

硼-碳和硼-氮量子点器件的输运特性研究

李桂琴[†]

(清华大学物理系, 北京 100084)

(2009 年 11 月 6 日收到; 2009 年 11 月 16 日收到修改稿)

用第一性原理研究了硼-碳和硼-氮量子点器件的输运特性以及电流电压特性. 研究表明相同数量原子组成的硼-碳和硼-氮器件其输运特性及电流电压特性有很大差别. 硼-碳器件在 Fermi 能附近有较大的态密度, 而硼-氮器件的能级在 Fermi 能附近有很大的间隙, Fermi 能位于间隙中. 从电流特性中可以看出, 硼-碳器件表现出导体的特性, 而硼-氮器件表现出半导体的特性.

关键词: 硼-碳, 硼-氮, 量子点器件, 输运特性

PACC: 7220, 7115M

1. 引 言

超大规模集成电路经过多年的发展和应用后, 将面临原理性的物理限制和技术性的工艺限制等问题. 减小计算机电路的尺寸, 加强计算性能, 使微电子学向纳电子学发展已成为一种必然的趋势. 而其主要技术挑战之一是将电子设备小型化到原子、分子、纳米尺度. 这就需要深入地了解这一尺度的系统以及它们的物理和化学性质. 最近几年, graphene 已经被作为未来纳米技术的一种可能的重要材料^[1-7]. 这主要是由于这种材料的特殊的电子特性和高稳定性^[1-4, 8]. 由硼原子组成的二维蜂巢结构的纳米材料也具有很丰富的化学性质, 在近几年的研究中也提出了几种可能的比较稳定的结构形式, 并且也在深入探讨其电子特性和用这种材料制备纳米器件的可能性^[9-13].

最近的研究延伸到了硼-碳(B-C)和硼-氮(B-N)材料, 由于二维蜂巢结构的 B-C 和 B-N 材料具有接近于金刚石的硬度, 所以预计这两种材料在未来的纳电子科学中可能也有重要的应用. 在对这两种材料的电子特性的研究中, B-C 的结构往往取 BC3 和 BC7 的二维蜂巢结构. 最近 Lowther 等^[14]研究了二维蜂巢结构的 BC, BC3 和 BC7 的振动能谱, 发现 BC 有一些和 graphene 相似的性质. 本文用第一性原理方法研究了由 B-C 和 B-N 量子点构成的纳电子

器件的输运特性及电流电压特性. 其中二维蜂巢结构的 B-C 量子点是由 14 个 B 原子和 14 个 C 原子组成, 二维蜂巢结构的 B-N 量子点是由 14 个 B 原子和 14 个 N 原子组成. B-C 和 B-N 量子点通过硫(S)原子与无限长的金(Au)电极相连构成器件.

2. 计算方法

为了利用目前已经成熟的理论计算方法^[15, 16], 计算时可将器件分成两部分: 一部分由 B-C 或 B-N 量子点和电极上近邻的金属原子组成, 称为扩展的 B-C 或 B-N 区. 另一部分由电极的剩余部分组成, 称为接触区. 整个系统的电子输运函数通过使用非平衡态格林函数技术进行计算. 其表示式为^[15]

$$T = \text{Tr}(\Gamma_1 \mathbf{G} \Gamma_2 \mathbf{G}^+), \quad (1)$$

式中的 Γ_i 表示谱密度, 描述了第 i 个电极与扩展区域之间的耦合, 可由 $\Gamma_i = i(\Sigma_i - \Sigma_i^+)$ 给出, Σ_i 表示电极的自能. \mathbf{G} 是推迟格林函数, 可由散射区的轻束缚哈密顿量和自能的自洽计算得到. 扩展区域的态密度也可以由格林函数得到

$$d_{\text{dos}}(E) = \text{Tr}\{i[\mathbf{G} - \mathbf{G}^+]\}. \quad (2)$$

对器件加偏压后, 器件两端的电流为

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E, V) [f(E - \mu_1) - f(E - \mu_2)], \quad (3)$$

其中 $f(E)$ 是 Fermi 函数, μ_1, μ_2 是化学势

[†] E-mail: ligqin@mail.tsinghua.edu.cn

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(E/k_B T)},$$

$$\mu_1 = E_f - \frac{1}{2} eV,$$

$$\mu_2 = E_f + \frac{1}{2} eV.$$

3. 结果与讨论

将 B-C 和 B-N 量子点材料通过 S 原子与 Au (111) 电极相连形成三明治结构的纳电子器件. 为了简化计算, 器件中的 Au 电极取有限长度, 即 Au 电极由 13 个原子组成, 沿 (111) 方向, 如图 1 (a), (b) 所示.

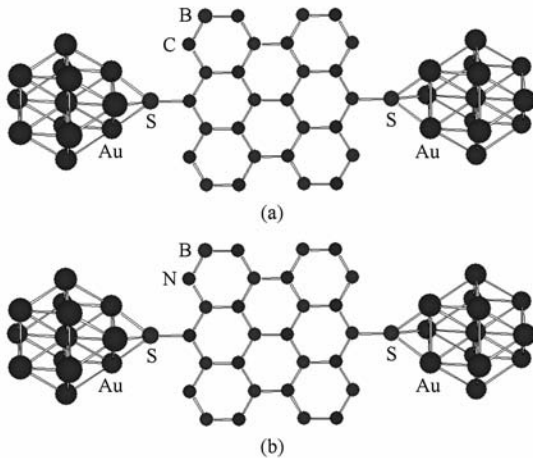


图 1 B-C 和 B-N 纳器件结构图 (a) B-C 量子点与 Au(111) 电极相连, (b) B-N 量子点与 Au(111) 电极相连

本文利用(1)–(3)式首先研究了 B-C 量子点通过 S 原子与 Au 电极相连后的器件的态密度、输运系数和电流电压特性. B-C 量子点的边界取为上下是扶手椅型边界, 左右是锯齿型边界. 即锯齿形边界与电极相连. B—C, S—C, S—B, S—Au, Au—Au 原子之间键长分别为 1.53, 1.97, 1.97, 2.53, 2.88 Å (1 Å = 0.1 nm). 在用第一性原理计算输运特性之前对扩展的 B-C 进行了优化. 优化时应用 Gaussian98 软件包, 采用了密度泛函理论方法和 B3LYP 函数及 6-311G 基组.

图 2 所示为 B-C 量子点器件能量在 -14—-6 eV 范围内的态密度和输运系数. Au (111) 的 Fermi 能取为 -9.5 eV^[15]. 由于 Hückel 能比真空中正确的值低 4—5 eV^[16], 所以这里所取的 Fermi 能的值不同于文献[17]中 Au (111) 的功函数 -5.31 eV.

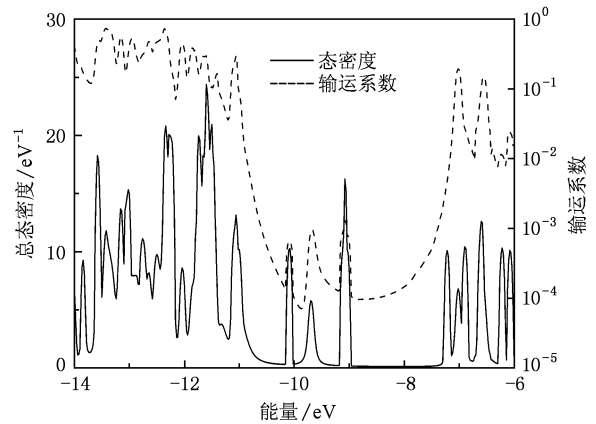


图 2 B-C 量子点器件的态密度和输运系数

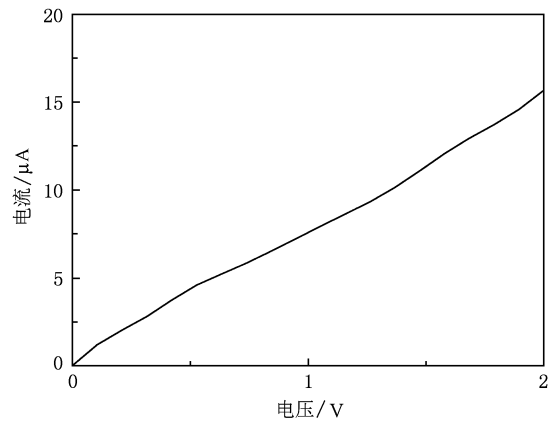


图 3 B-C 量子点器件的电流电压特性

由图 2 可以看出, Fermi 能 (-9.5 eV) 附近的态密度不为零, 表现出此器件具有金属的特性. 图 2 中输运系数峰值的位置与态密度峰值的位置相对应, 这也是导体所具有的性质. B-C 量子点器件所表现出的性质与之前研究过的 graphene 量子点器件的输运特性^[18]类似.

图 3 所示为 B-C 量子点器件的电流电压特性. 随着电压的增加, 电流有一个非线性的增加. 电流大小的量级以及随电压变化的规律与 graphene 量子点器件的结果^[18]也有类似之处.

用同样的方法研究了 B-N 量子点通过 S 原子与 Au 电极相连后的器件的态密度、输运系数和电流电压特性. 对 B-N 器件, 原子之间键长的关系为 B—N 是 1.45 Å, S—B 是 1.97 Å, S—N 是 1.97 Å, S—Au 是 2.53 Å, Au—Au 是 2.88 Å. B-N 量子点的边界也是左右为锯齿型边界, 上下为扶手椅型边界. 图 4 所示为 B-N 量子点器件能量在 -14—-6

eV 范围内的态密度和输运系数. 图 5 所示为 B-N 量子点器件的电流电压特性曲线.

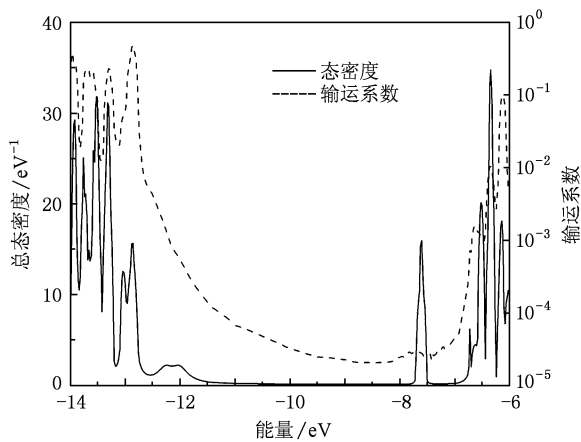


图 4 B-N 量子点器件的态密度、输运系数

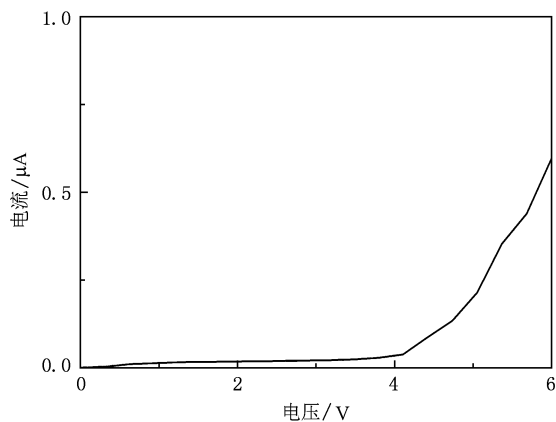


图 5 B-N 量子点器件的电流电压特性

由图 4 可以看出, Fermi 能 (-9.5 eV) 附近的态密度几乎为零. 并且在 Fermi 能附近很大一段范围内 (-11.5 — -7.8 eV 之间) 态密度都是几乎为零. 相应于在 B-N 器件的能带中有一个很大的能级间隔. 图 5 中的电流随电压的变化曲线也体现出半导体的特性. 在电压为 0 — 4 V 之间电流几乎是零, 在电压大于 4 V 电流随电压有一个非线性的增加.

B-N 量子点器件的态密度、输运系数和电流电压特性与 graphene 量子点器件的结果有很大的差别.

尽管最近的研究表明 B-C 和 B-N 材料都具有接近于金刚石的硬度, 具有高稳定性. 但从图 2—图 5 的结果可以看出, 相同数量原子组成的 B-C 和 B-N 量子点器件其输运特性及电流电压特性还是有很大差别的. B-C 纳器件表现出导体的特性, 而 B-N 纳器件表现出半导体的特性.

B-C 纳器件与 graphene 纳器件相比, 虽然 B 原子取代了部分 C 原子, 但所表现出的输运特性及导电特性两者是很相近的. 但 B-N 纳器件与 graphene 纳器件相比却相差很大. 这是由于近邻的 B 原子和 N 原子之间的键是由 B- sp^2 和 N- sp^2 轨道的键的结合形成的. 由于 III-V 族的 B 原子和 N 原子之间的价电子的差别, 在形成双键的过程中, 电子从 B 转移到 N. 所以, 与 graphene 纯共价键不同, B, N 之间的双键具有离子特性. 因而也使得 B-N, 特别是 B-N 量子点具有很宽的带隙. 由此也会导致 B-N 材料具有一些特殊的化学和物理特性^[19-21]. 并且期待在未来的纳电子学的应用中, 可以成为 graphene 纳器件的互补.

4. 结 论

用第一性原理方法并采用非平衡态格林函数技术研究了 B-C 及 B-N 量子点器件的输运特性以及电流电压特性. 其中所用的哈密顿量为轻束缚哈密顿量. B-C 及 B-N 量子点都取作上下为扶手椅型边界, 左右为锯齿型边界, 并且都是通过 S 原子与 Au 电极相连. 虽然研究表明 B-C 和 B-N 材料都具有接近于金刚石的硬度, 具有高稳定性, 从计算结果中可以看到相同原子组成的两种纳器件的输运特性和导电性有很大的差别. B-C 纳器件表现出导体的特性, 而 B-N 纳器件表现出半导体的特性. 因而在未来的应用中也必将发挥不同的作用.

[1] 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
 [2] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 202
 [3] Nomura K, MacDonald A H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 076602

[4] Peres N M R, Guinea F, Castro N A H 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125411
 [5] Andriotis A N, Richter E, Menon M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 152105
 [6] Li A H, Zhang K W, Meng L J, Li J, Liu W L, Zhong J X 2008

- Acta Phys. Sin.* **57** 4356 (in Chinese) [李爱华、张凯旺、孟利军、李俊、刘文亮、钟建新 2008 物理学报 **57** 4356]
- [7] Li G Q, Cai J, Deng J K, Rocha A R, Sanvito S 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 163104
- [8] Tan C L, Tan Z B, Ma L, Chen J, Yang F, Qu F M, Liu G T, Yang H F, Yang C L, Lü L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5726 (in Chinese) [谭长玲、谭振兵、马丽、陈军、杨帆、屈凡明、刘广同、杨海方、杨昌黎、吕力 2009 物理学报 **58** 5726]
- [9] Tang H, Ismail-Beigi S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 115501
- [10] Evans M H, Joannopoulos J D, Pantelides S T 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045434
- [11] Lau K C, Pandey R 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 2906
- [12] Li G Q 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 193116
- [13] Li G Q 2010 *Chin. Phys. B* **19** 017201
- [14] Lowther J E, Zinin P V, Ming L C 2009 *Phys. Rev. B* **79** 033401
- [15] Tian W, Datta S 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 2874
- [16] Zahid F, Paulsson M, Datta S 2003 *Electrical Conduction Through Molecules* (New York: Academic)
- [17] Lide D R 2000 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (Boca Raton FL: CRC)
- [18] Li G Q, Cai J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6453 (in Chinese) [李桂琴、蔡军 2009 物理学报 **58** 6453]
- [19] Pacilé D, Meyer J C, Girit C Ö, Zettl A 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 133107
- [20] Zhi C, Bando Y, Tang C, Golberg D 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 063107
- [21] Golberg D, Rode A, Bando Y, Mitome M, Gamaly E, Luther-Davies B 2003 *Diamond Relat. Mater.* **12** 1269

Transport properties of boron-carbon and boron-nitride quantum dot device

Li Gui-Qin[†]

(Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 6 November 2009; revised manuscript received 16 November 2009)

Abstract

The transport properties and I - V characteristics of boron-carbon and boron-nitride quantum dot devices are investigated by first principles method. The results of the B-C and B-N devices consisting of the same number of atoms have significant differences. There is large density of states near the Fermi energy for B-C device. A wide gap in the density of states of B-N device exists and the Fermi energy lies in the gap. The B-C device reveals metal property and the B-N devices appear as semiconductors.

Keywords: boron-carbon, boron-nitride, quantum dot device, transport property

PACC: 7220, 7115M

[†] E-mail: ligqin@mail.tsinghua.edu.cn