右电极则交换为 VBM 为自旋向上, CBM 为自旋向下. 图中还绘制出光电流的产生过程, 在 E_{ph} 大于自旋带隙值的光照射下, 左电极 VBM 中具有自旋向下的电子进入中心区域的左半部分, 然后激发到 CBM; 然而, 由于在中心区域的右半部分和右电极中有自旋向下 CBM, 而在左电极中没有, 因此激发的自旋向下电子只能流向右侧. 而由于系统的空间反演对称性, 左、右电极两个自旋通道互换, 右电极 VBM 中自旋向上的电子进入中心区的右半部分, 然后激发到中心区左半部分的自旋

向上 CBM. 流入左、右电极的不同自旋方向自旋流大小相同.

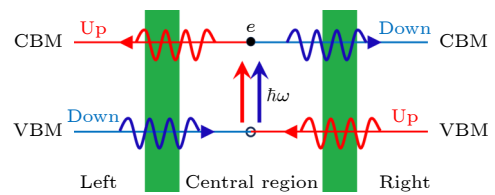


图 6 器件产生纯自旋光电流的物理过程.

Fig. 6. Physical process of generating pure spin photocurrent in devices.

为了进一步证明该方案的鲁棒性, 还研究了其他锯齿形石墨烯、硅烯纳米条带在氢原子和其他卤素原子 (Cl, Br) 边缘钝化下的光电流性能. 从电子性质的计算结果 (补充材料中表 S1 (online)) 以及 Cl-2H 6ZSiNR 和 Br-2H 6ZSiNR 的能带结构 (补充材料图 S3 (online)) 可以看到, Cl-2H 6ZSiNR, Br-2H 6ZSiNR 也满足双极化自旋半导体这一特征, 在费米能级附近都存在两条局域性较强、自旋极化率为 100% 且自旋方向相反的导带和价带. 将其搭建成如图 1 所示的光电器件, 研究其在 LPL 和 EPL 照射下, 相同 E_{ph} 不同 θ/φ 的光电流 (补充材料图 S4 (online)) 以及固定 θ/φ 为 45° 和 90° 时, 不同 E_{ph} 的光电流 (补充材料图 S5 (online)). 研究结果表明 Cl-2H 6ZSiNR, Br-2H 6ZSiNR 器件中纯自旋流的产生与 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR 器件一致, 不依赖 E_{ph} 、光的偏振类型以及 θ/φ 而稳定存在. 此外, 我们对氢原子和卤素原子边缘不对称钝化的扶手椅形石墨烯/硅烯纳米条带也进行了研究. 如补充材料图 S6 (online) 能带图所示, 其能带结构显示体系为非磁体系, 并非双极化自旋半导体, 不产生自旋流, 因此在文中不做详细讨论.

4 结 论

本文对锯齿形石墨烯或硅烯纳米条带分别用氢原子和卤素原子 (F, Cl, Br 原子) 进行不对称边缘钝化, 其电子结构的研究表明 F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR, Cl-2H 6ZSiNR, Br-2H 6ZSiNR 四种结构为双极化自旋半导体. 以此为基础进一步设计具有空间反演对称性结构的光电器件, 并用不同 E_{ph} 和 θ/φ 的 LPL 和 EPL 照射中心区域, 发现器件都有纯自旋流的产生, 并且其产生既不取决于光的偏振类型, 也不取决于 E_{ph} 和 θ/φ 而稳定存在. 通过能带结构以及自旋密度分布结合器件空间反演对称性对以上结论进行物理机制探讨, 纯自旋流产生及其鲁棒性源于器件结构的双极化自旋态和空间反演对称性. 以上探索结果为下一代自旋器件 (如超高密度自旋逻辑器件和存储器)、量子计算和纳米传感的设计提供了新的方案.

感谢鸿之微科技公司提供的计算服务.

参考文献

[1] Xiang G, Ren H T 2024 *Nanomater* **14** 1139

- [2] Amiri P K, Phatak C, Finocchio G 2024 *Annu. Rev. Mater. Res.* **54** 117
- [3] Hirohata A, Takanashi K 2014 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 193001
- [4] Sun Q F, Xie X C 2005 *Phys. Rev. B* **72** 245305
- [5] Chen X, Zhao H, Zhang Y, Liu L, Yang Z H, Song L L 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 198503 (in Chinese) [陈兴, 赵哈, 张艳, 刘露, 杨志宏, 宋玲玲 2021 物理学报 **70** 198503]
- [6] Liu L Q, Pai C F, Li Y, Tseng H W, Ralph D C, Buhrman R A 2012 *Science* **336** 555
- [7] Chen T S, Dumas R K, Eklund A, Muduli P K, Houshang A, Awad A A, Dürrenfeld P, Malm B G, Rusu A, Akerman J 2016 *Proc. IEEE* **104** 1919
- [8] Bhardwaj A, Kaur J, Wuest M, Wuest F 2017 *Nat. Commun.* **8** 1
- [9] Edwards E R J, Ulrichs H, Demidov V E, Demokritov S O, Urazhdin S 2012 *Phys. Rev. B* **86** 134420
- [10] Montoya E A, Chen J R, Ngelale R, Lee H K, Tseng H W, Wan L, Yang E, Braganca P, Boyraz O, Bagherzadeh N, Nilsson M, Krivorotov I N 2020 *Sci. Rep.* **10** 10220
- [11] Hübner J, Rühle W W, Klude M, Hommel D, Bhat R D R, Sipe J E, van Driel H M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 216601
- [12] Murakami S, Nagaosa N, Zhang S C 2003 *Science* **301** 1348
- [13] Rortais F, Vergnaud C, Marty A, Vila L, Attané J P, Widiez J, Zucchetti C, Bottegoni F, Jaffrès H, George J M, Jamet M 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 182401
- [14] Blake P, Hill E W, Castro Neto A H, Novoselov K S, Jiang D, Yang R, Booth T J, Geim A K 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 063124
- [15] Wu D, Cao X H, Chen S Z, Tang L M, Feng Y X, Chen K Q, Zhou W X 2019 *J. Mater. Chem. A* **7** 19037
- [16] Rozhansky I V, Mantsevich V N, Maslova N S, Arseyev P I, Averkiev N S 2023 *J. Magn. Magn. Mater.* **565** 170303
- [17] Jin H, Li J W, Wang T, Yu Y J 2018 *Carbon* **137** 1
- [18] Fu Z T, Yan P L, Li J, He C Y, Tao O Y, Tang C, Zhong J X 2024 *Adv. Electron. Mater.* **10** 2300884
- [19] Fu Z T, Yan P L, Li J, He C Y, Ouyang T, Zhang C X, Tang C, Zhong J X 2020 *Phys. Status Solidi RRL* **14** 2000395
- [20] Li B W, Zhu L, Wu C Y, Yao K L, Chang C R 2020 *Nanotechnology* **31** 145206
- [21] Zheng Z B, Zhu L, Cao Z L, Guo X H, Wang Y, Yao K L 2023 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25** 3979
- [22] Belinicher V I, Sturman B I 1980 *Sov. Phys. Usp.* **23** 199.
- [23] Tao X X, Jiang P, Hao H, Zheng X H, Zhang L, Zeng Z 2020 *Phys. Rev. B* **102** 081402
- [24] Jiang P, Kang L L, Tao X X, Cao N, Hao H, Zheng X H, Zhang L, Zeng Z 2019 *J. Phys.: Condens. Matter* **31** 495701
- [25] Jiang P, Tao X X, Hao H, Liu Y S, Zheng X H, Zeng Z 2021 *Npj Quantum Inf.* **7** 21
- [26] Fu Z T, Yan P L, Li J, Zhang S F, He C Y, Ouyang T, Zhang C X, Tang C, Zhong J X 2022 *Nanoscale* **14** 11316
- [27] Zhang L W, Hao Y J, Yang Y Q, Chen J, Zhang L 2025 *J. Mater. Chem. C* **13** 884
- [28] Tao X X, Jiang P, Dong Y J, Zhou J H, Yang X F, Zheng X H, Liu Y S 2024 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** 29718
- [29] Fu Z T, Yan P L, Li J, He C Y, Ouyang T, Zhang C X, Tang C, Zhong J X 2024 *Appl. Phys. Lett.* **124** 152401
- [30] Yin J L, Yan P L, Fu Z T, Li Z Q, Qi Z X, Tang C, Zhong J X, Li J 2025 *Appl. Phys. Lett.* **127** 052404
- [31] Piriz S, Fernández-Werner L, Pardo H, Jasen P, Faccio R, Mombrú A W 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 21474
- [32] Wagner P, Ewels C P, Adjizian J J, Magaud L, Pochet P, Roche S, Lopez-Bezanilla A, Ivanovskaya V V, Yaya A, Rayson M, Briddon P, Humbert B 2013 *J. Phys. Chem. C* **117** 26790

- [33] Kharwar S, Singh S, Jaiswal N K 2021 *Physics B* **615** 413072
 [34] Freysoldt C, Neugebauer J, Van de Walle C G 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 016402
 [35] Waldron D, Haney P, Larade B, MacDonald A, Guo H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 166804
 [36] Zhang L, Gong K, Chen J Z, Liu L, Zhu Y, Xiao D, Guo H 2014 *Phys. Rev. B* **90** 195428
 [37] Xie Y Q, Zhang L, Zhu Y, Liu L, Guo H 2015 *Nanotechnology* **26** 455202
 [38] Xu Z H, Luo B, Chen M Y, Xie W Z, Hu Y B, Xiao X B 2021 *Appl. Surf. Sci.* **548** 148751
 [39] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
 [40] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
 [41] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
 [42] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
 [43] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

Photo-induced pure spin current in graphene/silicene nanoribbons with asymmetric edge functionalization*

YANG Wenyue¹⁾ WU Xuanye¹⁾ YANG Zhi¹⁾ XU Lichun¹⁾ FENG Lin¹⁾
 CHEN Bo¹⁾ XUE Lin^{1)†} YANG Lingzhen^{1)2)‡}

¹⁾ (*College of Physics and Optoelectronics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

²⁾ (*Shanxi key Laboratory of Precision Measurement Physics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

(Received 16 December 2025; revised manuscript received 20 January 2026)

Abstract

The photogalvanic effect (PGE) has been demonstrated to induce pure spin current in low-dimensional spintronic devices possessing spatial inversion symmetry, independent of photon energy (E_{ph}) or incident light polarization/phase angles (θ/φ). The electronic properties of one-dimensional systems can be effectively modulated through edge passivation, rendering them more suitable for generating pure spin current. This study employs first-principles calculations based on density functional theory combined with the non-equilibrium Green's function method to systematically investigate zigzag graphene and silicene nanoribbons asymmetrically passivated at their edges with hydrogen and halogen atoms (F, Cl, Br). Calculations of the band structure, density of states, and magnetic moment reveal that four structures-F-2H 6ZCNR, F-2H 6ZSiNR, Cl-2H 6ZSiNR, and Br-2H 6ZSiNR-exhibit two strongly localized, fully spin-polarized (100% spin polarization) states with opposite spin orientations near the Fermi level, classifying them as bipolar spin semiconductors. Based on these structures, optoelectronic devices with spatial inversion symmetry are designed. The study shows that when the central region of the device is irradiated with linearly polarized light (LPL) or elliptically polarized light (EPL) at varying photon energies (E_{ph}) and incidence angles (θ/φ), photocurrents arise in both spin channels with equal magnitude but opposite directions, provided the photon energy exceeds the spin band gap. Consequently, the total charge current remains zero while a finite spin current persists, confirming the successful generation of pure spin current. Notably, this pure spin current is independent of the light polarization type, E_{ph} , and θ/φ . Further analysis of the spin density distribution, band structure, and spatial inversion symmetry elucidates the physical mechanism responsible for pure spin current generation. The robustness of this effect stems from the intrinsic bipolar spin states and the spatial inversion symmetry of the device. These findings not only provide a theoretical foundation for achieving pure spin current in one-dimensional graphene and silicene nanoribbons but also offer a promising strategy for advancing next-generation spintronic devices, quantum computing, and nanosensing technologies.

Keywords: one-dimensional nanoribbon, electronic properties, pure spin current, photogalvanic effect

DOI: [10.7498/aps.75.20251722](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251722)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251722](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251722)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62104168, 61975141, 61575137) and the Natural Science Foundation of Shanxi Province, China (Grant Nos. 20210302123201, 202303021211027, 202303021211028, 202503021211045).

† Corresponding author. E-mail: xuelin@tyut.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: office-science@tyut.edu.cn



不对称边缘修饰石墨烯/硅烯纳米条带中的光诱导纯自旋流

杨文跃 吴萱烨 杨致 徐利春 冯琳 陈波 薛林 杨玲珍

Photo-induced pure spin current in graphene/silicene nanoribbons with asymmetric edge functionalization

YANG Wenyue WU Xuanye YANG Zhi XU Lichun FENG Lin CHEN Bo XUE Lin YANG Lingzhen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 090702 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251722

CSTR: 32037.14.aps.75.20251722

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251722>

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

扶手椅型C₃B纳米带: 结构稳定性、电子特性及调控效应

Structural stability, electronic properties, and physical modulation effects of armchair-edged C₃B nanoribbons

物理学报. 2023, 72(11): 117101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222434>

边修饰GeS₂纳米带的电子特性及调控效应

Electronic properties and modulation effects on edge-modified GeS₂ nanoribbons

物理学报. 2024, 73(5): 056102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231670>

通过边缘修饰在非磁性石墨烯基单分子结中引入自旋的理论研究

Theoretical study of introducing spin into nonmagnetic graphene-based single-molecule junction by edge modifications

物理学报. 2023, 72(13): 138504 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230267>

自旋偏压驱动的硅烯和锗烯光控晶体管

Optically controlled silicene and germanene transistors driven by spin-bias

物理学报. 2022, 71(19): 198502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221047>

铁磁电极单层二硫化钼纳米带量子结构中的自旋开关效应和巨磁阻

Spin-switching effect and giant magnetoresistance in quantum structure of monolayer MoS₂ nanoribbons with ferromagnetic electrode

物理学报. 2023, 72(15): 157202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230483>

石墨烯条带各向异性堆垛结构中的半狄拉克电子态

Semi-Dirac electronic states in anisotropic stacked graphene structure

物理学报. 2025, 74(19): 197101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250758>