

doi:10.3969/j.issn.1673-9833.2022.04.013

硼氮掺杂对八氢萘纳米带能带结构的调控

崔丽玲¹, 张丹¹, 肖金¹, 刘涛¹, 何军¹, 范志强²

(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)

摘要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理, 研究了硼原子和氮原子掺杂对八氢萘纳米带能带结构的调控作用。研究结果显示硼原子和氮原子掺杂可以有效地调控八氢萘纳米带的能带结构: 单双硼氮原子掺杂可以实现对八氢萘纳米带能带的半导体化; 掺杂原子的浓度对八氢萘纳米带能带结构也有影响, 提高掺杂原子浓度可以获得与单原子掺杂完全不同的能带结构。

关键词: 八氢萘纳米带; 原子掺杂; 第一性原理计算; 能带结构

中图分类号: O471.5

文献标志码: A

文章编号: 1673-9833(2022)04-0090-07

引文格式: 崔丽玲, 张丹, 肖金, 等. 硼氮掺杂对八氢萘纳米带能带结构的调控[J]. 湖南工业大学学报, 2022, 36(4): 90-96.

Regulation of Boron and Nitrogen Doping on Band Structure of Phagraphene Nanoribbon

CUI Liling¹, ZHANG Dan¹, XIAO Jin¹, LIU Tao¹, HE Jun¹, FAN Zhiqiang²

(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)

Abstract: Based on the first principle of density functional theory, a study has been conducted on the effect of boron and nitrogen atoms doping on the band structure of phagraphene nanoribbons (PGNRs). The research results show that doping with boron and nitrogen atoms can effectively control the band structure of phagraphene nanoribbons: single and double boron and nitrogen atom doping can realize the semiconductorization of the energy band of phagraphene nanoribbons; the concentration of doping atoms also has an effect on the band structure of phagraphene nanoribbons; meanwhile an increase in the concentration of doped atoms can obtain a completely different band structure from that of a single-atom doping.

Keywords: phagraphene nanoribbon; atom doping; first-principle calculation; band structure

1 研究背景

碳元素是元素周期表中最具吸引力和通用性的

元素之一, 由于其具有灵活的键合性与多样化的电子轨道特性, 可以形成大量的同素异形体。从零维富勒烯^[1]到一维纳米管^[2]、准一维石墨烯纳米带^[3]、

收稿日期: 2021-06-28

基金项目: 湖南省教育厅科学研究基金资助项目(20C0599, 18C0500, 19B159); 国家自然科学基金资助项目(11704113); 湖南省自然科学基金资助项目(2019JJ60067)

作者简介: 崔丽玲(1979-), 女, 河南林州人, 湖南工业大学讲师, 博士, 主要研究方向为纳米材料第一性理论, E-mail: 10916@hut.edu.cn

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, 主要研究方向为纳米材料第一性理论, E-mail: hejun@hut.edu.cn

二维石墨烯^[4]、三维石墨、金刚石以及金属碳相^[5-6]等, 这些材料的出现, 极大地促进了材料科学、物理学、化学及其他相关学科的发展。特别是二维碳同素异形体石墨烯, 其表现出超高的载流子迁移率^[7]、热导率^[8]和量子霍尔效应^[9]等优异性能, 这些发现激发了人们对新型二维碳基纳米材料研究与探索的极大兴趣和热情。

最近, A. R. Oganov 等利用从头算进化算法 USPEX (universal structure predictor: evolutionary xtallography) 预测了一种新型碳多晶结构, 它由 5/6/7 个碳环构成, 这种二维材料可以看作石墨烯的同素异形体, 称为八氢萘 (Phagraphene)^[10]。由于其 sp^2 杂化碳原子和密集的原子堆积结构, 使得八氢萘的物理性质可以与石墨烯相媲美, 但是其能量比以往工作中提出的其他碳同素异形体更为有利^[11]。有科研工作者将八氢萘和石墨烯进行比较, 发现二者具有一些相同的性质, 而能带结构计算结果表明, 八氢萘的第一布里渊区存在一个扭曲的狄拉克锥^[10], 因而可以被应用于晶体管、太阳能电池、电子设备以及许多其他器件中。L. F. C. Pereira 等^[12]采用分子动力学模拟方法计算了八氢萘的电子性质, 其研究结果表明, 八氢萘具有各向异性的电导率, 而其良好的电子性能表明, 在未来的碳基热电器件中, 八氢萘比石墨烯有着更强的竞争力。

然而, 八氢萘是零带隙的导体^[13], 缺少带隙将成为其在未来电子器件实际应用中的障碍, 如果要将其应用于纳米电子学领域中, 就需要打开其带隙。八氢萘与石墨烯具有类似的物理性质, 为了解决带隙问题, 可以借鉴石墨烯的相关经验, 将八氢萘薄片切割成准一维窄纳米带, 将八氢萘的维数从二维降低到一维, 这就是八氢萘纳米带 (PGNRs)^[14]。这种引入能隙的方法利用量子约束原理改变电子结构, 通过减小能隙横向尺寸实现带隙。PGNRs 的电子性质将由边缘的原子几何结构决定。作为石墨烯的一种衍生物, 当对 PGNRs 进行单层切割时, 其边缘通常由具有扶手椅 (armchair) 和锯齿型 (zigzag) 几何图形的区域组合而成。如果纳米带唯一地受到这些边缘构型的限制, 则将其定义为 armPGNR 或者 zzPGNR。Liu Y. J. 等^[15]研究发现, 扶手椅和锯齿型边缘混合的八氢萘纳米带是半导体, 而边缘氢饱和的纯锯齿型八氢萘纳米带表现为金属性。Sun H. 等^[16]采用第一性原理, 研究了八氢萘纳米带的动力学性质, 结果发现当沿着扶手椅方向上的应变为 0.18 时, 其极限抗拉强度为 25.39 N/m; 而沿着锯齿方向的应变为 0.16 时, 其极限抗拉强度为 25.57 N/m。此外,

C. A. B. DA Silva 等^[17]也研究了具有拓扑绝缘体 (TI) 和共振隧穿二极管 (RTD) 特性的锯齿型八氢萘纳米带 (zzPGNR) 的电子结构和输运特性。

通常, 石墨烯纳米带衍生物的功能特性可以通过掺杂外来原子加以调节^[18-21], 从而实现在各个领域的广泛应用。在诸多掺杂原子中, 由于硼 (B) 原子和氮 (N) 原子的化学性质与碳 (C) 原子的化学性质相似, B/N 和 C 原子之间可以形成相当强的共价键 B (N)—C 键, 类似于 C—C 键, 而且掺杂后对体系几何形变的影响可以忽略不计, 所以 B 原子或者 N 原子掺杂成为石墨烯纳米带衍生物的首选掺杂方案^[22]。它们仅通过引入额外的载流子和改变能带结构来调节碳基体系的电子性质, 因此, B 原子、N 原子或者 BN 分子掺杂将是石墨烯衍生物中典型的替代掺杂方法之一。作为一种新型碳同素异形体, Luo A. Y. 等^[23]分别研究了 B、N 和 BN 掺杂对混合边缘八氢萘纳米带的几何稳定性、电子结构和器件性能的影响, 其计算结果表明, 不同的掺杂类型和掺杂位置会对带隙尺寸产生不同的影响, 从而呈现出完全可调谐的电子结构。He J. 等^[24]运用非平衡格林函数与密度泛函相结合的方法, 对 B/N 原子掺杂的锯齿形 PGNRs 的电子性质进行了研究, 结果表现出明显的负微分电阻效应。然而, 迄今为止还鲜有关于不同宽度锯齿型八氢萘纳米带 (zzPGNRs) 掺杂以调节其能带结构的报道。

早期关于石墨烯材料电子性质的已有理论研究发现, 石墨烯纳米带中, B 或者 N 原子取代 C 原子的周期性排列结构, 可以形成掺杂超晶格, 从而打开其带隙^[25]。同时, 基于这一领域的最新研究进展, 本研究选择 B 和 N 原子作为替位掺杂原子, 采用密度泛函理论探究 B、N 原子掺杂对不同带宽的八氢萘纳米带能带结构的影响。

2 模型和计算方法

通过沿不同方向切割, 可以获得具有锯齿型和扶手椅型两种边缘的八氢萘纳米带。八氢萘纳米带是按照沿着纳米带方向碳链的宽度进行分类的, 文中将碳链宽度缩写为 W ($W=1, 2, 3, 4, 5, 6$)。对于一定宽度的八氢萘纳米带, 可能存在两种不同的边缘构型, 分别为上边缘和下边缘。考虑到边缘结构的影响^[26], 本研究中选择纯锯齿型作为上边缘, 依次考虑带宽为 $W=3, 4, 5, 6$ 的 4 种情况。带宽不同, 会出现不同类型的下边缘。

图 1 显示了带宽 $W=6$ (边缘标记) 的八氢萘纳米带 (PGNR) 本征态模型 (图 1a: PURE-PGNR)

及其硼或者氮原子替位掺杂模型(图1b~f),图中纳米带上下边缘位置1,2,3,4,5,6为掺杂位置,矩形框中的结构为八氢萘纳米带单胞。文中主要讨论了如下不同类型的掺杂:1)一个单原子替位掺杂在八氢萘纳米带的上边缘(见图1b:B-PGNR和1c:N-PGNR);2)两个原子分别替位掺杂在八氢萘纳米带的上边缘和下边缘(见图1d:BN-PGNR、1e:2B-PGNR、1f:2N-PGNR)。为了消除边缘悬挂键的影响,选择H原子对纳米带边缘的C原子进行饱和。

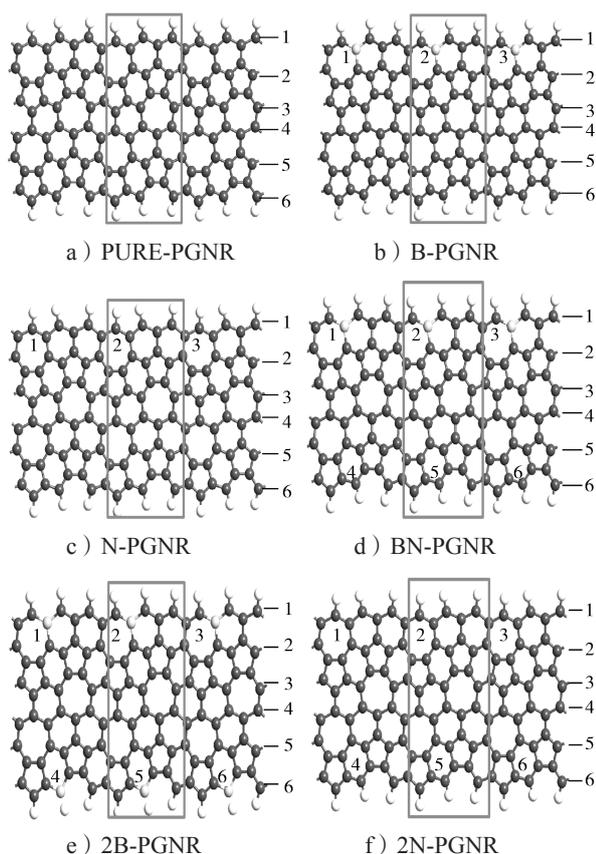


图1 八氢萘纳米带的优化平面结构示意图

Fig. 1 Optimized planar structure of phagraphene nanoribbons

研究体系的几何弛豫与电子结构的计算,通过基于密度泛函理论的 Atomistix ToolKit (ATK)^[27-28] 软件包实现。考虑到计算效率与精度之间的平衡,对所有原子的几何结构优化都采用 single-zeta polarized (SZP) 基组设置。模型中结构弛豫收敛的判据为每个原子受力小于 $0.05 \text{ eV/\text{Å}}$ 。为了求解 Kohn-Sham 方程,采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 作为电子交换关联势。在布里渊区, K 点的空间撒点网格采样为 $1 \times 1 \times 100$, 温度为 300 K , 截断能为 150 Ry 。为了消除相邻原胞之间相互作用的

干扰,真空层选取 20 \AA 。

3 结果与分析

为了研究八氢萘的电子结构,课题组利用嵌入 ATK 中的 Nanolab 模块模拟了宽度分别为 3, 4, 5, 6 的纳米带在本征态和掺杂态的能带结构。

3.1 本征态能带结构

首先,计算了 $W=3, 4, 5, 6$ 八氢萘纳米带在本征态下(图1a结构)的能带结构,如图2所示,分别标记为 3Z、4Z、5Z 和 6Z,图中虚线代表费米面。

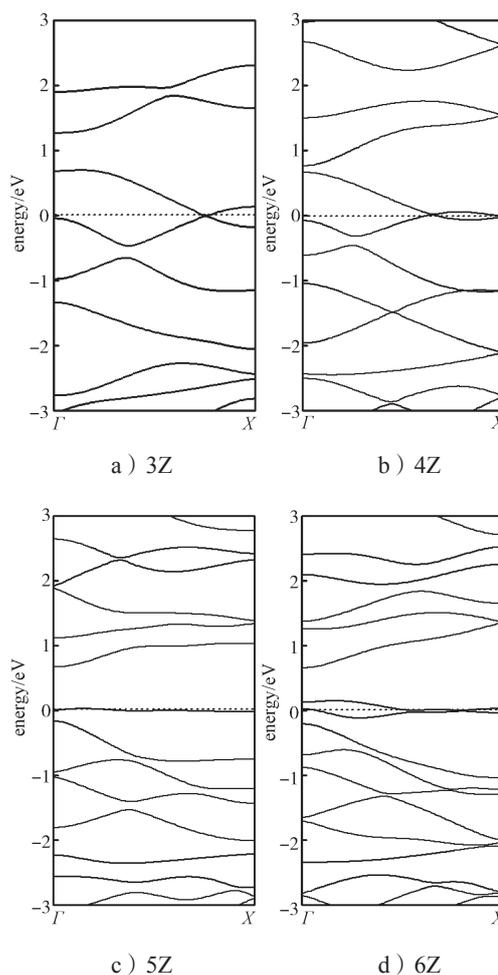


图2 八氢萘纳米带本征结构能带图

Fig. 2 Band structure of phagraphene nanoribbons

从图2所示本征结构能带图中,可以观察到不同宽度纳米带的子带都与费米能级相交,使得 3Z、4Z、5Z 和 6Z 体系都表现出明显的金属性。这与之前的报道结果^[13]吻合。

3.2 单原子(B/N)掺杂能带结构

接下来,采用单个 B 原子对本征态八氢萘纳米带进行替位掺杂(图1b结构),研究其对电子结构的调控行为,相应的能带结构如图3所示。

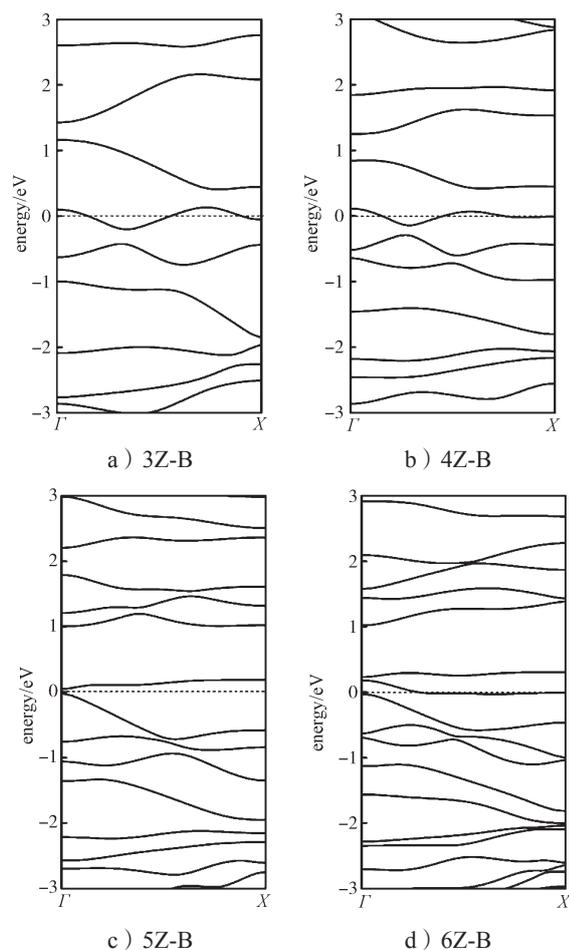


图3 单硼原子掺杂八氢萘纳米带能带结构图

Fig. 3 Band structure of phagraphene nanoribbons doped with a single boron atom

对于宽度为3、4、5、6的八氢萘纳米带，B原子替位掺杂了八氢萘纳米带上边缘的C原子，经过结构优化，得到了不同宽度下B替位掺杂八氢萘纳米带的模型结构，分别标记为3Z-B、4Z-B、5Z-B和6Z-B。由计算得到的能带结构图3可以得知，由于B原子和C原子的大小非常接近，故当八氢萘纳米带边缘碳原子被B原子取代时，B原子并没有导致整个系统的几何结构产生明显的变形。

对比图3和图2所示的能带结构图可以看出，B原子掺杂后，体系的费米能级都有一定程度的下移，从而使得不同带宽体系的能带结构显示出不同性质：当带宽为5时，价带和导带分别居于费米能级之下方和上方，因为价带顶和导带底对应于同一布里渊区点，因此该体系展现出直接带隙半导体性，对应的带隙为0.062 eV。然而当带宽分别为3、4、6时，都有子带穿过费米能级，因此3Z-B、4Z-B和6Z-B体系都显示出金属性，可见B原子替位掺杂并不能改变原体系的金属性。

由于B原子比C原子少1个电子，因此B原

子掺杂可以导致费米能级下移，从而改变体系的能带结构。N原子比C原子多1个电子，采用N原子替位掺杂八氢萘纳米带上边缘（图1c结构），掺杂构型按带宽不同分别标记为3Z-N、4Z-N、5Z-N和6Z-N，计算所得的能带结构显示在图4中。

将图4中的N掺杂八氢萘纳米带的能带图与图2中的本征八氢萘纳米带的能带图进行比较，可以发现费米能级向上移动，从而改变了体系的能带结构。这主要是因为N原子比C原子多1个电子，N原子取代C原子掺杂到八氢萘纳米带时，会导致体系电子数增加，费米面升高。

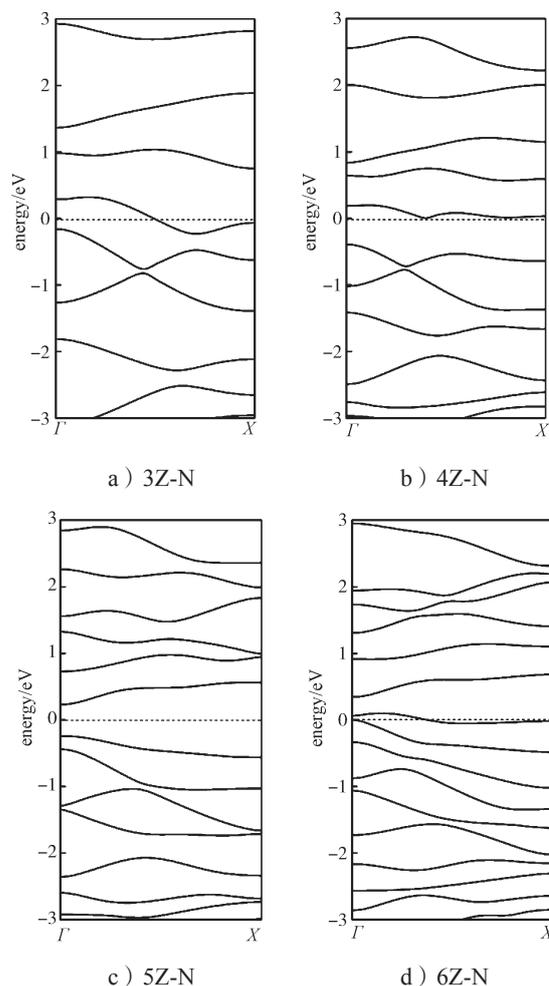


图4 单氮原子掺杂八氢萘纳米带能带结构图

Fig. 4 Band structure of phagraphene nanoribbons doped with a single nitrogen atom

观察图4可知，不同带宽的八氢萘纳米带中掺杂N原子，对电子结构的改变是不同的。当宽度为4和5时，价带顶和导带底之间有一个能隙，因此体系显示出半导体的特性；但是带宽为4的掺杂体系呈现出0.398 eV的间接带隙，带宽为5的掺杂体系呈现出更大的带隙（0.534 eV），且为直接带隙。当带宽为3和6时，都有子带穿越费米能级，能带结构仍表现出

明显的金属性质。

3.3 BN 原子共掺杂能带结构

若同时将 B 原子和 N 原子替位掺杂在八氢萘纳米带的上下两个边缘 (图 1d 结构), 通过计算电子结构也可以得到一些不同性质。对于八氢萘纳米带的不同带宽, 同时掺杂 B 原子和 N 原子, 所得模型分别标记为 3Z-BN、4Z-BN、5Z-BN 和 6Z-BN。经过计算可以得到它们的能带结构, 如图 5 所示。当带宽为 3、4、6 时, 从体系的能带结构图可以看出, 它们的价带顶和导带底分别居于费米能级以下和费米能级以上, 使得体系表现出明显的半导体性质。但不同的带宽掺杂体系, 其半导体带隙是不同的: 对于带宽为 3 和 6 的八氢萘纳米带掺杂体系, 其能带结构显示出直接带隙半导体性质, 带隙分别为 0.521 eV 和 0.120 eV, 但是对于带宽为 4 的八氢萘纳米带掺杂体系, 其能带结构显示出间接带隙半导体性质, 带隙为 0.338 eV。而当带宽为 5 时, 有子带与费米能级相交, 体系表现出明显的金属性质。

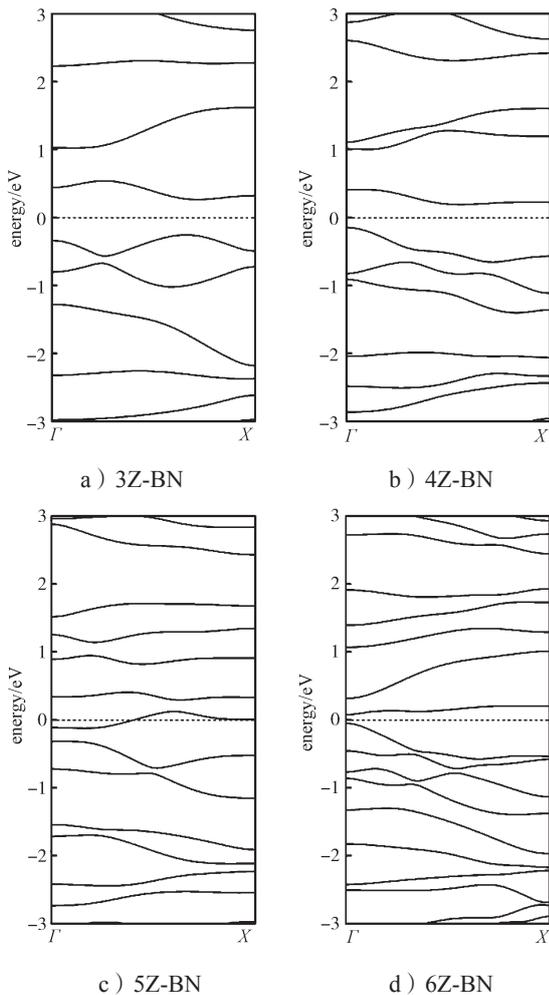


图 5 硼氮原子共掺杂八氢萘纳米带能带结构

Fig. 5 Band structure of phagraphene nanoribbons co-doped with boron and nitrogen atoms

3.4 两个 B 或 N 原子共掺杂能带结构

对于同种原子掺杂体系, 不同浓度的掺杂原子对纳米带的能带结构有不同的影响^[29-30]。不同宽度的八氢萘纳米带, 在上、下边缘分别进行 B 原子掺杂 (图 1e 结构), 根据带宽不同, 对应模型分别标记为 3Z-2B、4Z-2B、5Z-2B 和 6Z-2B。经过计算, 得到如图 6 所示的对应能带结构。

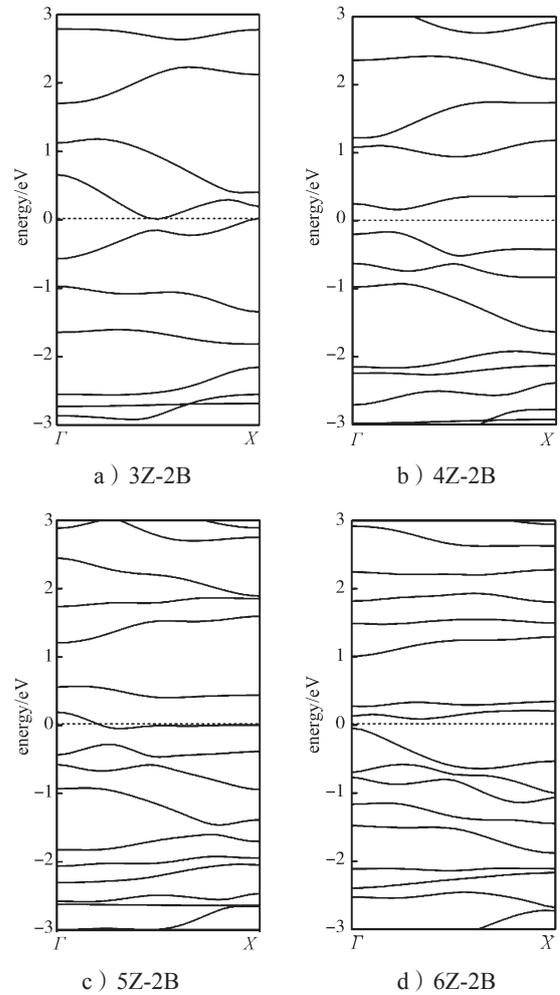


图 6 两个硼原子掺杂八氢萘纳米带能带结构

Fig. 6 Band structure of phagraphene nanoribbons doped with double boron atoms

图 6 所示结果表明, 当带宽分别为 3、4 和 6 时, 掺杂的八氢萘纳米带体系能带图中导带底和价带顶分别居于费米能级上方和下方, 出现一定的带隙, 这意味着此时体系表现为半导体性质, 且带宽为 3 和 6 的八氢萘纳米带掺杂体系呈现出 0.016 eV 和 0.158 eV 的间接带隙, 带宽是 4 的八氢萘纳米带掺杂体系则为 0.331 eV 的直接带隙半导体。与 3、4、6 带宽不同, 当八氢萘纳米带带宽为 5 时, 有子带穿过费米能级, 因此体系呈现出金属性。将图 6 与图 2 和图 3 进行对比分析, 可以清楚地看到, 当掺杂原子浓度增加时, 即使用 2 倍浓度的 B 原子掺杂

时, 与本征态和单 B 原子掺杂相比, 高浓度掺杂的八氢萘纳米带的费米能级进一步下降, 导致了与单个 B 原子掺杂的不同结果。

两个 N 原子同时掺杂在八氢萘纳米带的上边缘和下边缘时 (图 1f 结构), 依据带宽不同分别缩写为 3Z-2N、4Z-2N、5Z-2N 和 6Z-2N。通过第一性原理计算, 可以得到 3Z-2N、4Z-2N、5Z-2N 和 6Z-2N 的能带结构, 如图 7 所示。

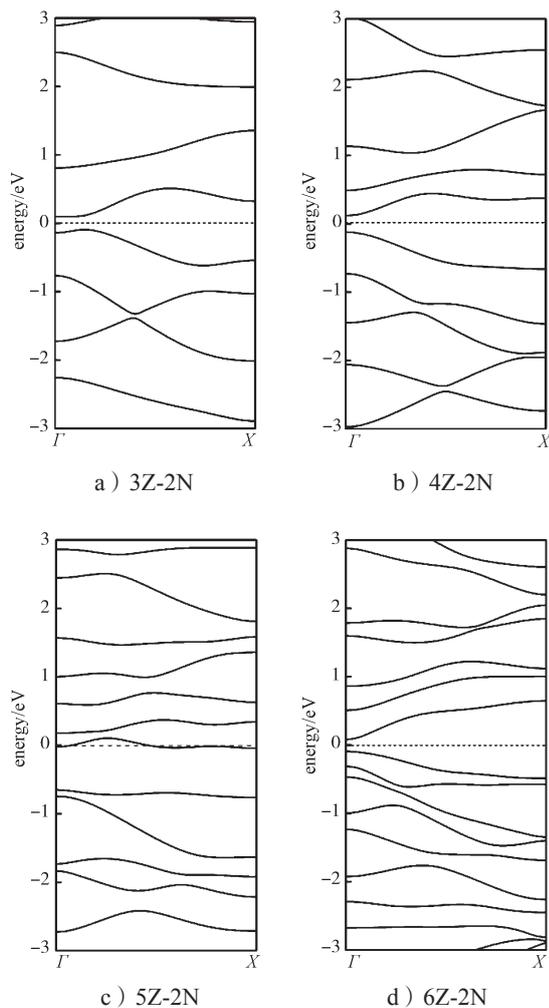


图 7 两个氮原子掺杂八氢萘纳米带能带结构

Fig. 7 Band structure of phagraphene nanoribbons doped with double nitrogen atoms

由图 7 可知, 当宽度为 3、4、6 时, 导带和价带之间有一个带隙, 它们都呈现出半导性质, 且它们都是直接带隙的半导体, 但是带隙却不同, 依次为 0.191, 0.242, 0.173 eV。然而, 与带宽为 3、4、6 掺杂体系不同的是, 当掺杂体系的带宽为 5 时, 有子带穿越费米能级, 使得体系呈现出明显的金属性。

通过对图 2、图 7 和图 4 的比较和分析, 可以发现当掺杂 N 原子浓度增加时, 即当掺杂的 N 原子浓度增加 1 倍时, 对应能带结构中的费米面会继续向上

移动。

4 结论

本文基于密度泛函理论, 并借助 ATK 软件包, 研究了 B 和 N 原子替位掺杂对八氢萘纳米带能带结构的调控行为。研究发现, B 和 N 原子替位掺杂可以有效调控八氢萘纳米带的电子结构, 将八氢萘纳米带由金属性转变为半导体性, 且掺杂体系、位点和浓度对带隙有不同的调控行为, 具体表现如下:

1) B 或 N 原子单独掺杂在八氢萘纳米带的锯齿型边缘时, 对于带宽为 5 的体系, 其性质由金属转变为半导体; 相反, 带宽为 3 和 6 的体系仍然保持金属性; 但是带宽为 4 的体系掺杂 B 原子时保持金属性, 而掺杂 N 原子时由金属性转变为半导体性;

2) BN 共掺杂八氢萘纳米带时, 可将带宽为 3、4、6 的体系由金属性调控为半导体性, 而对于带宽为 5 的纳米带则依然保持其金属性;

3) 掺杂原子的浓度, 即两个 B (N) 原子掺杂时, 对八氢萘纳米带能带结构也有影响, 提高掺杂原子浓度可以获得与单原子掺杂完全不同的能带结构。

本文的研究结果对能带工程和电子器件的设计具有一定的指导意义。

参考文献:

- [1] KROTO H W, HEATH J R, O'BRIEN S C, et al. C60: Buckminsterfullerene[J]. Nature, 1985, 318: 162-163.
- [2] IJIMA S, ICHIHASHI T. Single-Shell Carbon Nanotubes of 1-nm Diameter[J]. Nature, 1993, 363: 603-605.
- [3] CASTRO NETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The Electronic Properties of Graphene[J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(1): 109-162.
- [4] GEIM A K, NOVOSELOV K S. The Rise of Graphene [J]. Nature Materials, 2007, 6(3): 183-191.
- [5] GRILL A. Diamond-Like Carbon: State of the Art[J]. Diamond and Related Materials, 1999, 8(2/3/4/5): 428-434.
- [6] ZHANG S, WANG Q, CHEN X, et al. Stable Three-Dimensional Metallic Carbon with Interlocking Hexagons [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2013, 110(47): 18809-18813.
- [7] LI Y H, YUAN P F, FAN Z Q, et al. Electronic Properties and Carrier Mobility for Penta-Graphene Nanoribbons with Nonmetallic-Atom-Terminations[J]. Organic Electronics, 2018, 59: 306-313.

- [8] KIM T Y, PARK C H, MARZARI N. The Electronic Thermal Conductivity of Graphene[J]. *Nano Letters*, 2016, 16(4): 2439–2443.
- [9] WANG L, GAO Y D, WEN B, et al. Evidence for a Fractional Fractal Quantum Hall Effect in Graphene Superlattices[J]. *Science*, 2015, 350: 1231–1234.
- [10] WANG Z H, ZHOU X F, ZHANG X M, et al. Phagraphene: A Low-Energy Graphene Allotrope Composed of 5–6–7 Carbon Rings with Distorted Dirac Cones[J]. *Nano Letters*, 2015, 15(9): 6182–6186.
- [11] CRANFORD S W. When Is 6 Less Than 5 Penta-to Hexa-Graphene Transition[J]. *Carbon*, 2016, 96: 421–428.
- [12] PEREIRA L F C, MORTAZAVI B, MAKAREMI M, et al. Anisotropic Thermal Conductivity and Mechanical Properties of Phagraphene: a Molecular Dynamics Study[J]. *RSC Advances*, 2016, 6: 57773–57779.
- [13] ZHANG R S, JIANG J W. The Art of Designing Carbon Allotropes[J]. *Frontiers of Physics*, 2018, 14(1): 1–17.
- [14] DONG Q X, HU R, FAN Z Q, et al. Edge Chemistry Controlling Effects on Electronic Structure, Carrier Mobility and Device Properties for Phagraphene Nanoribbons[J]. *Carbon*, 2018, 130: 206–214.
- [15] LIU Y J, CHEN Z, TONG L J, et al. Effect of Edge-Hydrogen Passivation and Nanometer Size on the Electronic Properties of Phagraphene Ribbons[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 117: 279–285.
- [16] SUN H, MUKHERJEE S, SINGH C V. Mechanical Properties of Monolayer Penta-Graphene and Phagraphene: a First-Principles Study[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18(38): 26736–26742.
- [17] DA SILVA C A B, CÔRREA S M, DOS SANTOS J C D S, et al. Topological Insulator-Metal Transition and Molecular Electronics Device Based on Zigzag Phagraphene Nanoribbon[J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 124(8): 084303.
- [18] LIU Y J, CHEN Z, HU S, et al. The Influence of Silicon Atom Doping Phagraphene Nanoribbons on the Electronic and Magnetic Properties[J]. *Materials Science and Engineering: B*, 2017, 220: 30–36.
- [19] YU Z L, WANG D, ZHU Z, et al. Magneto-Electronic Properties of Graphene Nanoribbons with Various Edge Structures Passivated by Phosphorus and Hydrogen Atoms[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17: 24020–24028.
- [20] WU S, ZHANG K W, LI J B, et al. Boron and Nitrogen Edges Modify the Thermal Conductivity of Phagraphene Nanoribbons: Molecular Dynamics Simulations[J]. *Computational Materials Science*, 2021, 187: 110084.
- [21] SHEIKHSOLEIMANI N, ROUHANI M, SAEIDIAN H. Computational Evaluation of Ga-Doped Phagraphene as a Work Function-Based Sensor for Detection of some Air Pollutant Molecules[J]. *Inorganic Chemistry Communications*, 2020, 118: 107997.
- [22] 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运输的调控[J]. *湖南工业大学学报*, 2020, 34(5): 15–20.
- ZHANG Dan, CUI Liling, TAN Jintao, et al. Spin Transport Effects of Boron and Nitrogen Doping in Zigzag Silicene Nanoribbons Devices[J]. *Journal of Hunan University of Technology*, 2020, 34(5): 15–20.
- [23] LUO A Y, HU R, FAN Z Q, et al. Electronic Structure, Carrier Mobility and Device Properties for Mixed-Edge Phagraphene Nanoribbon by Hetero-Atom Doping[J]. *Organic Electronics*, 2017, 51: 277–286.
- [24] HE J, ZHANG L F, FAN Z Q, et al. Large Negative Differential Resistance Effect Induced by Boron-Doping in Zigzag Phagraphene Nanoribbon Junctions[J]. *AIP Advances*, 2018, 8(9): 0950066.
- [25] NISIOKA K R, SANTOS J C D S, NERO J D, et al. Electronic Transport in Zigzag Phagraphene NanoRibbon Doped with Boron and Nitrogen[J]. *Applied Surface Science*, 2020, 504: 144410.
- [26] LIU Y J, CHEN Z, TONG L J, et al. Effect of Edge-Hydrogen Passivation and Nanometer Size on the Electronic Properties of Phagraphene Ribbons[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 117: 279–285.
- [27] ZENG J, CHEN K Q. Abnormal Oscillatory Conductance and Strong Odd-Even Dependence of a Perfect Spin-Filtering Effect in a Carbon Chain-Based Spintronic Device[J]. *Journal of Materials Chemistry C*, 2015, 3(22): 5697–5702.
- [28] TAYLOR J, GUO H, WANG J. Ab Initio Modeling of Quantum Transport Properties of Molecular Electronic Devices[J]. *Physical Review B*, 2001, 63: 245407.
- [29] ZHENG F B, ZHANG C W, YAN S S, et al. Novel Electronic and Magnetic Properties in N or B Doped Silicene Nanoribbons[J]. *Journal of Materials Chemistry C*, 2013, 1(15): 2735.
- [30] ZHENG X H, RUNGGER I, ZENG Z, et al. Effects Induced by Single and Multiple Dopants on the Transport Properties in Zigzag-Edged Graphene Nanoribbons[J]. *Physical Review B*, 2009, 80(23): 235426.

(责任编辑: 廖友媛)