

A-Z-A 型石墨烯场效应晶体管吸附效应的第一性原理研究*

秦军瑞[†] 陈书明 张超 陈建军 梁斌 刘必慰

(国防科技大学计算机学院, 长沙 410073)

(2010年10月6日收到; 2011年5月23日收到修改稿)

利用第一性原理的计算方法, 研究了 A-Z-A 型 GNR-FET 的电子结构和输运性质及其分子吸附效应. 得到了以下结论: 纯净的 A-Z-A 型 GNR-FET 具有典型的双极型晶体管特性, 吸附分子的存在会使纳米带能隙变小. 对于吸附 H, H₂, H₂O, N₂, NO, NO₂, O₂, CO₂ 和 SO₂ 分子的情况, A-Z-A 型 GNR-FET 仍然保持着场效应晶体管的基本特征, 但吸附不同类型的分子会使 GNR-FET 的输运特性发生不同程度的改变; 对于吸附 OH 分子的情况, 输运特性发生了本质的改变, 完全不具有场效应晶体管的特性. 这些研究结果将有助于石墨烯气体探测器的工程实现, 并对应用于不同环境中 GNR-FET 的设计具有重要指导意义.

关键词: 石墨烯纳米带, 石墨烯晶体管, 分子吸附, 电子结构

PACS: 31.15.eg, 68.43.Bc, 68.43.Fg, 73.22.Pr

1 引言

硅材料的加工极限一般认为是 10 nm 线宽. 受物理和几何极限的制约, 小于 10 nm 时就不太可能生产出性能稳定、集成度更高的产品. 可以预见未来基于纳米尺寸材料的纳米电子器件将取代传统的 CMOS 器件, 分子或新型的量子输运机理如自旋电流将代替电荷电流, 该技术将延长摩尔定律的寿命, 有望为研制新型超高速计算机芯片带来突破.

石墨烯纳米带 (graphene nanoribbons, GNRs), 作为一种新型的碳基纳米材料, 引起了人们的极大研究兴趣. 石墨烯纳米带是具有一定宽度、无限长度的蜂窝状二维晶体, 它是单原子层的石墨晶体薄膜, 其晶格是由碳原子构成的二维蜂窝结构. 在这种具有开放边的 SP² 碳网状体系中, 边缘碳原子的几何排列在电子态中发挥重要的作用, 该材料具有许多新奇的物理特性. 因为类似碳纳米管 (CNTs) 的结构和量子限域效应^[1-3], 这种石墨烯纳米带可能具有类似碳纳米管的电子特性. 石墨烯是一种零带隙半导体材料, 具有远比硅高的载流子迁移率,

从理论上说, 它的电子迁移率和空穴迁移率两者相等. 此外, 因为其具有零禁带特性, 即使在室温下载流子在石墨烯中的平均自由程和相干长度也可为微米级, 所以它是一种性能优异的半导体材料. 与单壁碳纳米管类似, 石墨带可以分成 armchair 型石墨带 (具有 zigzag 边缘) 和 zigzag 型石墨带 (具有 armchair 边缘), 同时定义两个指标 (m, n) 标定一定宽度和长度的石墨带, 沿宽度方向一排碳原子的个数定义为宽度 m , 沿长度方向最小周期性单元重复的数目定义为长度 n .

基于石墨烯纳米带可以设计和制造具有基本功能的器件, 这些基本功能器件包括整流器、pn 结、场效应晶体管等^[4], 由于两个金属-半导体结可以构成一个场效应晶体管, zigzag 型石墨带呈现半导体特性, armchair 型石墨带呈现金属特性, 因此将 zigzag 型石墨烯作为沟道连接两个 armchair 型金属导线 (源和漏) 则构成石墨烯场效应晶体管, 图 1 给出了由 2 nm 长的本征 (4, 3)zigzag 型半导体沟道连接两个 (6, 3)armchair 型金属导线 (源和漏) 构成了 A-Z-A 型 GNR-FET 结构图, 图中灰色

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 60836004) 和国家自然科学基金 (批准号: 61006070) 资助的课题.

[†] E-mail: qinjr@nudt.edu.cn

代表 C 原子, A-Z-A GNR-FET 的边缘悬挂键用 H 原子钝化 (白色原子). 对于半导体型石墨带, 根据随带宽不同而变化的振荡能隙特性, 可以设计石墨带的不同电子结构. 因此, 利用不同结构的石墨烯结则可能构建功能电路. 另外, 文献 [5—8] 的纳米制图技术达到了控制宽度和方向的目的, 最近的试验 [9,10] 表明 GNRs 可以通过单一的石墨烯层制图工艺制作成器件结构, 甚至制造集成电路.

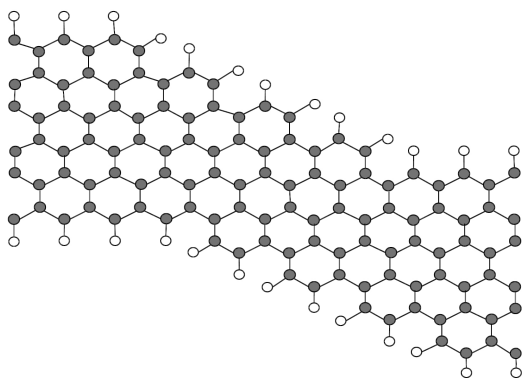


图 1 (4,3)zigzag 型半导体连接两个 (6,3)armchair 型金属导线 (源和漏) 构成的 A-Z-A 型 GNR-FET 结构示意图 (其中灰色代表 C 原子, 白色代表 H 原子)

石墨烯局部结构的改变可以极大的影响其电学特性, 文献 [11, 12] 报道了石墨纳米带的边沿缺陷效应. 同半导体相比, 通过对石墨烯进行栅压控制或分子吸附则可能会应用在电子器件和化学传感器中. 最近研究表明调整栅压会使石墨烯声子发生规律性的改变 [13,14]. 实验和理论上对石墨烯相关化学传感器的特性都有研究 [15,16], 最近的试验 [15] 表明石墨烯作为固态气体探测器具有极度的敏感性, 甚至可以探测出单个分子. 此外, 通过气体掺杂可以调整石墨烯的电学和磁学性质 [17-20]. 但以上的研究工作都是针对 GNRs 展开的, 而 GNRs 场效应晶体管将会是未来集成电路的发展方向之一, 但到目前为止还没有关于 GNR-FET 吸附特性的研究报告, 因此对 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附效应的研究具有重要的意义. 本文利用第一性原理电子计算方法, 探讨了 A-Z-A 型 GNR-FET 的能带结构和输运性质及其吸附效应.

2 模拟与计算方法

几何结构松弛和电子结构的计算是采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的平

面波赝势法. 在进行几何结构松弛和能带结构的计算中, 采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 处理交换相关势能, 布里渊区积分通过 Monkhost-pack 方法自动产生, 用 $1 \times 1 \times 16$ 的 k 点抽样对应简约布里渊区.

电子输运性质是基于 DFT 和非平衡格林函数 (non-equilibrium Green's function formalism, NEGF) 的第一性计算原理方法完成的. 在此基础上, 利用非平衡格林函数方法来处理纳米器件在外置偏压下的电子输运性质. 在本工作中, 交换关联函数采取 GGA, 用 $1 \times 1 \times 50$ 的 k 点抽样对应简约布里渊区, 自洽计算中 Mesh Cutoff 取为 100 Ry 以达到计算效率和精度的平衡.

3 计算结果与讨论

3.1 纯净 A-Z-A 型 GNR-FET 的电子结构及其性质

图 2(a) 给出了长度为 2 nm 的 (4,3)zigzag 型 GNRs 费米面附近的能带结构, 图中的虚线代表体系的费米能级. 从图中可以看出, zigzag 型 GNRs 费米能级附近具有一定的能隙, 禁带宽度为 0.338 eV, 表现为半导体特性, 图 2(b) 给出了该结构的态密度图 (DOS), 其中能量为 0 的位置代表费米能级, 可以看到在费米能级附近可供电子填充的能级近似为 0. 图 3 给出了图 1 结构的典型 $I-V_{gs}$ 曲线, 在 -2.0 到 1.6 V 的电压窗口中, GNR-FET 表现出近似对称的 $I-V_{gs}$ 曲线, 具有极好的双极晶体管特性. 开启电流 I_{on} 为 $0.53 \mu A$, 在 -0.6 V 栅压处晶体管于关态, 最小漏电流 I_{off} 为 $0.16 \mu A$, 电流的开关比 $I_{on}/I_{off} = 5.3$, 虽然该结构的开关比较小, 但是电导值很大, 并且电流几乎达到了饱和, 这种器件更适合应用于模拟电路中. 图 4 为该 GNR-FET 结构的电导随栅压的变化关系, 图 5 给出了该结构的 $I-V_b$ 曲线, 可以看到具有较好的半导体特性.

3.2 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附分子的电子结构及其性质

初始状态下, 放置分子距 GNRs 平面 3 Å 处, 结构松弛计算的约束条件是系统的能量最低并且原子力最小, 处于精度和计算效率的折中考虑, 我们

设置 Energy 为 2.7×10^{-3} eV, Max force 为 0.5 eV, Max displacement 为 0.05 Å. 吸附分子的石墨烯几何松弛后的结构如图 6 所示, 通过比较吸附系统的总能量及吸附分子放置 GNRs 足够远处的系统总能量, 就可以得到吸附能. 表 1 给出了 GNRs 吸附不同分子的吸附能及松弛后分子距离石墨烯平面

的距离 d .

对于吸附 H 原子的情况, 起初 H 距 GNRs 平面 C 原子为 3 Å, 在松弛的过程中, 由于 H 原子距离 C 原子较远, 因此成键很弱, 松弛后的间距约为 2.993 Å, 基本没有变化, 并且吸附能为很小的正数, 即在这种情况下 H 原子也属于物理吸附.

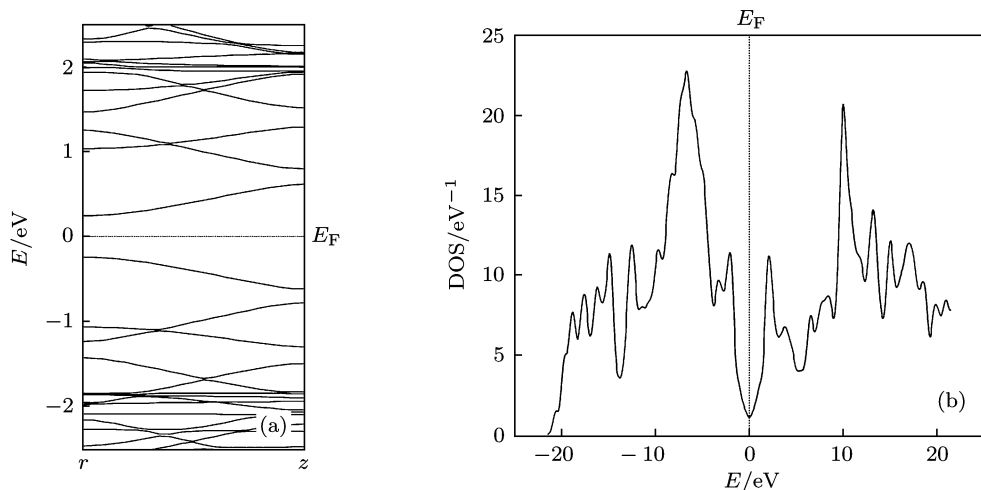


图 2 纯净 zigzag 型 GNRs 费米面附近的能带结构及态密度

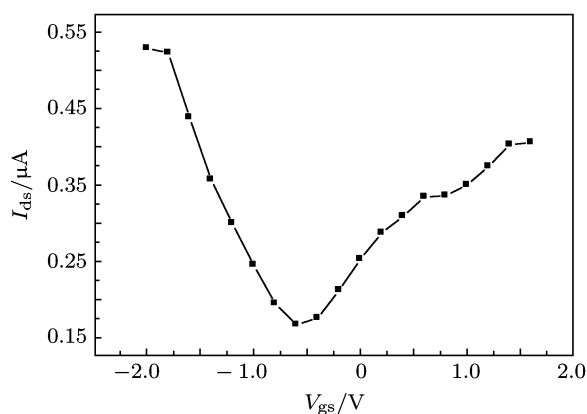


图 3 纯净 A-Z-A 型 GNR-FET 的 I - V_{gs} 曲线

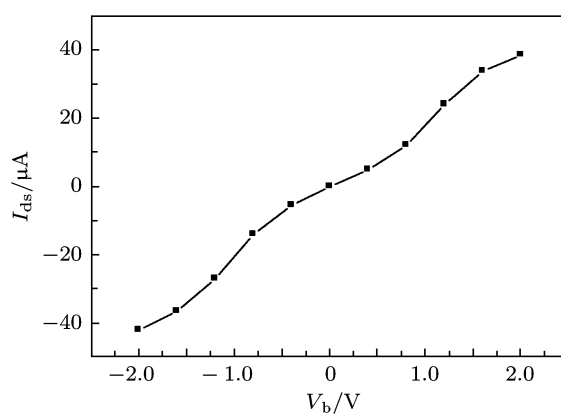


图 5 纯净 GNR-FET 的 I - V_b 曲线

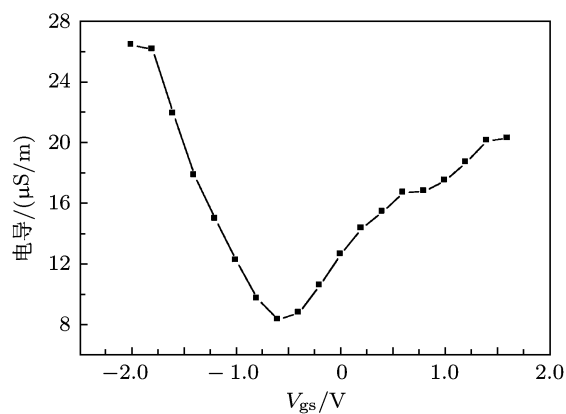


图 4 纯净 A-Z-A 型 GNR-FET 的 C - V_{gs} 曲线

对于吸附 H_2 , H_2O , N_2 , NO , NO_2 , O_2 , CO_2 , SO_2 的情况, 起初放置分子距离石墨烯平面的 C 原子为 3 Å, 在松弛的过程中, 吸附分子远离 GNRs, GNRs 面上吸附位置的 C 原子也远离吸附分子, 因而 GNR 平面弯曲形成凹形的石墨带. 可以将结构松弛理解为吸附分子与 GNR 相互排斥的过程, 最终达到能量最低及原子力最小, 因此稳定结构中吸附分子与 GNR 的距离均大于初始设定的距离 3 Å. 对于吸附 H_2O 分子的情况, 我们计算得到的松弛距离是 3.181 Å, 这与其他文献中的理论数值 3.5 Å 是比较接近的 [21]. 通过表 1 可以看到 H_2 , H_2O , N_2 ,

NO, NO₂, O₂, CO₂, SO₂ 的吸附能均大于 0, 这表明吸附系统的总能量是大于 GNR 的能量与吸附分子

能量之和的, 并且系统的吸附能都较小, 因此这些分子与 GNR 的 C 原子并不成键, 都属于物理吸附.

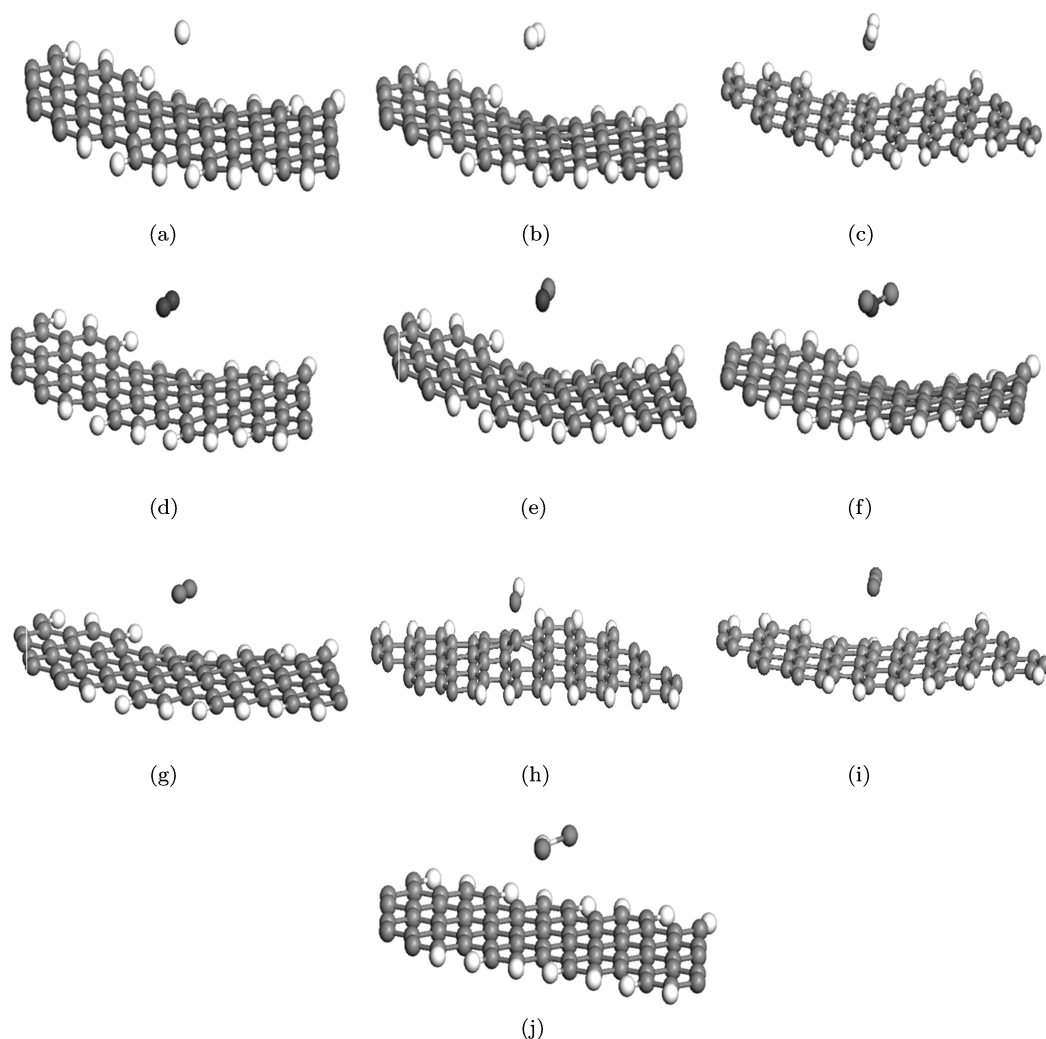


图 6 依据能量最低和原子力最小的原则, 石墨烯吸附不同分子的优化结构 (a)H; (b) H₂; (c) H₂O; (d) N₂; (e) NO; (f) NO₂; (g) O₂; (h) OH; (i) CO₂; (j) SO₂

表 1 GNR 吸附不同分子的吸附能及有效距离

分子类型	H	H ₂	H ₂ O	N ₂	NO	NO ₂	O ₂	OH	CO ₂	SO ₂
吸附能 (binding energy)/eV	0.143	0.139	0.161	0.245	0.056	0.300	0.180	-1.265	0.090	0.140
有效距离(<i>d</i>)/Å	2.993	3.200	3.181	3.347	3.010	3.072	3.255	1.489	3.291	3.127
禁带宽度/eV	0.332	0.337	0.334	0.121	0.155	0.055	0.130	0.090	0.071	0.046

对于吸附中性 OH 分子的情况, 起初放置 H 距 GNRs 平面 C 原子为 3Å, 在松弛的过程中, O 原子与垂直方向的 GNRs 上 C 原子形成共价键, 同时 CNRs 上吸附位置的 C 原子凸起, 与其他吸附情况不同, GNRs 平面弯曲形成凸形的石墨带. 可以将结构松弛理解为吸附分子与 GNRs 相互吸引的过程, 最终达到能量最低及原子力最小, 因此稳定结构中吸附分子与 GNRs 的距离为 1.489Å, 远小于

初始距离. 吸附能为 -1.265 eV 表明松弛后的吸附结构比 GNRs 和孤立的 OH 分子结构更加稳定, 因此 OH 分子属于化学吸附.

单壁碳纳米管 (SWCNT) 与分子的相互作用将会导致 SWCNT 电学性质发生很大的改变 [22]. 那么石墨烯场效应晶体管吸附分子后性能是如何变化的呢, 下面我们从用能带图、透射谱 $T(E)$ 、输运特性 $I-V$ 和电导等方面来表征其电

学性质的变化.

3.2.1 吸附分子对 A-Z-A 型 GNR-FET 能带结构的影响

图 7 给出了吸附不同分子的 zigzag 型石墨带费米面附近的能带结构. 将费米能级处的能量值取为 0, 图中的虚线代表费米能级. 吸附分子的引入使得完整石墨带价带顶能带的能量有所降低, 导带底能带的能量上升, 吸附各类分子后的能带能隙均有

所降低, 具体数值如表 1 所示.

对于吸附 H, H₂, N₂, NO₂ 和 CO₂ 分子的情况, 吸附分子仅使石墨带导带底和价带顶的能级位置发生了改变; 对于吸附 H₂O 和 SO₂ 分子的石墨带, 能隙中费米能级附近引入了一条和吸附分子相关的能带; 对于吸附 O₂ 和 NO 分子的情况, 能隙中引入了两条和吸附分子相关的能带, 分别位于费米能级附近的上方和下方; 与其他吸附情况不同, 对于吸附 OH 分子的石墨烯, 能隙中引入了一条穿过费米能级倾斜的能级.

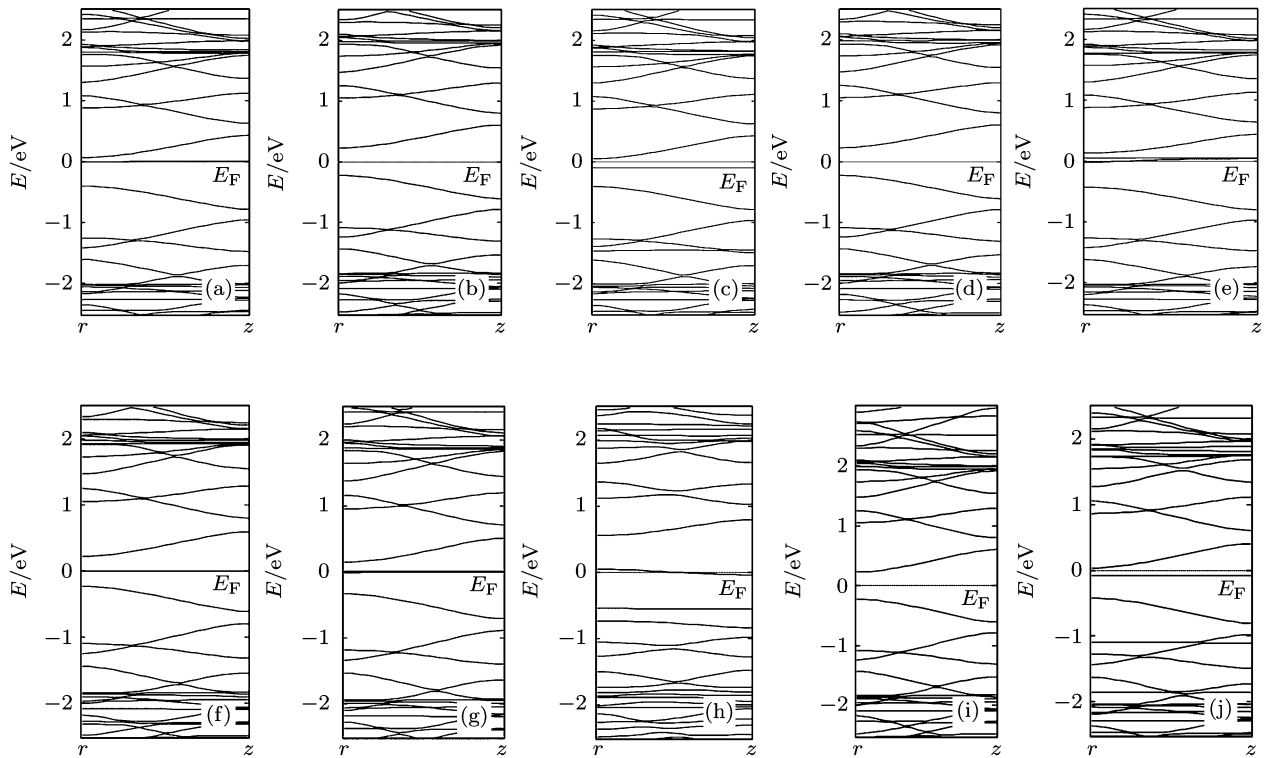


图 7 zigzag 型 GNRs 吸附不同分子的费米面附近能带结构 (a) H 原子; (b) H₂ 分子; (c) H₂O 分子; (d) N₂ 分子; (e) NO 分子; (f) NO₂ 分子; (g) O₂ 分子; (h) OH 根离子; (i) CO₂ 分子; (j) SO₂ 分子

3.2.2 吸附分子对 A-Z-A 型 GNR-FET 透射谱的影响

通过研究 A-Z-A 型 GNR-FET 分别吸附 H, H₂, H₂O, N₂, NO, NO₂, O₂, CO₂, SO₂ 和 OH 分子平衡时的透射谱 $T(E)$, 并和没有吸附分子的纯净 GNR-FET 进行了比较. 根据 $T(E)$ 的不同试验结果可分为两类, 第一类是 H, H₂, H₂O, N₂, NO, NO₂, O₂, CO₂, SO₂ 和 SO₂ 分子, 它们的透射谱 $T(E)$ 几乎一致, 并且和纯净 GNR-FET 的 $T(E)$ 差异很小, 第二类是 OH 分子, 它的 $T(E)$ 与吸附其他分子

的 $T(E)$ 差别很大, 与纯净 GNR-FET 的 $T(E)$ 也完全不同, 图 8(a) 和 (b) 分别为 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附 CO₂ 和 OH 分子透射谱 $T(E)$ 与纯净 GNR-FET 透射谱 $T(E)$ 的比较. 由图可知, 对于纯净的 GNR-FET, 费米能级附近的透射系数近似为 0, 这是由于 zigzag 型 GNRs 表现为半导体特性的原因, 并且在费米能级左右各有 3 个关于费米能级对称的共振峰, 由此也可知 A-Z-A 型 GNR-FET 输运表现为典型的双极晶体管特性. 但对于吸附 OH 分子的情况, 透射系数在以费米能级为中心的很大范围内都很小, 这就导致吸附 OH 分子后的 GNR-FET 输

运特性发生很大的变化, 导电性能变的很差. 由前一节分析可知, 除 OH 分子与 GNR-FET 的吸附属于化学吸附外, 其他分子的吸附均为物理吸附, 化学吸附即为吸附分子与 GNR 形成化学键,

导致 GNR-FET 的化学结构发生改变, 因而透射谱 $T(E)$ 也会发生较大变化, 而物理吸附并不改变 GNR-FET 的化学结构, 因此透射谱 $T(E)$ 变化不大.

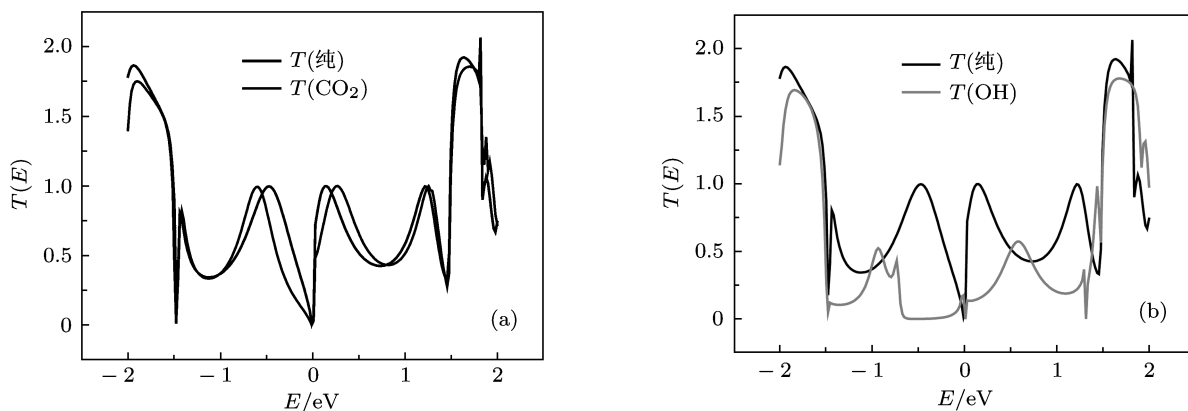


图8 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附分子后的透射谱与纯净 GNR-FET 透射谱的比较 (a) CO₂ 分子; (b) OH 分子

3.2.3 吸附分子对 A-Z-A 型 GNR-FET 输运性质的影响

首先设置源漏偏压为 20 mV, 研究吸附不同分子的 $I-V_{gs}$ 曲线并与纯净 GNR-FET 的 $I-V_{gs}$ 进行比较, 在 -2.0 到 1.6 V 的电压窗口中, 吸附 H₂, H₂O, N₂, NO, NO₂, O₂, CO₂, SO₂ 和 SO₂ 分子的 GNR-FET 均表现出近似对称的 $I-V_{gs}$ 曲线, 也具有极好的双极晶体管特性. 图 9(a) 给出了 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附 H₂, CO₂ 和 N₂ 分子的 $I-V_{gs}$ 特性与纯净 GNR-FET $I-V_{gs}$ 的比较. 由图可知, 与纯净 GNR-FET 相比, 吸附分子后的 $I-V_{gs}$ 会发生偏移, 并且使晶体管关断时的栅压也会改变, 出现在 V_{gs} 约为 -0.4 V 处. 当 V_{gs} 小于 0.8 V 时, 吸附分子的 FET 电流值均小于纯净 FET 的电流值, I_{off} 电流的最大差异可达 0.11μ A.

对于吸附 OH 分子的情况, 在 -2.0 到 1.6 V 的电压窗口中, GNR-FET 的 $I-V_{gs}$ 并不具有双极特性, 电流值非常的小, 并且几乎不随栅压发生改变, 如图 9(b) 所示. 图 10(a) 给出了 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附 H₂, CO₂ 和 N₂ 分子时的电导与栅压的关系并与纯净 GNR-FET 的比较, 图 10(b) 给出了 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附 OH 分子时的电导与栅压的关系并与纯净 GNR-FET 的比较, 有图可知电导随栅压的变化关系与电流随栅压的变化趋势完全一致, 从理论上并不难理解, 这是因为在固定源漏偏压的情

况下, GNR-FET 的电流与电导是成正比的.

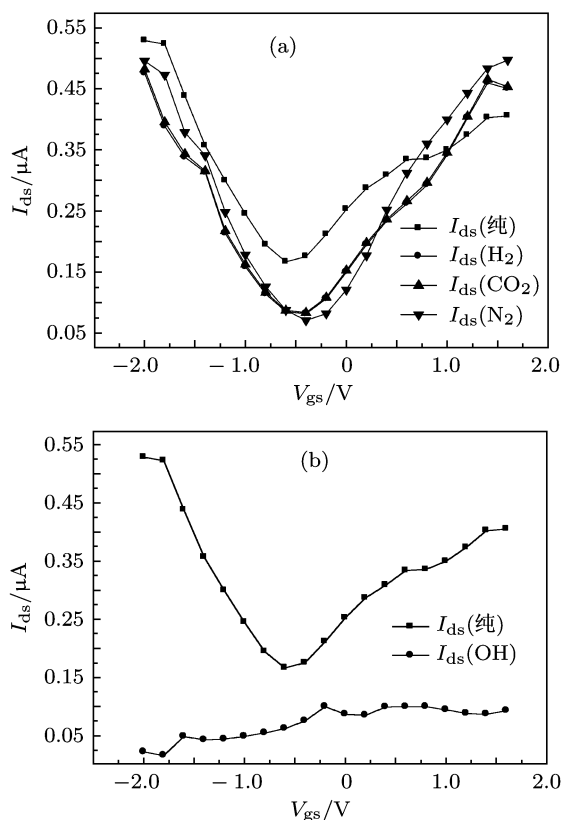


图9 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附分子后的 $I-V_{gs}$ 特性与纯净 GNR-FET $I-V_{gs}$ 的比较 (a) H₂, CO₂ 和 N₂ 分子; (b) OH 分子

为研究 GNR-FET 吸附分子的 $I-V_b$ 特性, 固定

栅压为 0.6 V, 偏压从 -2 V 变化到 2 V (偏压规定为源端电压与漏端电压之差), 研究吸附不同分子的 $I-V_b$ 曲线变化趋势并与纯净 GNR-FET 的 $I-V_b$ 进行比较. 吸附 H, H₂, H₂O, N₂, NO, NO₂, O₂, CO₂ 和 SO₂ 分子的 GNR-FET 的 $I-V_b$ 均表现出半导体特性, 并且差别较小. 图 10(a) 给出了 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附 H₂, CO₂ 和 N₂ 分子的 $I-V_b$ 特性与纯净 GNR-FET $I-V_b$ 的比较. 由图可知, 吸附不同分子的 $I-V_b$ 曲线各不相同, 并且与纯净 GNR-FET 相比, 相同偏压下吸附分子后 GNR-FET 的电流值都会略变小.

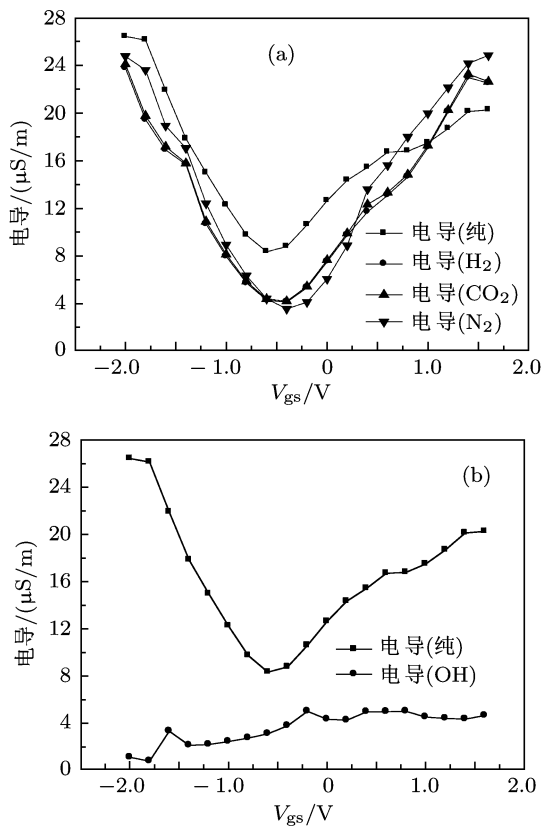


图 10 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附分子后的电导 - 栅压关系与纯净 GNR-FET 的比较 (a) H₂, CO₂ 和 N₂ 分子; (b) OH 分子

对于吸附 OH 分子的情况如图 9(b) 所示, 在 -2.0 到 2 V 的电压窗口中, 电流随偏压的变化较小, 对于纯净的 GNR-FET, 在 2 V 的偏压下电流约为 40 μ A, 而吸附 OH 分子的 GNR-FET 的电流仅为 16 μ A, 电流随偏压的关系表现出一定的绝缘体特性.

通过以上对 GNR-FET 吸附分子的 $I-V_{gs}$ 和 $I-V_b$ 两类运输特性及电导的分析研究, 可以看到吸附 H, H₂, H₂O, N₂, NO, NO₂, O₂, CO₂ 和 SO₂ 分子

的运输特性与纯净 GNR-FET 相比变化不大, 仍然保持着场效应晶体管的基本特性, 但对于吸附不同分子的情况, 运输特性也存在差异. 而对于吸附 OH 分子的情况, 运输特性发生了本质的改变, 完全不再具有场效应晶体管的特性. 该结论可以用相关的透射谱理论进行解释.

式 (1) 是著名的 Landauer-Büttiker 公式, 它是描述介观输运体系输运性质的一个著名公式, 它把导体中的电流和电子能透过它的几率联系起来. 在绝对零度下, 电流为

$$I = \frac{2e}{h} T [\mu_1 - \mu_2], \quad (1)$$

$T = \sum_i \tau_i$ 即为透射函数, 它反映电子通过导体的概率, τ_i 代表一个本征通道的贡献, \sum_i 表示对所有本征通道的贡献求和; μ_1 和 μ_2 为导体左右两边的化学势. 电导则为

$$G = \frac{2e^2}{h} T. \quad (2)$$

由以上公式可知, 只要电子通过体系的透射函数已知, 即可计算出体系的电流和电导.

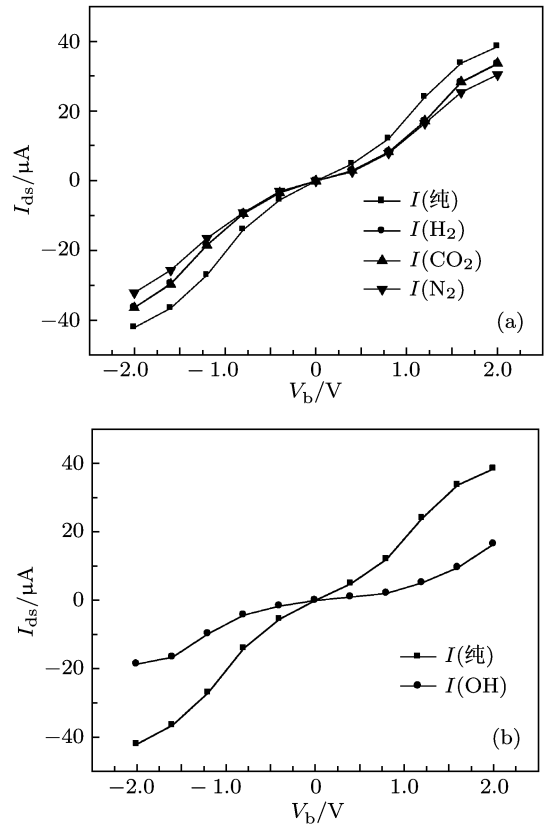


图 11 A-Z-A 型 GNR-FET 吸附分子后的 $I-V_b$ 特性与纯净 GNR-FET $I-V_b$ 的比较 (a) H₂, CO₂ 和 N₂ 分子; (b) OH 分子

由前面分析可知, 对于吸附 OH 分子的情况, 透

射系数在以费米能级为中心的很大范围内都很小,因而吸附 OH 分子体系的电流和电导也很小. 究其原因,这是由于 OH 分子与 GNR-FET 的吸附属于化学吸附所导致,可见吸附类型对 GNR-FET 的输运性质有非常重要的影响.

由于 GNR-FET 吸附不同分子时的 I - V 特性曲线会各不相同,我们可以利用这种差异设计气体分子探测器,根据 GNR-FET 表现出的不同输运特性,进而确定所吸附的气体种类.

4 结论

利用第一性原理电子结构和输运性质计算方法,研究了 A-Z-A 型 GNR-FET 的电子结构和输

运性质及其分子吸附效应. 得到了以下结论: 纯净的 A-Z-A 型 GNR-FET 具有典型的双极晶体管特性,吸附分子的存在会使纳米带能隙变小,对于吸附 H, H₂, H₂O, N₂, NO, NO₂, O₂, CO₂ 和 SO₂ 分子的情况, A-Z-A 型 GNR-FET 仍然保持着场效应晶体管的特征,但吸附不同类型的分子会使 GNR-FET 的输运特性发生不同程度的改变,而对于吸附 OH 分子的情况,输运特性发生了本质的改变,完全不具有场效应晶体管的特性. 出现这种差别的原因是前者与 GNR-FET 的作用均属于物理吸附,而 OH 分子与 GNR-FET 的作用则属于化学吸附. 这些研究结果将有助于石墨烯气体探测器的工程实现,并对应用于不同环境中 GNR-FET 的设计具有重要指导意义.

- [1] Zhang Z X, Zhang G M, Du M, Jin X X, Hou S M, Sun J P, Gu Z N, Zhao X Y, Liu W M, Wu J L, Xue Z Q 2002 *Chin. Phys.* **11** 804
- [2] Cao J X, Yan X H, Xiao Y, Ding J W 2003 *Chin. Phys.* **12** 1440
- [3] Kong W J, Lu L, Zhang D L, Pan Z W 2006 *Chin. Phys.* **15** 2090
- [4] Yan, Q M, Huang, B, Yu J, Zheng F W, Zang J, Wu J, Gu B L, Liu F, Duan W H 2007 *Nano Lett.* **7** 1469
- [5] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [6] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [7] Zhang Y, Tan Y W, Stormier H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201
- [8] Berger C, Song Z, Li X, Wu X, Brown N, Nafud C, Mayo D, Li T, Hass J, Marchenkov A N, Conrad E H, First P N, de Heer W A 2006 *Science* **312** 1191
- [9] Chen Z, Lin Y M, Rooks M J, Avouris P 2007 *cond-mat/0701599*.
- [10] Han M Y, Oezylmaz B, Zhang Y, Kim P 2007 *cond-mat/070251*
- [11] Ouyang F P, Xu H, Wang H Y, Xiao J 2008 *Acta Phys. Chim. Sin.* **24** 328(in Chinese) [欧阳方平, 徐慧, 王焕友, 肖金 2008 物理化学学报 **24** 328]
- [12] Ouyang F P, Xu H, Wang H Y, Wei C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1073 (in Chinese) [欧阳方平, 徐慧, 王焕友, 魏辰 2008 物理学报 **57** 1073]
- [13] Pisana P, Lazzeri M, Casiraghi C, Novoselov K S, Geim A K, Ferrari A C, Mauri F 2007 *Nature Mater.* **6** 198
- [14] Das A, Pisana S, Chakraborty B, Piscanec S, Saha S K, Waghmare U V, Novoselov K S, Krishnamurthy H R, Geim A K, Ferrari A C, Sood A K 2008 *Nat. Nanotechnol.* **3** 210
- [15] Schedin F, Geim A K, Morozov S V, Hill E W, Blake P, Katsnelson W I, Novoselov K S 2007 *Nature Mater.* **6** 652
- [16] Wehling T O, Novoselov K S, Morozov S V, Vdovin E E, Katsnelson M I, Geim A K, Lichtenstien A I 2008 *Nano Lett.* **8** 173
- [17] Zhou S Y, Siegel D A, Fedorov A V, Lanzara A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 086402
- [18] Berashevich J, Chakraborty T 2009 *Phys. Rev. B* **80** 033404
- [19] Ribeiro R M, Peres N M R, Coutinho J, Briddon P R 2008 *Phys. Rev. B* **78** 075442
- [20] Rosales L, Pacheco M, Barticevic Z, Latg'e A, Orellana P A 2009 *Nanotechnology* **5705**
- [21] Cabrera Sanfelix P, Holloway S, Kolasinski K E, Darling G R 2003 *Surf. Sci.* **532-535** 166
- [22] Shin H, Kim S M, Yoon S, Benayad A, Kim K K, Kim S J, Park H J, Choi J, Lee Y H 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 2062

First-principles study of adsorption effect of A-Z-A graphene nanoribbons field effect transistor*

Qin Jun-Rui[†] Chen Shu-Ming Zhang Chao Chen Jian-Jun Liang Bin Liu Bi-Wei

(College of Computer, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

(Received 6 October 2010; revised manuscript received 23 May 2011)

Abstract

By performing first-principles calculations, we demonstrate the electronic structure, the transport properties, and the adsorption effect of A-Z-A graphene nanoribbons field effect transistor. It is concluded that the pure A-Z-A GNR-FET has typical bipolar characteristics, and energy gaps will become smaller due to the adsorbed molecule. For the adsorption of H, N₂, NO₂, H₂O, SO₂, O₂ and NO, A-Z-A GNR-FET remains typical bipolar characteristic, but shows a little difference in transport property after it has adsorbed different types of molecules. For the adsorption of OH, transport property changes totally and does not have a bipolar characteristic any more. These results may contribute to the implementation of gas detector based on GNRs and the design of GNR-FET applied in complex environments.

Keywords: graphene nanoribbons, graphene nanoribbons field effect transistor, molecule adsorption, electronic structure

PACS: 31.15.eg, 68.43.Bc, 68.43.Fg, 73.22.Pr

* Project supported by the Key Program of National Natural Science foundation of China (Grant No.60836004) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61006070).

[†] E-mail: qinjr@nudt.edu.cn