

非对称双氢钝化锯齿型 SiC 纳米带 复合功能自旋器件设计与输运*

周文¹⁾ 彭淑平¹⁾ 邓淑玲¹⁾ 伍丹¹⁾ 范志强^{1)†} 张小姣^{2)‡}

1) (长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114)

2) (湖南工商大学微电子与物理学院, 长沙 410205)

(2025 年 4 月 25 日收到; 2025 年 5 月 29 日收到修改稿)

采用密度泛函理论结合非平衡格林函数的第一性原理计算方法, 计算了碳化硅 (SiC) 单链连接非对称双氢钝化锯齿型 SiC 纳米带上方、中上、中下和下方位置的 4 种分子器件的自旋极化电流-电压特性, 开展非对称双氢钝化锯齿型 SiC 纳米带自旋器件设计与自旋输运性质研究. 结果显示 4 种器件在 P 磁构型下的最大自旋电流值依次减小, 但是均呈现单自旋方向的整流效应. SiC 单链通过中下位置连接的器件自旋向上电流呈现性能最好的整流效应, 最大整流比可以达到 6.9×10^6 . 更重要的是, 该器件自旋向上电流-电压曲线在负电压区间呈现出唯一的负微分电阻效应. 此外, SiC 单链通过中上位置连接的器件无论在 P 磁构型还是 AP 磁构型下都在负电压区间呈现完美的自旋过滤效应, 自旋过滤效率接近 100%. 本文将自旋整流和自旋过滤以及自旋整流和负微分电阻分别集成到单个分子器件中, 实现了具备两个功能的复合型自旋器件的理论设计, 本研究为今后实际制备和调控基于锯齿型 SiC 纳米带自旋器件提供了重要的解决方案.

关键词: SiC 纳米带, 自旋输运, 自旋整流, 自旋过滤

PACS: 85.65.+h, 85.75.-d, 81.05.ue

DOI: 10.7498/aps.74.20250553

CSTR: 32037.14.aps.74.20250553

1 引言

自从石墨烯这种蜂窝状的二维材料被成功分离以来, 二维材料由于具有优异的电子、物理和化学性质成为全球科学研究的热点^[1-3]. 与此同时, 利用石墨烯的单层结构可以构建富勒烯、碳纳米管、石墨烯量子点、纳米带和纳米角等不同维度的碳同素异形体^[4-9]. 目前, 科学家通过实验测量和理论模拟构建出基于石墨烯纳米带的多功能器件, 并观测到负微分电阻效应^[10,11]、整流效应^[12,13]、自旋过滤效应^[14]、热电效应^[15]、隧穿磁电阻效应^[16,17] 等诸多有趣的电子和磁输运性质. 此外, 通过多功能化

调控手段可以进一步丰富石墨烯纳米带的电磁属性^[18-22], 从而进一步扩大其应用潜力. 例如, 在石墨烯纳米带施加外部电场, 可以实现纳米带从金属性向半金属性的转变^[23]. 在石墨烯纳米带两端施加强磁场, 可以导致纳米带显示出巨大的磁阻效应^[24]. 研究人员发现没有磁性的石墨烯可以通过去除单个碳原子或将氢吸附在石墨烯上来产生不对称的电子, 从而产生磁性^[25]. 此外, 将 Be 原子等杂质原子放置在石墨烯纳米带中间或边缘, 可以调控扶手椅型纳米带的带隙, 还可以导致锯齿形纳米带表现出半金属行为, 并且沿边缘呈现磁性有序^[26]. 近期, 实验观察到相比于完美的石墨烯纳米带, 含有边缘缺陷的石墨烯纳米带具有更小的带隙宽度,

* 国家自然科学基金 (批准号: 12074046) 和湖南省研究生科研创新项目 (批准号: LXBZZ2024222) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zqfan@csust.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: xjzhang@hutb.edu.cn

因此增大了石墨烯纳米带的电导率^[27]. 近年来, 科学家逐渐将研究目标扩大到与石墨烯具有相同结构的二维石墨炔、C₃N、六方氮化硼 (h-BN)、碳化硅 (SiC)^[28-32]. 其中, SiC 因具有高强度、高硬度和耐高温等特性, 已经成为制备高功率、高频率和高温条件下运行的电子器件的新候选材料^[33,34]. SiC 的硅原子与碳原子同属于第IV主族, 不仅继承了石墨烯坚固的结构特点, 而且在非线性光学频率转换上具有潜在的应用^[35]. 另外, SiC 是为宽带隙半导体, 其可以克服碳化硅块体材料和无带隙石墨烯的电流限制, 拥有卓越的光电性能^[36-38].

众所周知, 二维 SiC 也可以如同石墨烯一样按照不同的边缘结构被裁剪为扶手椅型和锯齿型 SiC 纳米带, 并作为基本结构用于分子器件的设计^[39,40]. 目前, 已经提出了许多调控手段来调节 SiC 纳米带的电磁属性, 以促进 SiC 基纳米材料在多功能纳米器件中的应用. 最近的研究表明, 去掉锯齿形 SiC 纳米带边缘的氢原子即裸边纳米带或者对边缘碳、硅原子进行双氢原子钝化能改变其磁性, 并通过调节带宽有效地诱导半金属性行为^[41]. 另外, 在锯齿形 SiC 纳米带非对称边缘 Si 或 C 原子上进行双氢钝化会破坏原始对称氢化碳化硅纳米带的磁简并性, 并且在铁磁状态下均匀地展现出新颖的半金属行为^[42,43]. N/B 掺杂的非对称边缘氢化锯齿形碳化硅纳米带在铁磁或反铁磁态下表现出半金属、金属和双极半导体行为^[44]. 由于在锯齿形 SiC 纳米带非对称边缘进行调控可以导致其展现出更为丰富的磁性, 因此可以成为设计自旋器件的重要电极材料. 本文将 SiC 单链连接非对称双氢钝化锯齿型 SiC 纳米带上方、中上、中下和下方位置, 构建出 4 种分子器件并计算自旋极化输运性质, 探索不同位置连接对器件自旋输运性质的影响, 为实际制备和调控基于锯齿型 SiC 纳米带的复合型自旋器件提供了比较有价值的理论指导.

2 模型与方法

根据研究报道, 锯齿型 SiC 纳米带边界的 C 或 Si 原子从单氢原子钝化转变为双氢原子钝化后, 初始的 sp² 轨道杂化转变为 sp³ 轨道杂化, 表现出奇特的自旋极化能带结构^[42,43]. 图 1(a), (b) 为边界原子被双氢原子钝化的结构与自旋能带图. 锯齿型 SiC 纳米带边界的 Si 原子被双氢原子钝化后, 自

旋能带结构相对于锯齿型 SiC 纳米带整体向正能量方向移动, 费米能级处有自旋向上的能带穿过. 锯齿型 SiC 纳米带边界的 C 原子被双氢原子钝化后, 自旋能带结构相对于锯齿型 SiC 纳米带整体向负能量方向移动, 费米能级处有自旋向下的能带穿过. 因此, 本文选取下边界 Si 原子被双氢原子钝化和上边界 C 原子被双氢原子钝化的锯齿型 SiC 纳米带作为左右电极, 然后将 SiC 原子单链分别按照上方、中上、中下、下方 4 种不同连接位置连接在电极上构成分子器件, 如图 1(c) 所示. 为方便描述, 本文将以上 4 种连接方式构成的分子器件分别命名为 M1, M2, M3 和 M4. 已有报道表明, 链接方式也是调控微纳器件输运性质的重要手段, 因此通过构建 4 种链接位点不同的非对称结构来研究其对输运性质的影响. 本文采用密度泛函理论结合非平衡格林函数的第一性原理计算方法 (Quantum ATK 软件) 进行器件的几何结构优化和自旋输运特性计算^[45]. 在自旋广义梯度近似下, 采用 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函描述了交换和关联, 所有原子的轨道基函数选为双极化基组. 在结构弛豫过程中, 设定每个原子应力小于 0.02 eV/Å 的收敛条件. 自洽计算中, Monkhorst-Pack 在 x , y 和 z 方向的 K 点设定为 $1 \times 1 \times 150$, 其中 z 方向是器件自旋输运方向即纳米带的周期方向. 此外, 在 x 和 y 方向上设置至少 15 Å 的真空缓冲空间, 以避免周期性镜像的相互作用. 为了充分研究器件的自旋输运性质, 本文对电极设定了平行 (P) 和反平行 (AP) 两种磁构型. P 磁构型通过在两电极上施加同方向磁场来实现, 而 AP 磁构型通过在两电极上施加反方向磁场来实现, 如图 1 中箭头所示. 器件的自旋极化电流可由朗道尔公式计算得到^[46]:

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

其中 $T_{\sigma}(E, V_b)$ 是在偏压为 V_b 和能量为 E 时自旋电子透射系数, $f_L(E, V_b)$ 和 $f_R(E, V_b)$ 分别是左右电极的电子费米-狄拉克分布函数, $\mu_{L/R}$ 是左右电极的电化学势, σ 分别代表向上和向下两个自旋态.

3 结果与讨论

图 2 为 4 种器件在 P 磁构型下的零偏压自旋输运谱以及最大输运峰所处能量位置的输运本征态. 众所周知, 分子器件在低偏压下的输运性质主

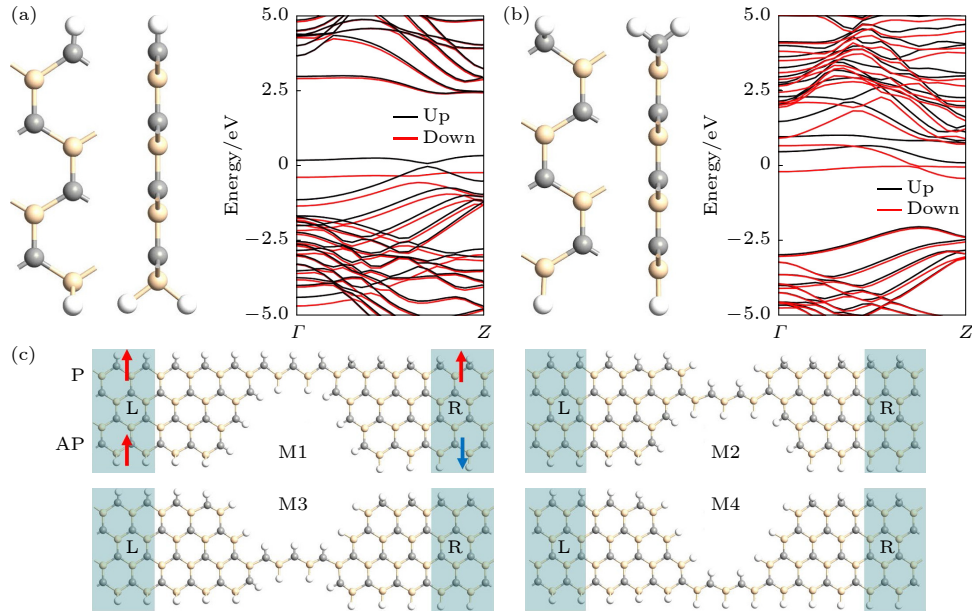


图 1 锯齿型 SiC 纳米带 (a) 下边界 Si 原子或 (b) 上边界 C 原子被双氢原子钝化的结构与自旋能带图; (c) SiC 单链连接非对称双氢钝化锯齿型 SiC 纳米带上、中上、中下和下方位置的分子器件模型, 阴影区域的 L, R 分别为器件的左右电极, 箭头分别表示 P 和 AP 磁构型的自旋方向

Fig. 1. Structure and spin band diagram of zigzag SiC nanoribbon with (a) lower boundary Si atoms or (b) upper boundary C atoms passivated by dihydrogen atoms; (c) device model of SiC single chain connected asymmetric dihydrogen passivated zigzag SiC nanoribbon at the upper, middle upper, middle lower and lower positions; L and R in the shaded area are the left and right electrodes of the device, and the arrows indicate the spin direction of P and AP magnetic configurations, respectively.

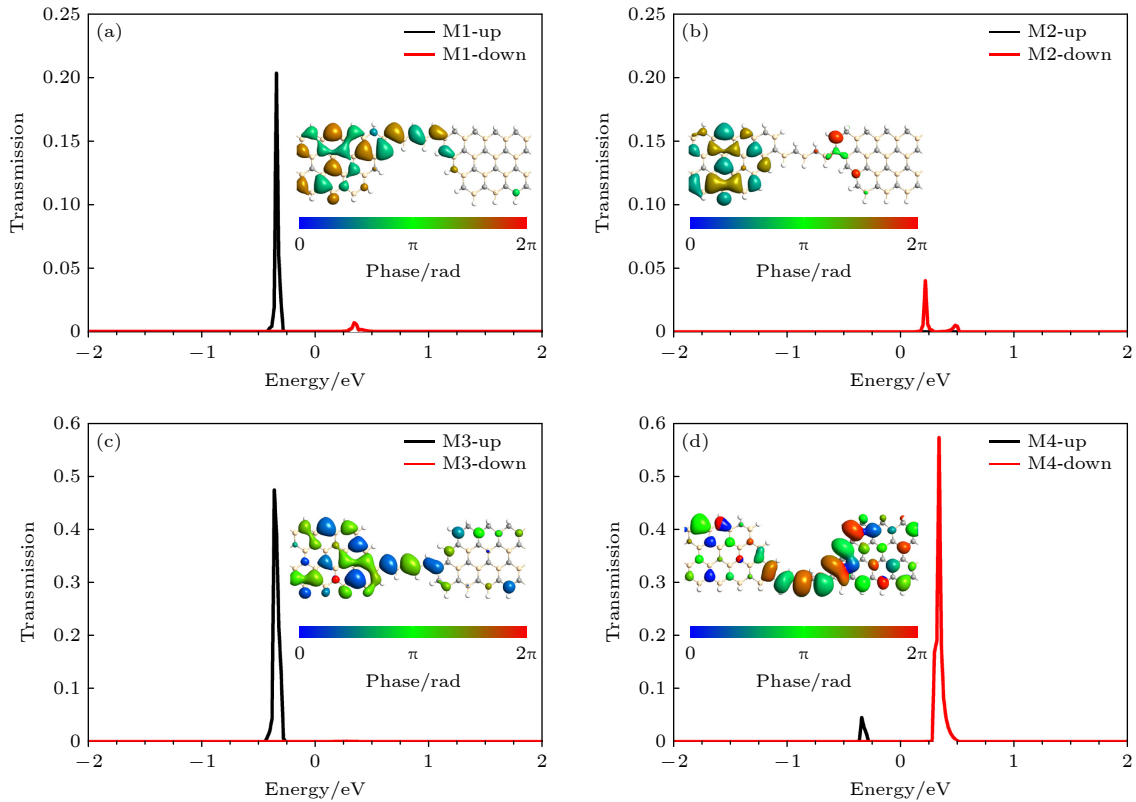


图 2 4 种分子器件在 P 磁构型的零偏压自旋输运谱和最大输运峰所处能量位置的输运本征态. Isovalue 取固定值为 0.2 (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4

Fig. 2. The zero-bias spin-resolved transmission spectra of four types of molecular devices and the transmission eigenstates at the energy position of the maximum transmission peak in P magnetic configuration. Isovalue is fixed on 0.2: (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4.

要取决于费米能级附近输运峰分布以及对应的输运峰系数. 器件的开关效应可以直观地用输运本征态来说明. 输运本征态通常由复数波函数描述, 在文中计算的为本征态的模平方, 对应该 k 点透射概率密度分布. 其中等值面对应波函数的波幅, 颜色则对应波函数的相位. 在图 2(a) 中, M1 在 -0.34 eV 存在一个自旋向上输运峰, 对应的输运本征态仅在左电极和 SiC 原子单链上呈现离域分布, 未能形成有效导通, 导致对应的输运峰系数为 0.21. 此外, M1 还存在一个自旋向下输运峰位于 0.38 eV, 输运峰系数仅为 0.01, 远小于自旋向上输运峰. 当 SiC 原子单链连接于中上位置, M2 在费米能级右侧仅存在两个峰值较小的自旋向下输运峰, 见图 2(b). 其中在 0.22 eV 自旋向下输运峰的输运本征态主要分布于左电极和右电极左侧边界, SiC 原子单链和右电极大部分区域没有输运本征态分布, 因此输运通道被严重抑制, 导致对应的输运系数仅为 0.04. 当 SiC 原子单链的连接位置变化到中下后, M3 仅在 -0.36 eV 存在一个自旋向上输运峰. 该输运峰的输运本征态在左电极和 SiC 原子单链呈现很好的离域分布并且在右电极上下边界也有分布, 导致对应的输运系数显著提升到 0.47, 见图 2(c). 当 SiC 原子单链连接于下方位置, M4 在 0.34 eV

存在一个自旋向下输运峰, 其输运系数为 0.58, 见图 2(d). 该输运峰的输运本征态在右电极和 SiC 原子单链上呈现很好的离域分布. 尽管在左电极上的输运本征态有局域的情况, 但是分布范围相比 M3 的右电极有明显扩大, 因此为 4 种器件中输运系数最大的输运峰. 此外, 在 -0.34 eV 能量位置存在一个自旋向上输运峰, 对应的输运系数仅为 0.05.

图 3 给出 4 种器件在 P 磁构型的电流-电压曲线. 4 种器件的最大自旋电流值会伴随连接位置从上方转变到下方而依次减小. 在图 3(a) 中, M1 在正偏压范围内的自旋向上和自旋向下电流非常微弱, 几乎不随电压的增大而增大. M1 在负偏压范围内的自旋向上和自旋向下电流最初都会随着负电压的增大而缓慢增大. 但是自旋向上电流会在 -0.3 V— 0.5 V 之间随着负电压的增大而逐渐减小, 而自旋向下电流会在 -0.3 V 以后随着负电压的增大而快速增长, 在 -0.5 V 时达到 -1115 nA. 这说明 M1 自旋向下的电流呈现优异的整流效应. 在图 3(b) 中, M2 的自旋向上电流在整个偏压区都非常微弱, 不随电压的增大而变化. 自旋向下电流在正偏压范围内电流非常微弱, 但是在负偏压范围内会随着电压的增大而快速上升, 并在 -0.5 V 时达到 -948 nA. 因此, M2 自旋向下的电流也呈现显著

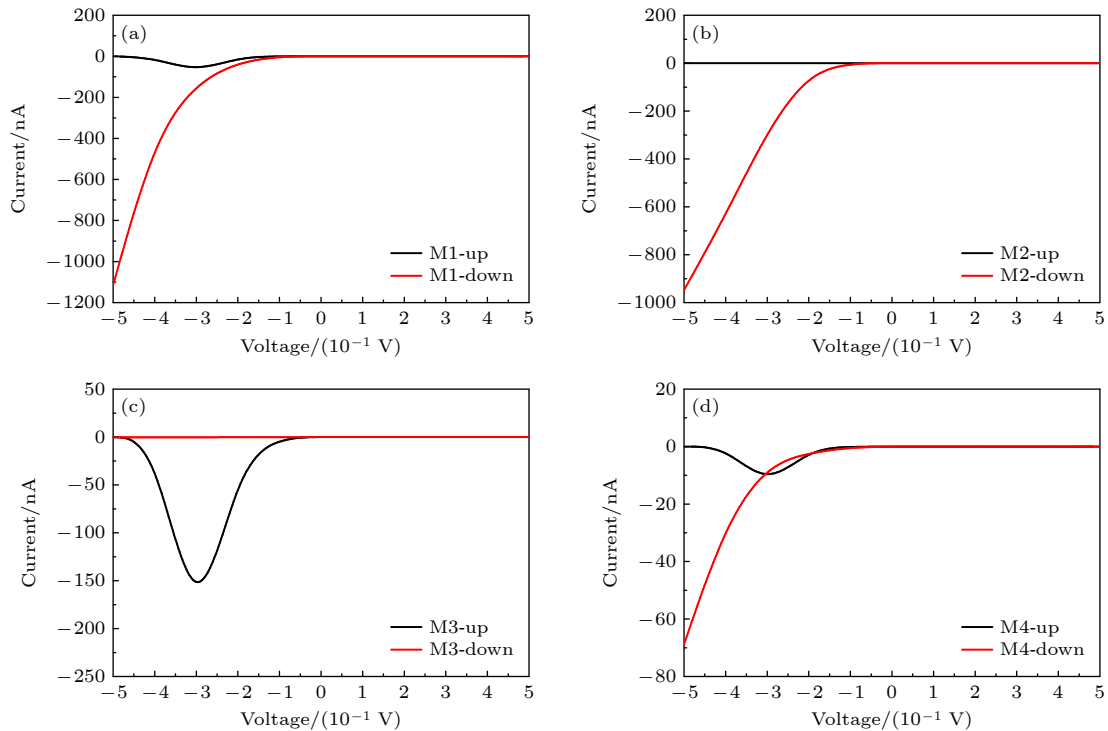


图 3 4 种分子器件在 P 磁构型的电流-电压曲线 (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4

Fig. 3. Current-voltage characteristics of four types of molecular devices in P-magnetic configuration: (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4.

的整流效应. 此外, 由于负偏压区间的自旋向下电流明显大于自旋向上电流, 因此 M2 还呈现出较为显著的自旋过滤效应. 在图 4(c) 中, M3 的自旋向下电流在整个偏压区都非常微弱, 不随电压的增大而变化. 自旋向上电流在正偏压范围内电流非常微弱, 但是在负偏压范围内会随着电压的增大而快速上升并在 -0.3 V 达到峰值 -219 nA . 接下来, 电流却随着电压的增大而快速下降至 -1 nA , 呈现出负微分电阻效应. 另外, 由于 M3 自旋向下电流在负偏压范围的数值始终大于正偏压范围内的数值, 因此同样呈现出自旋整流效应. 在图 4(d) 中, M4 的电流-电压特性与 M1 的相似, 区别在于电流值整体减小, 因此其自旋向下电流呈现自旋整流效应. 目前, 能够实现自旋电流整流的纳米器件或分子器件通常需要在器件电极处加上反平行磁场, 这无疑增加了实现的复杂性和难度. 本文的 4 种器件在 P 磁构型都会呈现单自旋方向的整流现象, 研究结果为今后实际制备和调控基于锯齿型 SiC 纳米带自旋器件提供了重要的解决方案.

图 4 为 P 磁构型下在 $-0.5\text{—}0.5\text{ V}$ 偏压范围的 M1, M2, M4 自旋向下和 M3 自旋向上输运谱等高线图, 以解释图 3 中的自旋整流行为. 根据朗道尔公式, 电流由偏压对应的能量窗口 (虚线之间区域) 内的总输运系数积分得到^[46]. 当施加在器件上的电压发生变化时, 输运峰会发生偏移, 甚至产生或消失, 导致相应的输运系数发生变化引起电流数值的变化. 图 4(a), (b) 显示 M1 和 M2 自旋向下电子在正偏压区域内的总输运系数非常小, 因此电流始终非常微弱. 但是当负偏压增加到 -0.2 V , 能量窗口内出现输运峰. 随着负偏压的继续增大, 输运峰始终存在于能量窗口内, 且对应的输运系数逐步增大. 所以能量窗口内的总输运系数随着偏压增大逐步增大, 导致电流快速增长. 因此, M1 和 M2 自旋向下电流-电压曲线呈现优异的整流效应. 在图 4(c) 中, M3 自旋向上电子在正偏压区域内的总输运系数非常小, 因此电流始终非常微弱. M3 在零偏压时位于 -0.36 eV 的自旋向上输运峰会随着负偏压的增大而逐步向费米能级移动, 且对应的输

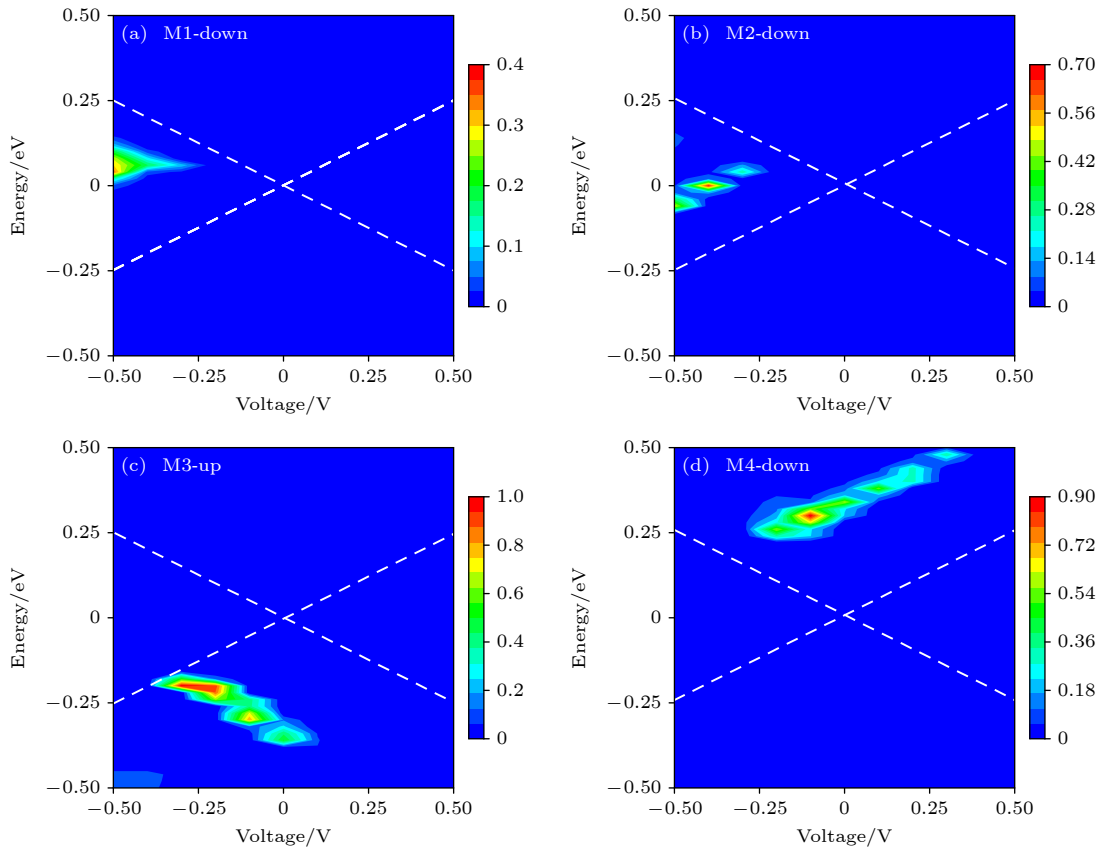


图 4 P 磁构型下在 $-0.5\text{—}0.5\text{ V}$ 偏压范围的输运谱等高线图 (a) M1 自旋向下; (b) M2 自旋向下; (c) M3 自旋向上; (d) M4 自旋向下

Fig. 4. Contour maps of the transmission spectra in the bias voltage range of -0.5 V to 0.5 V for in P magnetic configuration: (a) M1 spin-down; (b) M2 spin-down; (c) M3 spin-up; (d) M4 spin-down.

运系数也逐渐增大, 导致电流快速提升. 当负电压增大到 -0.3 V, 该输运峰已经移动到能量窗口边界且输运峰尾部进入能量窗口, 因此电流达到最大值. 然而随着负偏压的继续增大, 该输运峰快速降低, 对应的输运系数急速减小, 导致能量窗口内的总输运系数持续减小. 因此, M3 自旋向上电流随着负偏压的增加而快速减小, 导致电流-电压曲线呈现负微分电阻效应. 尽管负微分电阻效应导致器件电流在 -0.3 V 后减小, 但是负偏压范围内的电流始终大于正偏压范围内的电流, 因此 M3 仍然呈现出整流效应. M4 在零偏压时位于 0.34 eV 的自旋向下输运峰会随着负偏压的增大而逐步向费米能级移动, 但是对应的输运系数却先增大而后快速减小, 见图 4(d). 尽管输运峰的尾部逐渐靠近能量窗口导致器件电流会随着负偏压的增大而增大, 但是电流数值增大幅度很小, 且数值较低. 因此, M4 无论是电流数值还是整流效果都在 4 种器件中表现最不理想. 并且器件 M1 和 M2 在偏压窗口内出现了明显的输运峰, 而器件 M3 和 M4 输运峰并未进入偏压窗口内, 这也是 M3 和 M4 的电流

远小于 M1 和 M2 的原因.

为了更加全面探索 4 种器件的自旋输运性质, 图 5 给出 4 种器件在 AP 磁构型下的零偏压自旋输运谱以及最大输运峰所处能量位置的输运本征态. 4 种器件在 -2 — 2 eV 能量区间仅存在自旋向下输运峰, 这一现象与之前研究报道的非对称双氢钝化锯齿边碳化硅纳米带器件的结果一致^[43]. 原因是左电极的自旋向上态密度分布于负能量区域, 而右电极的自旋向上态密度分布于正能量区域, 因此无法在费米能级附近形成匹配, 导致自旋向上电子的传输被抑制^[43]. 如图 5(a) 所示, M1 在费米能级到 -0.5 eV 能量区间存在一个较宽的输运峰, 但是输运系数非常小. 位于 -0.28 eV 能量位置的输运本征态仅分布在左电极下部分和 SiC 原子单链上, 未能与右电极形成有效导通, 导致对应的输运峰系数仅为 0.023 . 此外, M1 在 0.38 eV 的输运峰系数更是低至 0.006 . 当 SiC 原子单链连接于中上位置, M2 在费米能级到 -0.5 eV 能量区间的输运峰高度与 M1 相比降低的非常显著, 未能超过 0.002 , 见图 5(b). M2 的最大输运峰出现在 0.28 eV, 对应的输运本

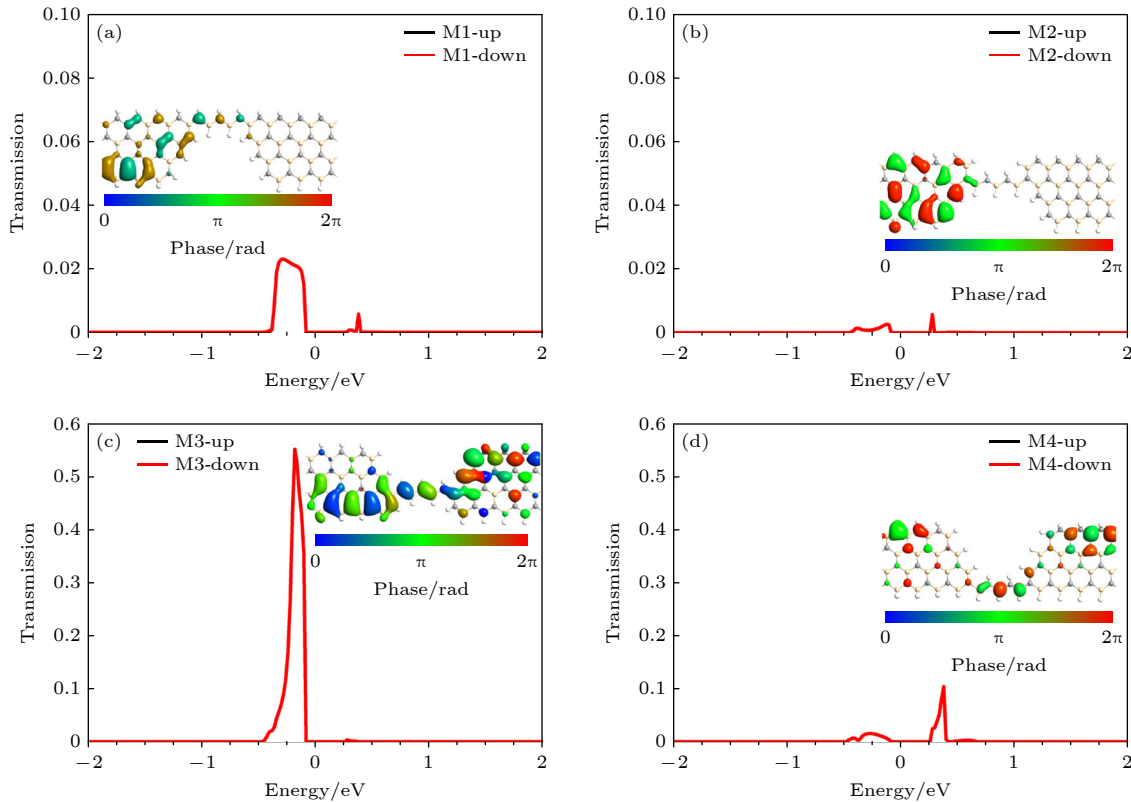


图 5 4 种器件在 AP 磁构型的零偏压自旋输运谱和最大输运峰所处能量位置的输运本征态. Isovalue 取固定值为 0.2 : (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4

Fig. 5. The zero-bias spin-resolved transmission spectra of four types of devices and the transmission eigenstates at the energy position of the maximum transmission peak in AP magnetic configuration. Isovalue is fixed on 0.2 : (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4.

征态集中分布于左电极, SiC 原子单链和右电极大部分区域没有输运本征态分布, 因此输运通道被严重抑制, 导致对应的输运系数仅为 0.006. 当 SiC 原子单链的连接位置变化到中下后, M3 在费米能级到 -0.5 eV 能量区间存在一个输运峰, 且输运峰高度与 M1 和 M2 相比有显著提升, 见图 5(c). 该输运峰的输运本征态在左电极下半部分和右电极上半部分以及 SiC 原子单链都呈现很好的离域分布, 导致在 -0.18 eV 的输运系数达到 0.55. 当 SiC 原子单链连接于下方位置, M4 的输运峰分布与 M1 的输运峰分布十分相似, 区别是在 0.38 eV 的输运峰高度相比 M1 有明显提升, 见图 5(d). 该输运峰的输运本征态分布在左右电极上半部分以及 SiC 原子单链, 导通性相比 M1 更加优异, 因此对应的输运系数达到了 0.11.

图 6 给出 4 种器件在 AP 磁构型的电流-电压特性. 4 种器件的自旋向上电流在整个偏压区都非常微弱, 几乎不随电压的增大而变化, 这与其零偏压自旋输运谱分析结论一致. M1, M2 和 M3 的电流-电压变化趋势十分接近. 自旋向下电流在负偏压区间首先会随着电压的增大而缓慢增长, 但是在电流在 -0.3 V 以后随着电压的增大而快速提升, 见图 6(a)—(c). 3 个器件在 -0.5 V 的最大电流值逐

步增大, 依次为 -226 nA, -1184 nA 和 -1403 nA. 尽管 M1, M2 和 M3 的电流在正偏压区间的增长幅度不如其在负偏压范围内的增长幅度, 但是始终随着电压的增大而缓慢增大. 3 个器件在负偏压范围的电流与正偏压范围的电流差异不显著, 因此呈现出的整流效应不显著. 另外, M2 和 M3 在负偏压范围内的自旋向上电流与自旋向上电流呈现明显的数值差异, 所以仍然表现出较好的自旋过滤效应. 在图 6(d) 中, M4 在正偏压范围内电流首先随着电压的增大而快速增长, 但是在 0.3 V 之后趋于饱和. 器件在负偏压范围内电流首先随着电压的增大而提升缓慢, 但是在 -0.3 V 之后随着电压的增大而快速提升. 由于电流在正负偏压范围的差异不显著, 因此未能表现出性能优异的整流效应.

为了对比 4 种器件在 P 磁构型呈现的自旋整流效应, 图 7 给出了对应的自旋电流整流比 ($R_R = |I(-V)/I(+V)|$) 来量化整流性能. M1 和 M2 自旋向下电流整流比随着偏压的增大而逐步提升, 并在 -0.5 V 分别达到 9.8×10^5 和 5.2×10^5 , 见图 7(a), (b). 图 7(c) 显示 M3 自旋向上电流整流比相比 M1 和 M2 更为优异, 在 -0.2 V 就达到 1.5×10^6 . 此后, 随着偏压的增大而继续提升, 在 -0.5 V 达到 6.9×10^6 . 图 7(d) 显示 M4 自旋向下电流整流比同样随着偏

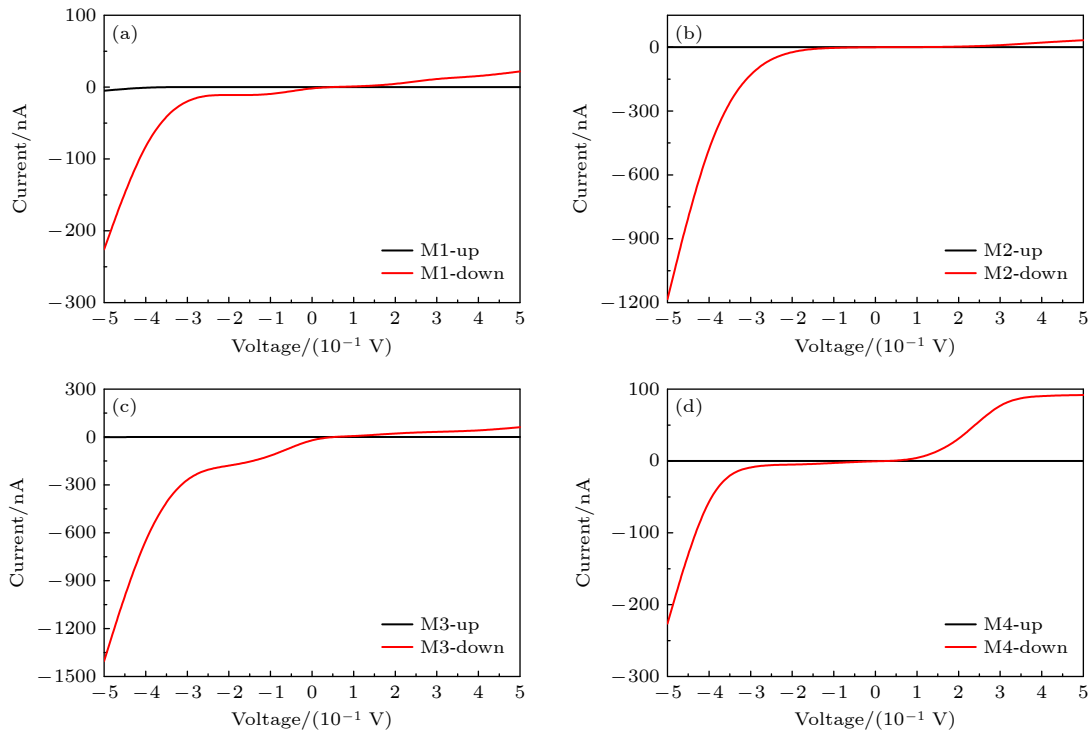


图 6 4 种器件在 P 磁构型的电流-电压特性 (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4

Fig. 6. Current-voltage characteristics of four types of devices in AP-magnetic configuration: (a) M1; (b) M2; (c) M3; (d) M4.

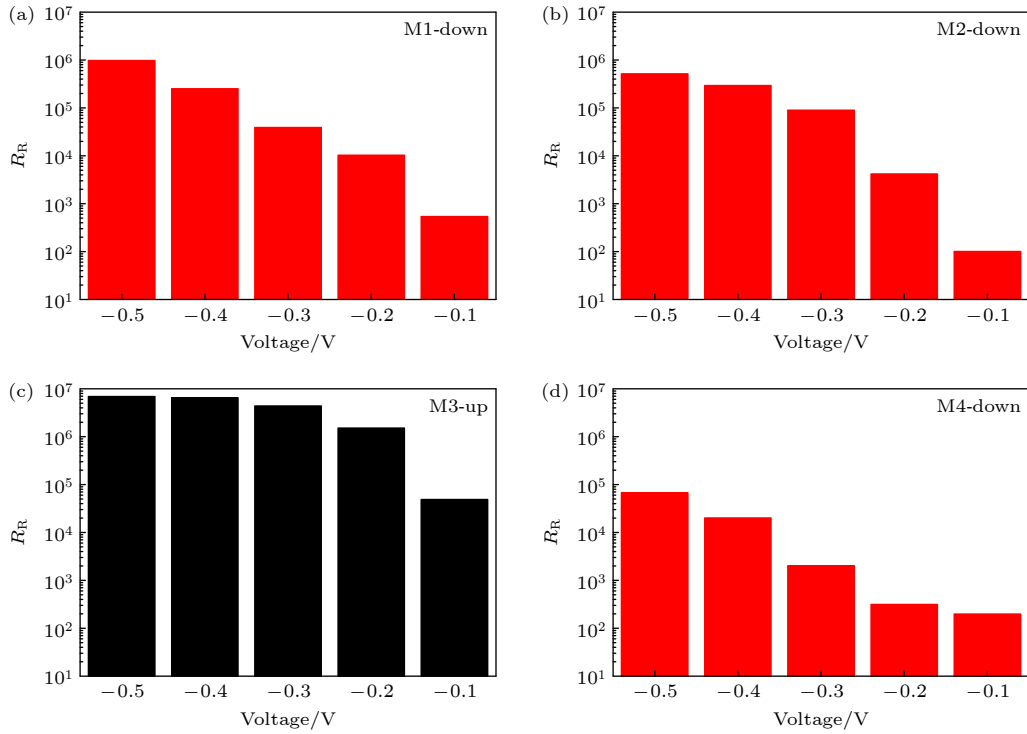


图 7 4 种器件在 P 磁构型的整流比

 Fig. 7. Rectification ratios (R_R) of four types of devices in P-magnetic configuration.

压的增大而逐步提升,但是整流比数值为 4 种器件中最小,在 -0.5 V 仅达到 6.7×10^4 。此外, M4 在负偏压范围内的自旋向下电流数值也是 4 种器件中最小,因此相比其他器件整流性能最不理想。

无论是 P 磁构型还是 AP 磁构型, M2 和 M3 在负偏压区域都表现出很好的自旋过滤效应。为了定量衡量自旋过滤性能,给出了两个器件的自旋过滤效率:

$$\text{SFE} = (I_{\text{down}} - I_{\text{up}}) / (I_{\text{down}} + I_{\text{up}}) \times 100\%.$$

无论是 P 磁构型还是 AP 磁构型, M2 在负偏压范围的自旋过滤效率几乎接近 100%。M3 在负偏压范围的 P 磁构型自旋过滤效率仅在 -0.3 V 接近 100%, 在 -0.4 V 略有降低,但是在 -0.5 V 只达到了 84%。主要原因是 M3 自旋向上电流在 -0.3 V 之后随着电压的增大而下降,呈现出负微分电阻效应。M3 在负偏压范围的 AP 磁构型自旋过滤效率几乎接近 100%, 呈现出优异的自旋过滤性能。

4 结 论

利用密度泛函理论结合非平衡格林函数的第一性原理计算方法,本文开展了非对称双氢钝化锯

齿型 SiC 纳米带自旋器件设计与自旋输运研究。选取锯齿型 SiC 纳米带为电极,将 SiC 原子单链分别按照上方、中上、中下、下方不同连接位置进行连接构成 M1, M2, M3, M4 四种分子器件。研究发现器件在 P 磁构型的最大自旋电流值会伴随连接位置从上方转变到下方而依次减小。M1, M2 和 M4 三种器件的自旋向下电流-电压曲线呈现显著的自旋整流效应,最大整流比分别为 9.8×10^5 , 5.2×10^5 和 6.7×10^4 。M3 自旋向上电流-电压曲线呈现性能最好的整流效应,最大整流比可以达到 6.9×10^6 。更重要的是,该器件自旋向上电流-电压曲线在负电压区间呈现出唯一的负微分电阻效应。4 种器件在 AP 磁构型的自旋向上电流在整个偏压区都非常微弱,几乎不随电压的增大而变化。尽管 4 种器件自旋向下电流在正负偏压范围存在差异,但不显著,因此未能表现出性能优异的整流效应。此外, M2 无论在 P 磁构型还是 AP 磁构型下都在负电压区间呈现完美的自旋过滤效应,自旋过滤效率接近 100%。本文将自旋整流和自旋过滤以及自旋整流和负微分电阻分别集成到单个分子器件中,实现了具备两个功能的复合型自旋器件的理论设计,研究结果为今后实际制备和调控基于锯齿型 SiC 纳米带自旋器件提供了重要的解决方案。

参考文献

- [1] Allen M J, Tung V C, Kaner R B 2010 *Chem. Rev.* **110** 132
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D E, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [3] Ruiz-Puigdollers A, Gamallo P 2017 *Carbon* **114** 301
- [4] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [5] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [6] Barone V, Hod O, Scuseria G E 2006 *Nano Lett.* **6** 2748
- [7] Li X L, Wang X R, Zhang L, Lee S, Dai H J 2008 *Science* **319** 1229
- [8] Berger C, Song Z M, Li X B, Wu X S, Brown N, Naud C, Mayou D, Li T, Hass J, Marchenkov A N 2006 *Science* **312** 1191
- [9] Lee C, Wei X, Kysar J W, Hone J 2008 *Science* **321** 385
- [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] Xing H Y, Zhang Z H, Wu W J, Guo Z Y, Ru J D 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 038502 (in Chinese) [邢海英, 张子涵, 吴文静, 郭志英, 茹金豆 2023 物理学报 **72** 038502]
- [12] Liu Q, Li J J, Wu D, Deng X Q, Zhang Z H, Fan Z Q, Chen K Q 2021 *Phys. Rev. B* **104** 045412
- [13] Yuan L, Nerngchamnong N, Cao L, Hamoudi H, Del Barco E, Roemer M, Sriramula R K, Thompson D, Nijhuis C A 2015 *Nat. Commun.* **6** 6324
- [14] Koga T, Nitta J, Takayanagi H, Datta S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 126601
- [15] Zhang K B, Tan S H, Peng X F, Long M Q 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 097301
- [16] Gould C, Ruster C, Jungwirth T, Girgis E, Schott G, Giraud R, Brunner K, Schmidt G, Molenkamp L 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 117203
- [17] Sharma M, Wang S X, Nickel J H 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 616
- [18] Guan J, Chen W, Li Y F, Yu G T, Shi Z M, Huang X R, Sun C C, Chen Z F 2013 *Adv. Funct. Mater.* **23** 1507
- [19] Zhao J, Zeng H, Wang D, Yao G 2020 *Appl. Sur. Sci.* **519** 146203
- [20] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Nature* **444** 347
- [21] Song Y, Wang C K, Chen G, Zhang G P 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 18760
- [22] Wu M, Wu X, Zeng X C 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 3937
- [23] Kan E J, Li Z, Yang J, Hou J 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 243116
- [24] Rezapour M R, Yun J, Lee G, Kim K S 2016 *JPCL* **7** 5049
- [25] González-Herrero H, Gómez-Rodríguez J M, Mallet P, Moaied M, Palacios J J, Salgado C, Ugeda M M, Veuillen J Y, Yndurain F, Brihuega I 2016 *Science* **352** 437
- [26] Lopez-Urias F, Terrones M, Terrones H 2015 *Carbon* **84** 317
- [27] Tang M, Yuan Z, Sun J, Sun X, He Y, Zhou X 2023 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **32** 015008
- [28] Lou P, Lee J Y 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 12637
- [29] Li J J, Liu Q, Wu D, Deng X Q, Zhang Z H, Fan Z Q 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 078501 (in Chinese) [李佳锦, 刘乾, 伍丹, 邓小清, 张振华, 范志强 2022 物理学报 **71** 078501]
- [30] Zeng J, Zhou Y H 2020 *Physica E* **118** 113861
- [31] Sprinkle M, Ruan M, Hu Y, Hankinson J, Rubio-Roy M, Zhang B, Wu X, Berger C, De Heer W A 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 727
- [32] Li X B, Liu S Q, Huang Y, Ma Y, Ding W C 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 057101 (in Chinese) [李晓波, 刘帅奇, 黄演, 马玉, 丁文策 2025 物理学报 **74** 057101]
- [33] Elasser A, Chow T P 2002 *Proc. IEEE* **90** 969
- [34] Narushima T, Goto T, Hirai T, Iguchi Y 1997 *Mater. Trans. JIM* **38** 821
- [35] Shi Z, Zhang Z, Kutana A, Yakobson B I 2015 *ACS Nano* **9** 9802
- [36] Lin X, Lin S, Xu Y, Hakro A A, Hasan T, Zhang B, Yu B, Luo J, Li E, Chen H 2013 *J. Mater. Chem. C* **1** 2131
- [37] Islam M R, Islam M S, Ferdous N, Anindya K N, Hashimoto A 2019 *J. Comput. Electron.* **18** 407
- [38] Chabi S, Kadel K 2020 *Nanomaterials* **10** 2226
- [39] Bekaroglu E, Topsakal M, Cahangirov S, Ciraci S 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075433
- [40] Deng S L, Zhou W, Liu Q, Wu D, Fan Z Q, Xie F 2024 *Physica B* **695** 416586
- [41] Ding Y, Wang Y L 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 013102
- [42] Cui X Q, Liu Q, Fan Z Q, Zhang Z H 2020 *Org. Electron.* **84** 105808
- [43] Cui X Q, Li J J, Liu Q, Wu D, Xie H Q, Fan Z Q, Zhang Z H 2022 *Physica E* **138** 115098
- [44] Taghizade N, Faizabadi E 2021 *Mater. Sci. Eng. B* **271** 115253
- [45] Smidstrup S, Markussen T, Vancraeyveld P, Wellendorff J, Schneider J, Gunst T, Verstichel B, Stradi D, Khomyakov P A, Vej-Hansen U G, Lee M E, Chill S T, Rasmussen F, Penazzi G, Corsetti F, Ojanperä A, Jensen K, Palsgaard M L N, Martinez U, Blom A, Brandbyge M, Stokbro K 2019 *J. Phys. Condens. Matter* **32** 015901
- [46] Büttiker M, Imry Y, Landauer R, Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207

Design and transport properties of multifunctional spintronic devices based on zigzag SiC nanoribbon via edge asymmetric dual-hydrogenation*

ZHOU Wen¹⁾ PENG Shuping¹⁾ DENG Shuling¹⁾

WU Dan¹⁾ FAN Zhiqiang^{1)†} ZHANG Xiaojiao^{2)‡}

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

2) (*School of Microelectronics and Physics, Hunan University of Technology and Business, Changsha 410205, China*)

(Received 25 April 2025; revised manuscript received 29 May 2025)

Abstract

In this paper, the first-principles method based on density functional theory and non-equilibrium Green's function is used to design and investigate the transport properties of multifunctional spintronic devices based on zigzag SiC nanoribbon via edge asymmetric dual-hydrogenation. The zigzag SiC nanoribbons via edge asymmetric dual-hydrogenation are selected as electrodes, and SiC atomic single chains are connected to the above, upper-middle, lower-middle, and below the positions of the electrodes to form four molecular devices: M1, M2, M3 and M4. In this study, it is found that the maximum spin current value of the device in the P-magnetic configuration decreases sequentially with the connection position transitioning from top to bottom. The spin-down current-voltage curves of M1, M2, and M4 exhibit significant spin rectification effects, with maximum rectification ratios of 9.8×10^5 , 5.2×10^5 , and 6.7×10^4 , respectively. The spin-up current-voltage curve of M3 shows the best rectification effect, with a maximum rectification ratio of 6.9×10^6 . More importantly, the spin-up current-voltage curve of M3 exhibits a unique negative differential resistance effect in the negative voltage range. In the AP magnetic configuration, the spin-up currents of the four devices are very weak throughout the bias region and hardly changes with the increase of voltage. Although there are differences in the spin-down current between the four devices within the positive and negative bias ranges, they are not significant, thus failing to demonstrate excellent rectification effects. In addition, M2 exhibits perfect spin filtering effect in the negative voltage range in both P and AP magnetic configurations, with a spin filtering efficiency close to 100%. This work integrates spin rectification and spin filtering, as well as spin rectification and negative differential resistance, into a single molecular device, achieving the theoretical design of a composite spin device with two functions. The research results provide an important solution for practically preparing and controlling zigzag SiC nanoribbon spin devices in the future.

Keywords: SiC nanoribbon, spin transport, spin rectification, spin filtering

PACS: 85.65.+h, 85.75.-d, 81.05.ue

DOI: [10.7498/aps.74.20250553](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250553)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250553](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250553)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12074046) and the Postgraduate Scientific Research and Innovation Program of Hunan Province, China (Grant No. LXBZZ2024222).

† Corresponding author. E-mail: zqfan@csust.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: xjzhang@hutb.edu.cn

非对称双氢钝化锯齿型SiC纳米带复合功能自旋器件设计与输运

周文 彭淑平 邓淑玲 伍丹 范志强 张小姣

Design and transport properties of multifunctional spintronic devices based on zigzag SiC nanoribbon via edge asymmetric dual-hydrogenation

ZHOU Wen PENG Shuping DENG Shuling WU Dan FAN Zhiqiang ZHANG Xiaojiao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 168502 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250553

CSTR: 32037.14.aps.74.20250553

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250553>

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

蒽二噻吩分子连接铁磁锯齿边碳化硅纳米带的巨幅度自旋整流

Giant rectification of ferromagnetic zigzag SiC nanoribbons connecting anthradithiophene molecules

物理学报. 2022, 71(7): 078501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212193>

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>

溶液旋涂法制备Bi_xY_{3x}Fe₅O₁₂薄膜的自旋输运特性

Spin transport properties of Bi_xY_{3x}Fe₅O₁₂ thin films prepared by spin coating

物理学报. 2023, 72(1): 017201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221183>

不同方向局域交换场对锡烯自旋输运的影响

Effects of local exchange field in different directions on spin transport of stanene

物理学报. 2022, 71(14): 147201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220277>

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>

圆偏振光场调控的锡烯纳米带热自旋输运

Circularly-polarized light controlled thermal spin transport in stanene nanoribbon

物理学报. 2021, 70(14): 147301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210197>