

doi:10.3969/j.issn.1673-9833.2020.05.003

# 硼氮掺杂对锯齿型硅烯纳米带器件中 自旋输运的调控

张 丹<sup>1</sup>, 崔丽玲<sup>1</sup>, 谭金桃<sup>1</sup>, 肖 金<sup>1</sup>, 何 军<sup>1</sup>, 范志强<sup>2</sup>, 罗小刚<sup>3</sup>

(1. 湖南工业大学 理学院, 湖南 株洲 412007; 2. 长沙理工大学 物理与电子科学学院, 湖南 长沙 410114;  
3. 邵阳县岩口铺镇初级中学, 湖南 邵阳 422106)

**摘 要:** 采用密度泛函理论和非平衡格林函数方法, 研究了硼和氮原子单独掺杂对锯齿型硅烯纳米带器件中自旋输运行为的调控作用。研究发现硼和氮原子都是掺杂在锯齿型硅烯纳米带的边缘最稳定。硼和氮原子的掺杂区域对器件的自旋输运性质起着关键作用: 当掺杂在器件的散射区时, 可发现微小的自旋劈裂现象; 但是当掺杂在电极区时, 会出现较明显的自旋劈裂现象, 相应的自旋过滤效率可高达 100%。

**关键词:** 锯齿型硅烯纳米带器件; 掺杂; 第一性原理; 自旋输运性质; 自旋过滤效应

中图分类号: O47

文献标志码: A

文章编号: 1673-9833(2020)05-0015-06

**引文格式:** 张 丹, 崔丽玲, 谭金桃, 等. 硼氮掺杂对锯齿型硅烯纳米带器件中自旋输运的调控 [J]. 湖南工业大学学报, 2020, 34(5): 15-20.

## Spin Transport Effects of Boron and Nitrogen Doping in Zigzag Silicene Nanoribbons Devices

ZHANG Dan<sup>1</sup>, CUI Liling<sup>1</sup>, TAN Jintao<sup>1</sup>, XIAO Jin<sup>1</sup>, HE Jun<sup>1</sup>, FAN Zhiqiang<sup>2</sup>, LUO Xiaogang<sup>3</sup>

(1. College of Science, Hunan University of Technology, Zhuzhou Hunan 412007, China;  
2. School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China;  
3. Shaoyang Yankoupu Junior Middle School, Shaoyang Hunan 422106, China)

**Abstract:** By adopting density functional theory (DFT) and non-equilibrium Green's function (NEGF) method, an investigation has been made of the effects of boron and nitrogen atoms doping on the spin transport behavior of zigzag silene nanoribbon devices. It is found that the boron and nitrogen atoms are the most stable doped on the edge of the zigzag silene nanoribbons, with the doping region of boron and nitrogen atoms playing a key role in the spin transport properties of the device. When doped in the scattering region of the device, tiny spin splitting can be found. However, when doped in the electrode regions, an obvious spin-splitting effect can be detected, with a corresponding spin filtration efficiency as high as 100%.

**Keywords:** zigzag silicene nanoribbon device; doping; first-principle; spin transport property; spin-filtering effect

收稿日期: 2019-11-22

**基金项目:** 国家自然科学基金应急管理基金资助项目 (11747095), 国家自然科学基金资助项目 (11704114), 湖南省自然科学基金资助项目 (2017JJ3063, 2019JJ50125, 2019JJ60067), 湖南省教育厅科学研究基金资助项目 (18C0500)

**作者简介:** 张 丹 (1988-), 女, 河南新乡人, 湖南工业大学讲师, 博士, 主要从事纳米材料电学性质方面的教学与研究, E-mail: zhangdan.wlx@163.com

**通信作者:** 何 军 (1984-), 男, 湖南益阳人, 湖南工业大学副教授, 博士, 硕士生导师, 主要从事纳米与分子电子学方面的教学与研究, E-mail: hejun@hut.edu.cn

## 1 研究背景

硅烯由硅原子按蜂窝状的六角结构排列而成,它与石墨烯有着极其相似的结构,只是相邻硅原子上下呈褶皱状排列<sup>[1]</sup>,这不但使得硅烯与石墨烯具有相类似的电学性质,而且还使其在某些方面表现出优于石墨烯的性质。硅烯中原子间的成键方式介于  $sp^2$  及  $sp^3$  间,这种独特的结构可令它在外加垂向的电场作用下有带隙受调控的优良特性<sup>[2]</sup>,另外也会使硅烯拓扑绝缘体向能带绝缘体转变。更重要的是,硅烯里面存在着强于石墨烯的自旋轨道耦合现象,致使其能带在狄拉克高对称点处打开一个 1.55 meV 的带隙<sup>[3]</sup>。加之硅烯与传统硅工业的兼容性,使得其在半导体器件应用方面有广阔空间。

硅烯按照不同方向可被裁剪成不同类型的硅烯纳米带,较常见的两种为扶手椅型和锯齿型,且硅烯纳米带在实验室中已被成功合成<sup>[4-7]</sup>。理论研究表明,扶手椅型硅烯纳米带在本征态下的电子结构呈现出非磁性的半导体行为,且带隙随带宽的增加呈现出以 3 为周期的震荡现象<sup>[8-9]</sup>。而对于锯齿型硅烯纳米带,其边缘采用氢原子钝化后,研究者发现其磁性主要聚集在带的两个边缘,且磁性相反(即反铁磁态)时体系能量最低,但是自旋向上和向下的能带是简并的<sup>[10]</sup>,这限制了其在自旋电子器件方面的应用,因此许多学者开始探究打破自旋简并的方法。目前,研究者们已发现多种方法。外加横向电场可使反铁磁下自旋向下的带隙逐步减小,直至为 0,而自旋向上的带隙基本不变,因此显示出半金属性<sup>[10]</sup>。Ding Y. 等<sup>[11]</sup>通过对锯齿型硅烯纳米带的两个边缘进行非对称氢化而得到双极磁性半导体,进而探究了其自旋输运性质,发现 100% 的自旋过滤效应<sup>[12]</sup>。R. Farghadan 在硅烯纳米带中发现了双极磁性半导体<sup>[13]</sup>。此外,适当的掺杂或吸附也可使锯齿型硅烯纳米带由自旋简并的半导体转变为高自旋极化的半金属<sup>[14-16]</sup>。也有研究表明边缘各种缺陷重构也可引入自旋<sup>[17-18]</sup>。

本文主要探究硼和氮原子掺杂对锯齿型硅烯纳米带器件自旋输运性质的影响,发现硼和氮原子的掺杂区域对器件的自旋输运性质起着关键作用:当掺杂在器件的散射区,可发现微小的自旋劈裂现象;但是当硼和氮原子单独掺杂在其中一个电极区时,出现了较明显的自旋劈裂现象,相应的自旋过滤效率可达 100%。

## 2 计算方法

周期体系结构的优化和电子结构的计算采用基

于密度泛函理论的 Atomistix ToolKit (ATK) 软件包<sup>[19-20]</sup>。波函数的展开按照 double-zeta polarized 基组,电子间的交换关联势选取广义梯度近似下的 Predew-Burke-Emzerh 形式。自洽计算的平面波的截断能为  $4.35 \times 10^{-16}$  J,  $K$  点的空间撒点网格为  $1 \times 1 \times 21$ ,为了避免相邻层的相互作用,在  $x$  和  $y$  方向上的真空层选取  $2 \times 10^{-9}$  m。结构优化的收敛判据为每个原子的受力小于  $1.6 \times 10^{-11}$  J/m。自旋电子输运性质的计算是基于密度泛函理论和非平衡格林函数方法,布里渊区积分  $K$  点沿  $x$ 、 $y$  和  $z$  3 个方向的抽样为  $1 \times 1 \times 100$ ,  $z$  方向为电子传输的方向。计算过程中,温度保持不变,设为常温 300 K。对于器件结构的优化条件为每个原子受力小于  $1.6 \times 10^{-11}$  J/m。自旋电流的计算采用 Landauer-Büttiker 方程<sup>[21]</sup>:

$$I_{\sigma}(V_b) = \frac{e}{h} \int_{\mu_L(V_b)}^{\mu_R(V_b)} \{T_{\sigma}(E, V_b) [f_L(E, V_b) - f_R(E, V_b)]\} dE, \quad (1)$$

式中:  $e$  为电子的电量;  $h$  为普朗克常数;  $T_{\sigma}$  为自旋为  $\sigma$  的电子的传输谱;  $f_L(E, V_b)$  为左电极的费米-狄拉克分布函数;  $\mu_L(V_b)$  是左电极的化学势,  $V_b$  表示外加偏压。

$T_{\sigma}$  可由如下公式得到:

$$T_{\sigma}(E, V_b) = \text{tr} \left\{ \text{Im} \left[ \sum_{L\sigma}^r (E, V_b) \right] G_{\sigma}^r(E, V_b) \times \text{Im} \left[ \sum_{R\sigma}^r (E, V_b) \right] G_{\sigma}^a(E, V_b) \right\}, \quad (2)$$

式中:  $G^r$ 、 $G^a$  分别为推迟、提前格林函数矩阵;  $\sum_L^r$ 、 $\sum_R^r$  分别为左、右电极的推迟自能矩阵。

## 3 结果分析

课题组选取带宽为 6 的锯齿型硅烯纳米带 (6ZSiNRs) 为例,其结构见图 1a,方框中为 6ZSiNRs 的单胞构型。前人研究报道 ZSiNRs 在反铁磁(即带的两个边缘的磁化状态相反)状态下最稳定,且在反铁磁下体系的能带显示为自旋简并的半导体性质。课题组计算了反铁磁下 6ZSiNRs 单胞的能带,所得结果如图 1b 所示,该体系中自旋向上和向下的能带简并(即自旋向上的虚线和向下的实线完全重叠),体系显示出带隙为 0.30 eV 的半导体性质。以 6ZSiNRs 单胞为基本单元,构建纯的 6ZSiNRs 纳米器件,记为 M0。采用密度泛函理论和非平衡格林函数方法计算了 M0 器件在反铁磁下的  $I$ - $V$  特性曲线,如图 1c 所示。从  $I$ - $V$  特性曲线可知,自旋向上和向下的  $I$ - $V$  曲线重叠。当偏压较低时,电流几乎为 0;当偏压大于 0.3 V 时,电流随偏压的增加而迅速增加,

表现出明显的半导体器件性质。然而在半导体器件中, 自旋器件表现出独特的优势, 因此, 接下来课题组将通过硼或氮原子掺杂在 M0 器件中调控自旋输运性质, 以使得自旋向上和向下的输运行为不同而获得自旋过滤功能。

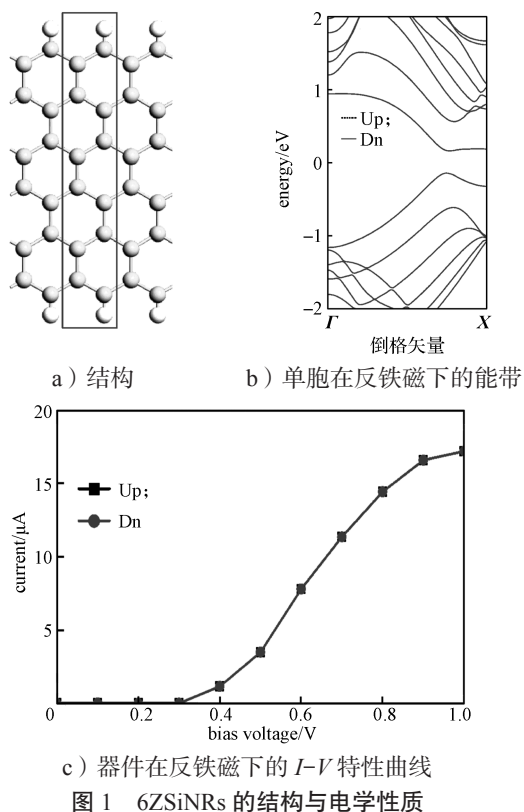


Fig. 1 Structure and electronic properties of 6ZSiNRs

在 6ZSiNRs 的超胞中, 因为其结构具有周期性和对称性, 硼和氮原子掺杂的位点共有 6 个, 如图 2a 所示。考虑到实验的易实现性掺杂浓度不宜过高, 因此选择 3 个 6ZSiNRs 超胞掺杂 1 个硼原子或者氮原子。为了获得最稳定的掺杂位点, 对比这 6 个掺杂位点的能量。课题组计算位点 1 和其它几个位点的能量差  $\Delta E_i = E_i - E_1$  ( $i=1, 2, 3, 4, 5, 6$ ),  $E_i$  代表掺杂在位点  $i$  的体系能量, 所得计算结果显示在图 2b 中。

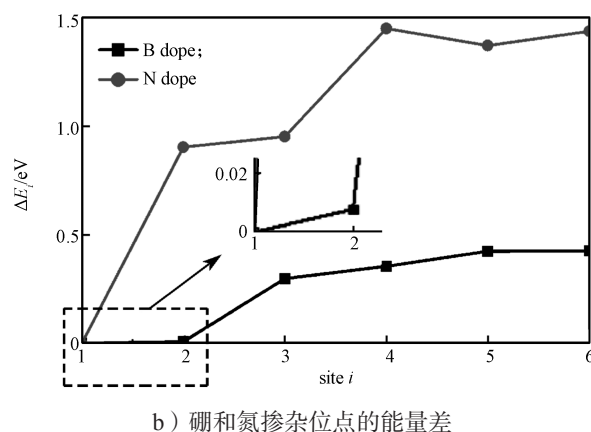
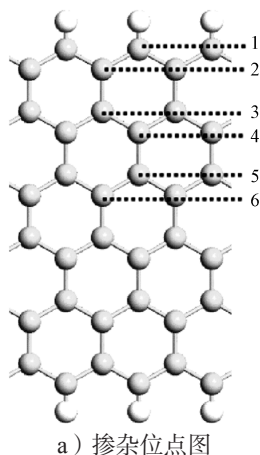


图 2 硼和氮在 6ZSiNRs 中的掺杂情况

Fig. 2 Doped situation of B and N in 6ZSiNRs

由图 2 可见, 硼或氮掺杂在位点 2~6 的相对能量差都为正值, 这表明硼或氮原子掺杂在位点 2~6 的能量都高于掺杂在位点 1 的, 所以, 硼和氮原子都倾向于掺杂在位点 1, 也即硼和氮原子掺杂在锯齿型硅烯纳米带的边缘最稳定。因此, 后续研究只考虑硼和氮原子掺杂在位点 1 的构型。

一个完整的器件分为左右电极区域和中心散射区域, 其中电极区域又包含纯电极区域和电极扩展区域, 其为半无限长的周期性结构。为了研究硼和氮原子掺杂区域对器件自旋输运性质的影响, 课题组设计了 2 种掺杂构型, 如图 3a 和 3b 所示。图 3a 为硼或氮原子掺杂在中心散射区域, 相应的器件分别标记为 M1 和 M3, 图 3b 为硼或氮原子掺杂在左电极区域, 相应的器件分别标记为 M2 和 M4。

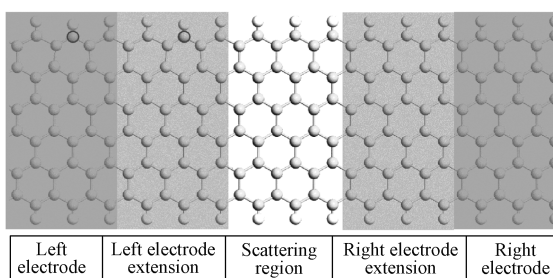
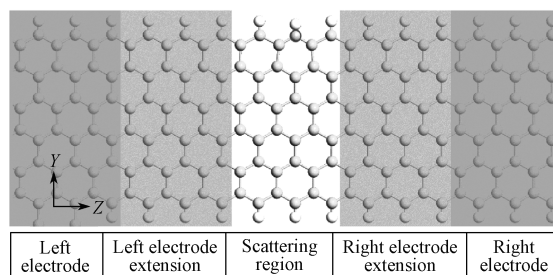


图 3 M1~M4 的器件构型图

Fig. 3 Configuration diagram of M1~M4

接下来分别计算 M1~M4 器件的自旋输运性质,绘制的  $I$ - $V$  特性曲线图如图 4 所示。

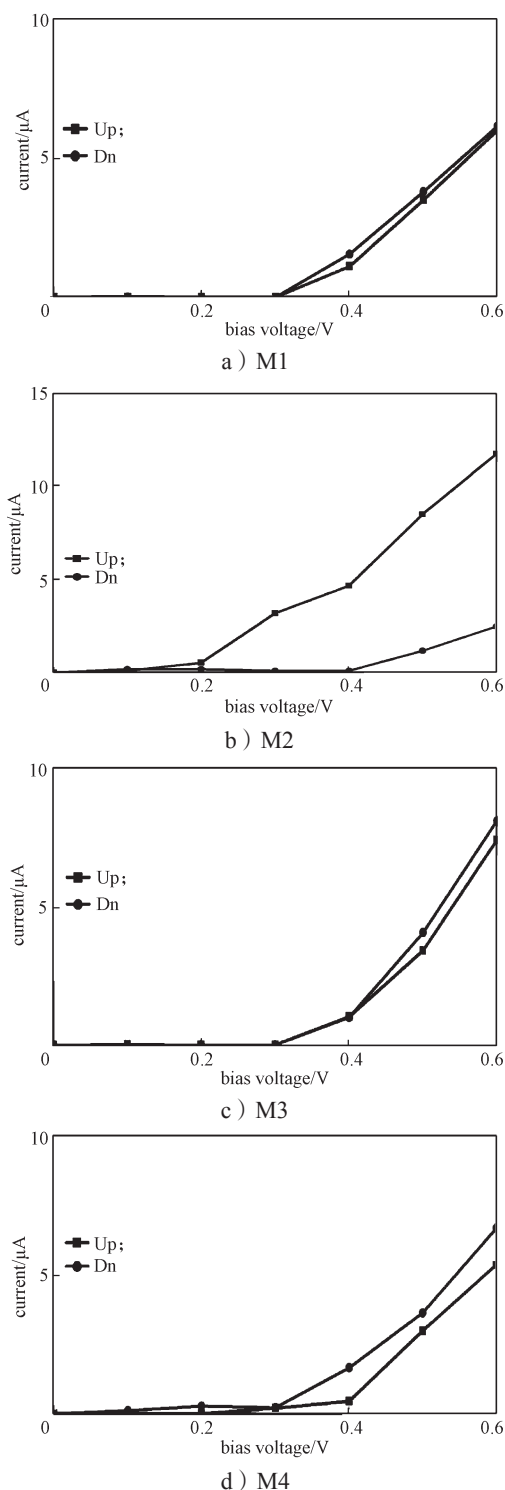


图 4 M1~M4 器件的  $I$ - $V$  特性曲线

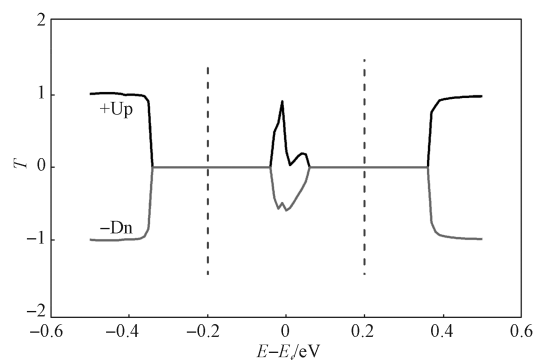
Fig. 4  $I$ - $V$  diagram of M1~M4 devices

由图 4a 可以得知,在偏压较低(小于 0.3 V)时,自旋向上和向下的电流都较小,几乎为 0;当偏压大于 0.3 V 时,随着偏压的增大,自旋向上和向下的电流都线性增加,但是自旋向上和向下的  $I$ - $V$  特性曲线显示出微小的劈裂,因此体系呈现出微弱的自旋过滤

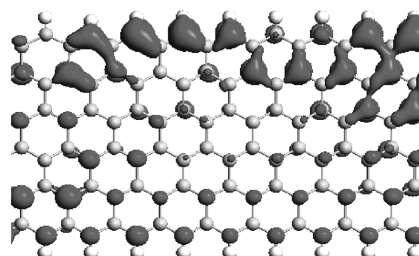
特性。当硼原子掺杂在电极区域时,对应器件记为 M2,该器件的  $I$ - $V$  特性曲线显示在图 4b 中,对于自旋向上的电流来说,当偏压小于 0.1 V 时,电流较小,当偏压大于 0.1 V 时,随着偏压的增加,电流呈现出逐渐增大的趋势;对于自旋向下的电流,当偏压小于 0.4 V 时,电流非常微弱,当偏压大于 0.4 V 时,电流随偏压的增加而增加,但是增加速度小于自旋向上的电流。因此,在 M2 器件中,自旋向上和向下的  $I$ - $V$  特性曲线表现出不同的行为,致使较明显的自旋劈裂现象产生,从而实现良好的自旋过滤功能。自旋过滤效率计算基于  $SFE = |I_{\uparrow} - I_{\downarrow}| / |I_{\uparrow} + I_{\downarrow}|$  公式,结果显示 M2 器件在 (0.2 V, 0.4 V) 偏压范围内的自旋过滤效率高达 100%。

当氮原子掺杂在 M0 器件的中心散射区时,构成 M3 器件,其自旋输运  $I$ - $V$  特性曲线如图 4c 所示。由图可知,在 0~0.3 V 偏压范围内,自旋向上和向下的电流接近 0,随着偏压增加保持不变,但当偏压大于 0.3 V 时,其随偏压增加而增加,自旋向上和向下的电流都呈线性增加,但是二者增加的速度不同,导致在高偏压区域产生自旋劈裂现象,出现微弱自旋过滤功能。而将氮原子掺杂在电极区域时,可以发现它的自旋输运性质发生改变,出现了较明显的自旋劈裂现象,如图 4d 所示。

为进一步理解硼和氮掺杂在不同区域给器件引入的自旋过滤劈裂程度不同,选取硼掺杂为例,课题组给出了 M1 和 M2 器件在 0.4 V 偏压下的传输谱线和费米能级处的局域态密度分布,如图 5 所示。

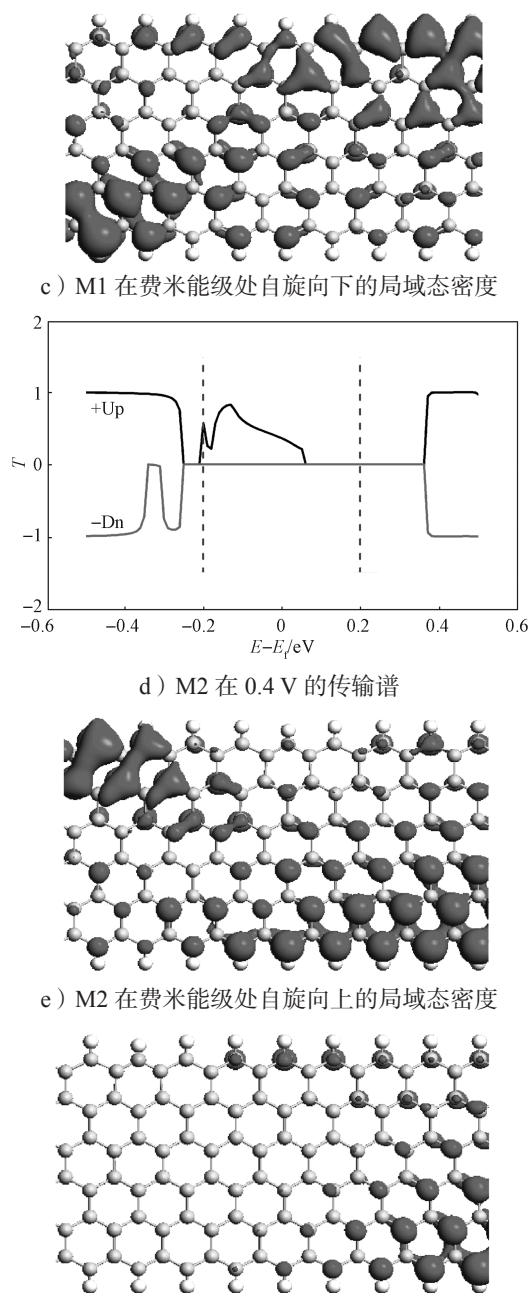


a) M1 在 0.4 V 的传输谱



b) M1 在费米能级处自旋向上的局域态密度





f) M2 在费米能级处自旋向下的局域态密度

图5 M1和M2的传输谱和局域态密度

Fig. 5 Transmission spectra and local density of states of M1 and M2

对于 M1 器件, 在 0.4 V 偏压下偏压窗口内 (两条线之间) 都有传输峰出现 (见图 5a), 因为传输峰所围面积与电流大小正相关, 所以自旋向上和向下的电流都不为 0, 且二者大小近似, 这就导致自旋过滤效率较低。图 5b 和 5c 分别给出了费米能级处自旋向上和向下的局域态密度分布情况, 很明显二者的态密度分布都比较扩散, 这为电子从源极到漏极的顺利传输提供条件, 因此会有自旋向上和向下的电流出现。M2 器件在 0.4 V 偏压下的传输谱线 (图 5d) 较 M1 器件的有很大不同, 在偏压窗口内, 可见自旋向

上的峰出现, 而自旋向下的传输系数为 0, 因此只有自旋向上的电流出现, 而自旋向下的电流几乎为 0, 导致近乎 100% 的自旋过滤效率出现。从图 5e 和 5f 中也可以发现自旋向上的态密度分布较扩展, 这为自旋向上的电子传输提供了条件, 因此有自旋向上的电流产生; 而自旋向下的态密度则主要局域在器件一端, 故自旋向下的电子不能顺利传输, 造成自旋向下的电流几乎为 0。

## 4 结语

综上, 课题组采用基于密度泛函理论和非平衡格林函数方法的 ATK 软件包, 探究了硼和氮原子掺杂锯齿型硅烯纳米带器件对其自旋输运行为的调控作用。首先, 计算分析了硼和氮原子掺杂位点对体系稳定性的影响, 发现掺杂在带的边缘最稳定; 接着, 探究了硼和氮原子的掺杂区域对器件的自旋输运性质的影响。结果表明, 其掺杂区域对器件自旋输运行为起着关键作用: 当掺杂在散射区时, 在高偏压区域可观察到较小的自旋劈裂现象。但是当硼和氮原子掺杂在其中一个电极区时, 在高偏压区域出现了较明显的自旋劈裂现象, 相应的自旋过滤效率高达 100%。本研究可为自旋器件设计提供理论参考。

## 参考文献:

- [1] CAHANGIROV S, TOPSAKAL M, AKTÜRK E, et al. Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(23): 236804.
- [2] DRUMMOND N D, ZÓLYOMI V, FAL'KO V I. Electrically Tunable Band Gap in Silicene[J]. *Physical Review B*, 2012, 85(7): 075423.
- [3] LIU C C, FENG W X, YAO Y G. Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(7): 076802.
- [4] DE PADOVA P, QUARESIMA C, OTTAVIANI C, et al. Evidence of Graphene-Like Electronic Signature in Silicene Nanoribbons[J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 96(26): 261905.
- [5] DE PADOVA P, KUBO O, OLIVIERI B, et al. Multilayer Silicene Nanoribbons[J]. *Nano Letters*, 2012, 12(11): 5500-5503.
- [6] DÁVILA M E, MARELE A, DE PADOVA P, et al. Comparative Structural and Electronic Studies of Hydrogen Interaction with Isolated Versus Ordered Silicon Nanoribbons Grown on Ag(110)[J]. *Nanotechnology*, 2012, 23(38): 385703.

- [7] DE PADOVA P, PERFETTI P, OLIVIERI B, et al. 1D Graphene-Like Silicon Systems: Silicene Nanoribbons[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2012, 24(22): 223001.
- [8] CAHANGIROV S, TOPSAKAL M, CIRACI S. Armchair Nanoribbons of Silicon and Germanium Honeycomb Structures[J]. *Physical Review B*, 2010, 81(19): 195120.
- [9] WANG G. Do Silicene Nanoribbons Have High Carrier Mobilities?[J]. *EPL (Europhysics Letters)*, 2013, 101(2): 27005.
- [10] DING Y, NI J. Electronic Structures of Silicon Nanoribbons[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 95(8): 083115.
- [11] DING Y, WANG Y L. Electronic Structures of Zigzag Silicene Nanoribbons with Asymmetric  $sp^2$ - $sp^3$  Edges[J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102(14): 143115.
- [12] ZHANG D, LONG M Q, ZHANG X J, et al. Bipolar Spin-Filtering, Rectifying and Giant Magnetoresistance Effects in Zigzag Silicene Nanoribbons with Asymmetric Edge Hydrogenation[J]. *Chemical Physics Letters*, 2014, 616/617: 178-183.
- [13] FARGHADAN R. Bipolar Magnetic Semiconductor in Silicene Nanoribbons[J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2017, 435: 206-211.
- [14] DONG Y J, WANG X F, VASILOPOULOS P, et al. Half-Metallicity in Aluminum-Doped Zigzag Silicene Nanoribbons[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2014, 47(10): 105304.
- [15] NÚÑEZ C, ORELLANA P A, ROSALES L, et al. Spin-Polarized Electric Current in Silicene Nanoribbons Induced by Atomic Adsorption[J]. *Physical Review B*, 2017, 96(4): 045403.
- [16] DENG X Q, ZHANG Z H, FAN Z Q, et al. Spin-Filtering and Rectifying Effects for Al-Doped Zigzag-Edged Silicene Nanoribbons with Asymmetric Edge Hydrogenation[J]. *Organic Electronics*, 2016, 32: 41-46.
- [17] GARCÍA-FUENTE A, GALLEGO L J, VEGA A. Spin-Polarized Transport in Hydrogen-Passivated Graphene and Silicene Nanoribbons with Magnetic Transition-Metal Substituents[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18(32): 22606-22616.
- [18] YAO Y, LIU A P, BAI J H, et al. Electronic Structures of Silicene Nanoribbons: Two-Edge-Chemistry Modification and First-Principles Study[J]. *Nanoscale Research Letters*, 2016, 11: 371.
- [19] PERDEW J P, ZUNGER A. Self-Interaction Correction to Density-Functional Approximations for Many-Electron Systems[J]. *Physical Review B*, 1981, 23(10): 5048-5079.
- [20] BRANDBYGE M, MOZOS J, ORDEJON P, et al. Density-Functional Method for Nonequilibrium Electron Transport[J]. *Physical Review B*, 2002, 65(16): 165401.
- [21] BUTTIKER M, IMRY Y, LANDAUER R, et al. Generalized Many-Channel Conductance Formula with Application to Small Rings[J]. *Physical Review B*, 1985, 31(10): 6207-6215.

(责任编辑: 申 剑)