

辐照损伤石墨烯纳米带器件的输运特性

顾天阳¹⁾ 刘剑利²⁾ 张景波^{1)†}

1) (哈尔滨工业大学物理学院, 哈尔滨 150001)

2) (哈尔滨工业大学, 空间环境与物质科学研究院, 哈尔滨 150001)

(2025 年 11 月 14 日收到; 2026 年 1 月 5 日收到修改稿)

石墨烯纳米带在纳米级半导体器件领域有巨大应用潜力, 人们在制备高性能石墨烯纳米带场效应管上做了许多尝试. 本文基于非平衡态格林函数方法和紧束缚模型, 研究辐照环境下, 高能粒子在石墨烯纳米带中产生随机空位点缺陷, 对石墨烯纳米带场效应晶体管输运特性的影响. 结果表明: 辐照诱导的位移损伤会破坏石墨烯纳米带的平移对称性, 使体系产生结构无序并进一步引发 Anderson 局域化现象; 随着辐照引入的点缺陷数量增加, 器件输运性能快速衰减, 开关效应受到显著抑制, 当结构无序程度达到局域化阈值后, 后续辐照对器件性能的影响趋于平缓. 此外, 研究发现相同数量的点缺陷中, 聚合分布形式对器件输运特性的破坏作用显著弱于随机分布形式.

关键词: 非平衡态格林函数, 石墨烯纳米带, 量子输运, 辐照损伤

DOI: 10.7498/aps.75.20251556

CSTR: 32037.14.aps.75.20251556

1 引言

石墨烯是一种二维材料, 由排列为蜂窝网格形状的单层碳原子组成, 自 2004 年首次成功制备^[1]以来, 它展现出很多优异的性质, 例如 Klein 隧穿^[2]、狄拉克颤动^[3]、极高的电子迁移率^[4,5]等, 在电子学领域得到了广泛的研究^[6,7], 也在电子器件领域吸引了浓厚的研究兴趣^[8,9]. 但它零带隙的特性限制了其在新型纳米器件领域的进一步应用, 为解决这一关键问题, 研究者提出了多种能带工程策略以诱导石墨烯打开带隙. 其中, 石墨烯纳米带作为一种准一维纳米结构, 通过精确控制石墨烯的边缘构型与宽度, 利用量子限域效应成功实现了可调控的能带带隙, 为石墨烯基纳米电子器件的发展提供了有效途径^[10,11]. 根据边缘构型, 石墨烯纳米带可以分为扶手椅型石墨烯纳米带和锯齿型石墨烯纳米带. 锯齿型石墨烯纳米带始终表现为零带隙^[12], 而扶手椅型石墨烯纳米带根据纳米带宽度决定带

隙宽度^[13].

石墨烯纳米带是一种在宽度方向受到量子限域约束、而在传输方向保持周期性的准一维纳米材料. 该结构既保留了石墨烯高载流子迁移率等特性, 又因边缘效应和量子限域作用而展现出可调控的电子能带结构、整流现象以及负微分电阻现象等性质^[14,15]. 石墨烯纳米带可以通过掺杂等方式来调整或优化性能^[16,17]. Niu 等^[16]建模了四种掺氮和硼掺杂的锯齿型石墨烯纳米带异质结, 探究了边缘氢化与非氢化条件下掺杂原子对电子输运特性的影响机制. 研究表明, 非氢化体系展现出卓越的自旋过滤性能, 而氢化体系则表现出显著的整流行为. Fu 等^[17]系统探究了四种氮/硼掺杂锯齿型石墨烯纳米带 PN 结的量子输运特性. 理论计算表明, 掺杂体系的载流子迁移率显著低于非掺杂体系, 原因在于掺杂诱导的杂质势场导致电子态发生强局域化, 并且在掺氮/硼原子进行边缘氢化处理后, 体系展现出的最大整流比为 10^7 量级, 也呈现显著的负微分电阻效应. 经过性能改善的石墨

† 通信作者. E-mail: jinux@hit.edu.cn

烯纳米带可以被广泛应用于经典和量子电子学相关的各类器件[18–23]。石墨烯纳米带在制备时,以及器件在辐照环境中会产生缺陷。Islam等[24]用能量略高于撞击阈值的电子束,人为实现对石墨烯纳米带中缺陷的控制。丁锦廷等[25]讨论了三种4—8环线缺陷对石墨烯纳米带电运输的影响,发现线缺陷的引入,会在费米能级处打开透射能隙。

理论研究表明,缺陷会影响石墨烯纳米带的带隙宽度和运输性能[26–28],而在辐照环境中,高能辐射会对材料、器件带来位移损伤,表现为空位点缺陷,进而影响器件性能、寿命。本文通过非平衡态格林函数和紧束缚理论,构建了扶手椅型石墨烯纳米带场效应管(graphene nanoribbon field-effect transistor, GNRFET)模型。计算了在辐照环境中,GNRFET的电运输性能的变化,以及空位点缺陷的分布对GNRFET整体的影响。结果表明,随着缺陷浓度的上升,GNRFET的性能会有显著的下降,但缺陷分布成团簇或是分布于石墨烯纳米带边缘,对GNRFET性能影响较小。

2 模型与方法

在非平衡格林函数理论框架下,器件模型由三个区域构成:左侧半无限大源极、右侧半无限大漏极以及中间的散射区域,如图1所示。该模型基于开放量子系统理论,其中散射区域与外部电极形成非平衡耦合。在典型工作条件下,源极接地(0 V),漏极施加正向偏压,导致电子从源极经散射区域流向漏极[29]。散射区域作为非平衡开放系统,其与电极的相互作用通过自能项 Σ 进行量化描述。

按图1所示的示意图,可以写出中间沟道格林函数(G_D^R)、源极格林函数(g_s^R)和漏极格林函数(g_d^R)为

$$G_D^R = (EI - H_D - \tau_s g_s^R \tau_s^\dagger - \tau_d g_d^R \tau_d^\dagger)^{-1}, \quad (1)$$

$$g_s^R = [(E + i\eta)\mathbf{I} - H_s]^{-1}, \quad (2)$$

$$g_d^R = [(E + i\eta)\mathbf{I} - H_d]^{-1}, \quad (3)$$

其中 \mathbf{I} 代表单位矩阵;下标s, D, d分别代表源极、中间沟道、漏极三个部分; H_D , H_s , H_d 分别对应沟道、源极和漏极的哈密顿量; $i\eta$ 代表开放系统引入的耗散; $\tau_s g_s^R \tau_s^\dagger$ 和 $\tau_d g_d^R \tau_d^\dagger$ 就是代表器件沟道与源极、漏极耦合作用的自能项 Σ_s 和 Σ_d ; τ_s 和 τ_d 分别代表源极、漏极与沟道的耦合项。

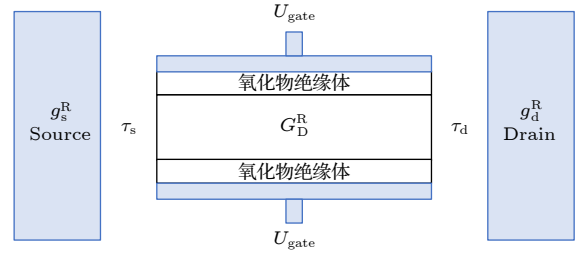


图1 GNRFET结构示意图,左侧为源极,右侧为漏极,沟道区域由石墨烯纳米带构成,由格林函数 G_D^R 描述, τ_s 和 τ_d 分别代表源极、漏极与沟道的耦合项,顶部和底部的氧化物绝缘体层用于实现栅极调控, U_{gate} 为施加在栅极上的电压
Fig. 1. GNRFET structure diagram. The left side represents the source, while the right side is the drain. The channel region is composed of a graphene nanoribbon, characterized by the retarded Green's function G_D^R . τ_s and τ_d denote the coupling terms between the source/drain and the channel, respectively. The top and bottom oxide insulator layers are utilized for gate control, with U_{gate} representing the voltage applied to the gate electrode.

利用(1)式可得到GNRFET的电子传输函数 $T(E)$,并进一步得出源漏极间的电流 I_{ds} 为[30]

$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_s G_D^R \Gamma_d G_D^A), \quad (4)$$

$$I_{ds} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE [T(E)(f_s(E) - f_d(E))]. \quad (5)$$

$T(E)$ 表征入射能量为 E 的电子能够在GNRFET中流通的概率。其中 $G_D^A = (G_D^R)^\dagger$ 是超前格林函数; Γ_s 和 Γ_d 分别是源漏极的自能项对应的展宽函数 $\Gamma_{s,d} = i(\Sigma_{s,d} - \Sigma_{s,d}^\dagger) = i(\tau_{s,d} g_{s,d}^R \tau_{s,d}^\dagger - \tau_{s,d} g_{s,d}^A \tau_{s,d}^\dagger)$; e 是电子电荷量; $f_s(E)$ 和 $f_d(E)$ 分别代表源漏极中能量为 E 的电子的费米-狄拉克分布函数,

$$f(E) = 1 / \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right].$$

此外,在计算体系的电流时,还需结合泊松方程 $\nabla^2 U = e(n - n_0)/\epsilon$ 自洽求解, n 是沟道格点的电荷密度, n_0 则是石墨烯纳米带本身带有的背景电荷密度, ϵ 是材料的介电常数。对于格点处的电荷密度,可以通过计算沟道小于格林函数 $G^<$ 得到[31]:

$$n = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} [iG^<(E)], \quad (6)$$

$$G^< = i[G_D^R(\Gamma_s f_s + \Gamma_d f_d)G_D^A]. \quad (7)$$

对于扶手椅型石墨烯纳米带的紧束缚建模,如图2所示,基于紧束缚模型将它分为超原胞矩阵 $[\alpha]$ 和耦合矩阵 $[\beta]$ 部分,具体的哈密顿量形式以及超原胞矩阵 $[\alpha]$ 为

$$H^D = \begin{bmatrix} [\alpha_1] & [\beta_1] & [0] & \cdots & [0] \\ [\beta_1]' & [\alpha_2] & [\beta_2] & \cdots & [0] \\ [0] & [\beta_2]' & [\alpha_3] & \cdots & [0] \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & [\beta_{n-1}] \\ [0] & [0] & [0] & [\beta_{n-1}] & [\alpha_n] \end{bmatrix},$$

$$[\alpha_i] = \begin{bmatrix} d & t & 0 & \cdots & 0 \\ t & d & t & \cdots & 0 \\ 0 & t & d & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & t \\ 0 & 0 & 0 & t & d \end{bmatrix}. \quad (8)$$

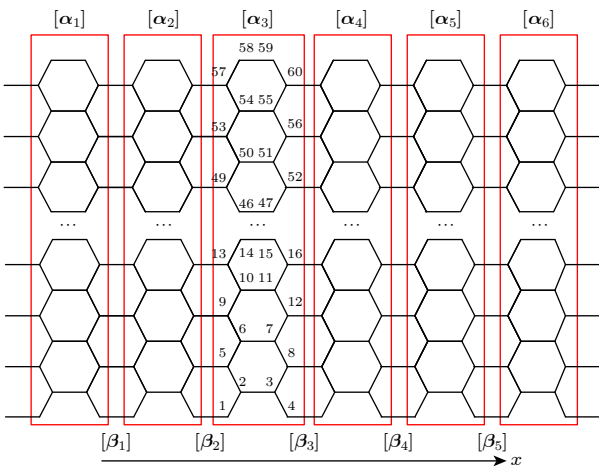


图 2 石墨烯纳米带示意图, 耦合矩阵 $[\beta_i]$ 表示相邻超原胞矩阵 $[\alpha_i]$ 间的耦合关系, x 方向代表电流传输方向

Fig. 2. Schematic diagram of graphene nanoribbons, the coupling matrix $[\beta_i]$ represents the coupling relationship between adjacent supercell matrices $[\alpha_i]$, and the x direction represents the direction of current transmission.

耦合矩阵 $[\beta]$ 与 $[\alpha]$ 类似, 它描述两个超原胞矩阵间的联系. 计算中, 石墨烯纳米带中电子在位能设为 $d = 0$ eV, 相邻格点间跃迁能设为 $t = 2.7$ eV. 另外, 我们在石墨烯纳米带的上下方分别覆盖了一层氧化物绝缘体和栅极, 以模拟一个石墨烯纳米带场效应晶体管.

辐照环境的模拟使用实验测量得到的数据. 2 MeV 的质子辐照下的石墨烯缺陷产生率 $G = 1.43 \times 10^{-5}$ 个/ion^[32]. 通过随机选取石墨烯纳米带沟道中的格点, 产生单空位点缺陷来模拟辐照环境下辐射粒子对 GNR-FET 产生的位移损伤. 设置特定的点缺陷分布模拟缺陷的演化. 通过载流子输运特性评估辐照对 GNR-FET 产生的影响.

3 结果与讨论

根据上述理论方法, 我们模拟了有 60 个格点的超原胞矩阵 (如图 2 所示), 长度为 6 个超原胞矩阵, 共计 360 个 C 原子构成的单层石墨烯纳米带沟道, 并计算了该 GNR-FET 的电流-电压性能, 结果如图 3 所示. 其中 I_{ds} 为源漏极电势差下电流, U_{gate} 为栅极电压, U_{ds} 表示两端源漏极电势差. 栅极电压是通过改变沟道的哈密顿量对角元来影响 GNR-FET 传输, 而源漏极电势差也会相应地改变两端电极哈密顿量的对角元.

GNR-FET 的电流会受到栅极电压和源漏极电势差的共同影响. 图 3(a) 为在不同源漏极电势差下, 电流随栅极电压的变化, 图 3(b) 则是在不同栅

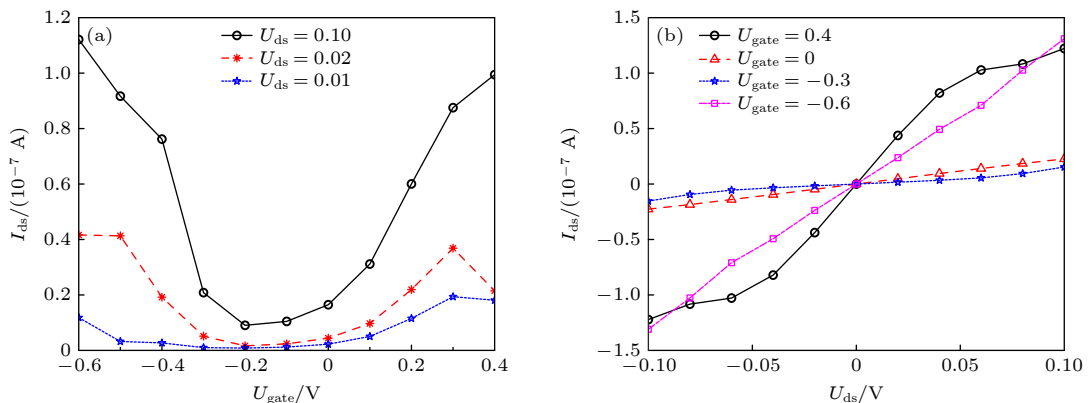


图 3 电流 I_{ds} 与栅极电压 U_{gate} 和源漏极电势差 U_{ds} 的关系 (a) 在不同源漏极电势差下, 电流随栅极电压的变化; (b) 在不同栅极电压下, 电流随源漏极电势差的变化

Fig. 3. Relationship between current I_{ds} and gate voltage U_{gate} as well as the source-drain potential difference U_{ds} : (a) The current as a function of gate voltage under different source-drain potential differences; (b) the current as a function of source-drain potential difference under different gate voltages.

极电压下, 电流随源漏极电势差的变化. 从图 3(a) 可以看出: 在模拟的栅极电压范围内, GNRFET 电流-电压特性表现出开关效应, 可以通过控制栅极电压的大小来实现对 GNRFET 导通的控制; 同时随着两端电势差增大, 会不断缩小栅极关闭状态的区间, 开关比 $I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ 在三类源漏极电势差中均为 10 左右, 与实验测量趋势一致^[23]. 可以看出, 随着源漏极电势差的增大以及栅极电压的调整, 源漏极间的电流有明显的增强.

为了分析 GNRFET 的电子输运特性, 计算其电子透射谱, 如图 4 所示, 其中 n 为沟道中的空位点缺陷数量. 为模拟辐照环境下高能粒子对器件产生的位移损伤, 计算了随机缺陷个数分别为 $n = 2, 5, 10$ 的三种情况. 以图 2 中 $[\alpha_1]$ 中的 1 号格点为沟道 1 号格点, $[\alpha_2]$ 中的 1 号格点为沟道 61 号格点, 以此类推. 随机选取的空位缺陷格点位置为沟道 3, 184, 44, 143, 65, 197, 274, 86, 126, 342 号格点, n 代表取前 2, 5, 10 个格点坐标进行后续计算.

图 4(a) 为 n 取不同个数时的传输函数 T 随能量 E 的变化曲线. 可以看出, 当中间沟道为无缺陷的石墨烯纳米带时, 整个材料由于自身的空间平移对称性, 传输函数呈现对称的阶梯状. 而对于具有随机缺陷的三种情况, 可以发现传输函数不再呈现阶梯状, 这是由于随机的空位点缺陷破坏了材料的平移对称性. 同时随机点缺陷产生的结构无序会引发 Anderson 局域化^[25]. 入射电子在 GNRFET 中传输时, 会受到点缺陷的随机散射, 阻碍载流子传输. 所以随着缺陷数量的增加, 传输函数整体被不

断抑制, GNRFET 传输能力下滑. 图 4(b) 则展示了源漏极电压、栅极电压以及点缺陷之间的联合作用, 其中 ε_L 和 ε_R 分别表示左右电极. 由 (5) 式可知, 传输函数在偏压窗中与能量区间围成面积大小是与 GNRFET 中的电流成正比. 图 4(a) 中没有外加电场, 所以 GNRFET 中存在透射能隙, 使得 GNRFET 处于截止状态. 从图 4(b) 可知: 黑色实线表示源漏极电势差 1 V 击穿了 GNRFET 的透射能隙, 使 GNRFET 导通; 红色虚线表明附加栅极电压进一步增强了 GNRFET 的载流子输运特性, 与图 3 的结果一致; 蓝色点线展示了当随机点缺陷数量为 10 时, GNRFET 仍然导通, 但性能受到了极大的抑制.

如图 5(a) 所示, 模拟计算了 GNRFET 中存在不同数量缺陷时的电流变化曲线. 栅极电压选择 0.4 V, 使 GNRFET 处于开启状态, 电流更大, 相比于关闭状态, 更能反映缺陷对 GNRFET 性能的影响. 可以看出, 随着缺陷数量增加, 电流逐渐下降, 并且在缺陷数量达到 10 后出现显著下滑. 如图 5(b) 所示, 计算了石墨烯纳米带在栅极电压 0.4 V、源漏极电压 0.1 V 时费米能级处的部分局域态密度 (partial local density of states, PLDOS). 图中黑色叉号标记了单空位缺陷的位置, 彩色散点表示各格点对总态密度的相对贡献, 颜色深浅由 PLDOS 值大小决定, 数值越大表明该原子对电子态的局域化贡献越显著. 可以看出, 缺陷周围的最近邻及次近邻碳原子表现出较高的 PLDOS 值, 说明缺陷导致电子态在这些区域发生强烈局域化,

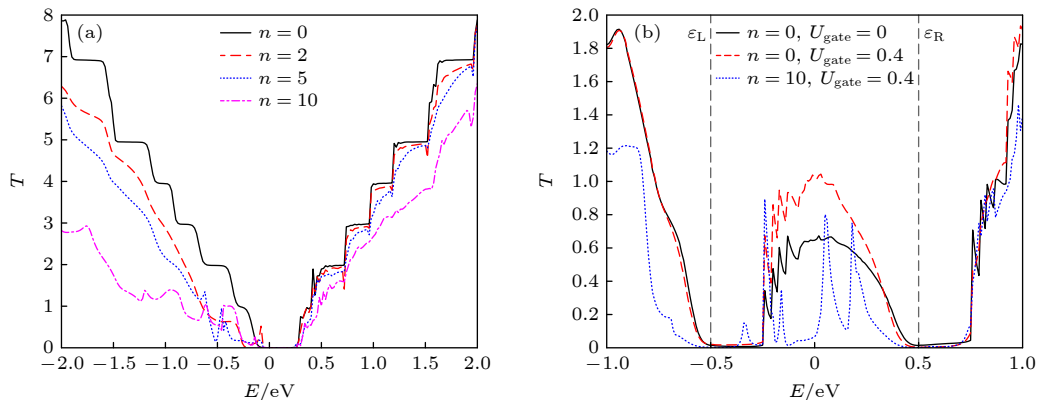


图 4 传输函数图像 (a) 未施加栅极电压和源漏极电压, 缺陷个数不同时的传输函数; (b) 源漏极电势差为 1 V 时, 缺陷个数分别为 0 和 10、栅极电压分别为 0 和 0.4 V 的传输函数对比

Fig. 4. Transfer function graphs: (a) Transfer functions with different numbers of defects and no applied gate voltage and source-drain voltage; (b) comparison of transfer functions with 0 and 10 defects and 0 and 0.4 V gate voltages when the source-drain potential difference is 1 V.

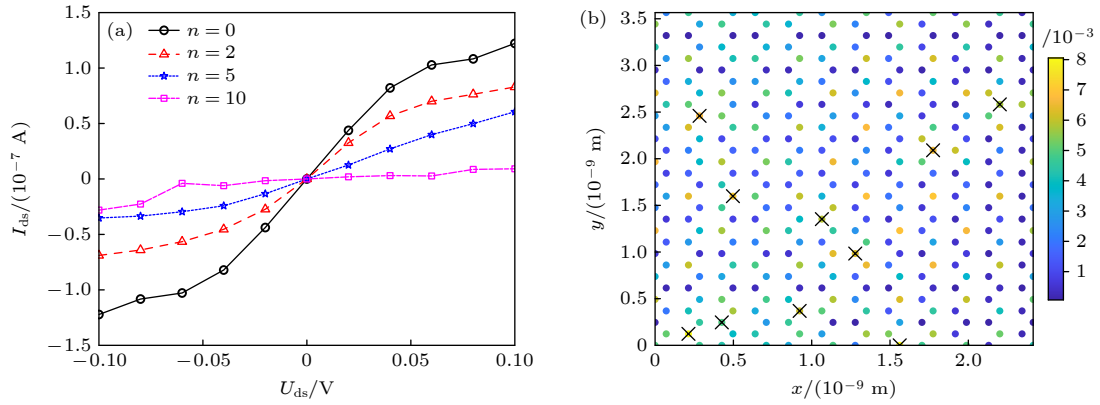


图 5 GNRFET 电流变化曲线及石墨烯纳米带的 PLDOS 分布 (a) 不同缺陷数量下电流变化曲线; (b) $E = 0$ eV, 10 个随机缺陷时的 PLDOS 分布

Fig. 5. GNRFET current variation curve and PLDOS distribution of graphene nanoribbons: (a) Current variation curves under different defect quantities; (b) PLDOS distribution when $E = 0$ eV and 10 random defects.

形成局域态. 这种局域态的存在破坏了系统的周期性, 成为载流子传输过程中的强散射中心. 随着缺陷数量的增加, 体系的无序程度显著增强, 导致载流子在沟道内的相干传播受到抑制, 散射效应加剧, 从而显著降低器件的电导性能.

考虑到在辐照环境中, 沟道中会随着辐照剂量的增加, 产生新的缺陷, 所以我们也计算了持续辐照下 GNRFET 的性能变化, 如图 6 所示. 栅极电压选择 0.4 V, 源漏极电压选择 0.1 V, 横轴则是总注量, 左侧纵轴是电流, 右侧纵轴是 GNRFET 辐照产生的随机空位点缺陷个数. 点缺陷个数可以通过 $N = DGS$ 求得, 其中 S 是石墨烯纳米带的辐照面积. 图中紫色点划线展示了随注量增加, 体系中缺陷数量的累积过程, 表明缺陷密度随辐照剂量呈近似线性增长. 黑色实线、红色虚线和蓝色点线分别是在初始时缺陷数量为 0, 2 和 5 时的电流变化曲线. 所有初始条件下的电流均呈现明显的下降趋势, 表明位移损伤导致载流子散射增强, 电子输运受到严重抑制. 在高注量区域, 各曲线趋于收敛, 最终电流降幅均达到约 80%, 说明器件整体性能遭受显著退化. 值得注意的是, 在辐照初期, 电流下降速率较快; 当注量达到一定阈值后, 电流衰减速率明显减缓, 趋于饱和. 这一现象可归因于体系中结构无序度的逐渐饱和——随着缺陷积累, 局部态密度局域化程度已达极限, 后续引入的新缺陷对电子波函数的扰动趋于有限, 难以进一步加剧散射效应. 此外, 结合实际应用环境中的辐照剂量 $1 \times 10^6 - 1 \times 10^{10}$ ion/($\text{cm}^2 \cdot \text{s}$), 在此剂量的辐照下, GNRFET 性能至少可以在 2×10^7 s 内不受影响.

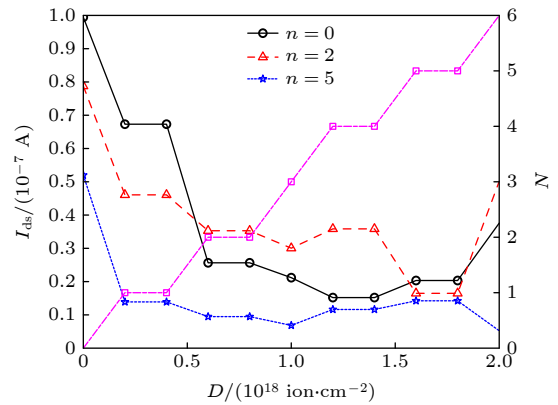


图 6 随辐照总注量变化的电流曲线

Fig. 6. Current as a function of total irradiation flux.

此外, 辐照不仅会产生新的缺陷, 新的缺陷也会与旧的缺陷存在相互作用, 从而导致缺陷位置发生迁移, 甚至发生聚合效应, 形成一个较大的缺陷团簇 [33]. 这种缺陷演化过程显著改变了材料的局部电子结构, 进而影响载流子输运行为. 为探究缺陷聚合效应对 GNRFET 性能的影响, 构建了由 6 个单空位缺陷组成的聚合团簇模型, 并计算其在栅极电压为 0.4 V、源漏极电压为 0.1 V 条件下的电子结构 (如图 7(a) 和图 7(b) 所示, 其中黑色叉号表示空位缺陷位置), 以及在栅极电压 0.4 V 下的电流电压特性 (如图 7(c) 所示).

如图 7(a) 所示的 PLDOS 分布图为聚合在沟道中央的团簇, 其中黑色叉号代表的 6 个空位点缺陷位置为 150, 151 和 153—156 号格点. 从 PLDOS 分布可见, 尽管缺陷团簇周围区域的态密度显著增强, 表明电子态在此处发生强烈局域化, 但其影响范围主要局限于团簇周边的少数格点, 空间扩展性

有限. 这与图 5(b) 中分散缺陷体系中多中心散射的特征存在明显差异. 此时的电流电压特性如图 7(c) 所示, 其中紫色点划线为存在聚合缺陷时的电流曲线, 而黑色、红色和蓝色电流则与图 5 中对应缺陷数量的电流相同. 当缺陷聚合在沟道中央时, GNR-FET 的电导性能较初始状态下降幅度较小, 且其

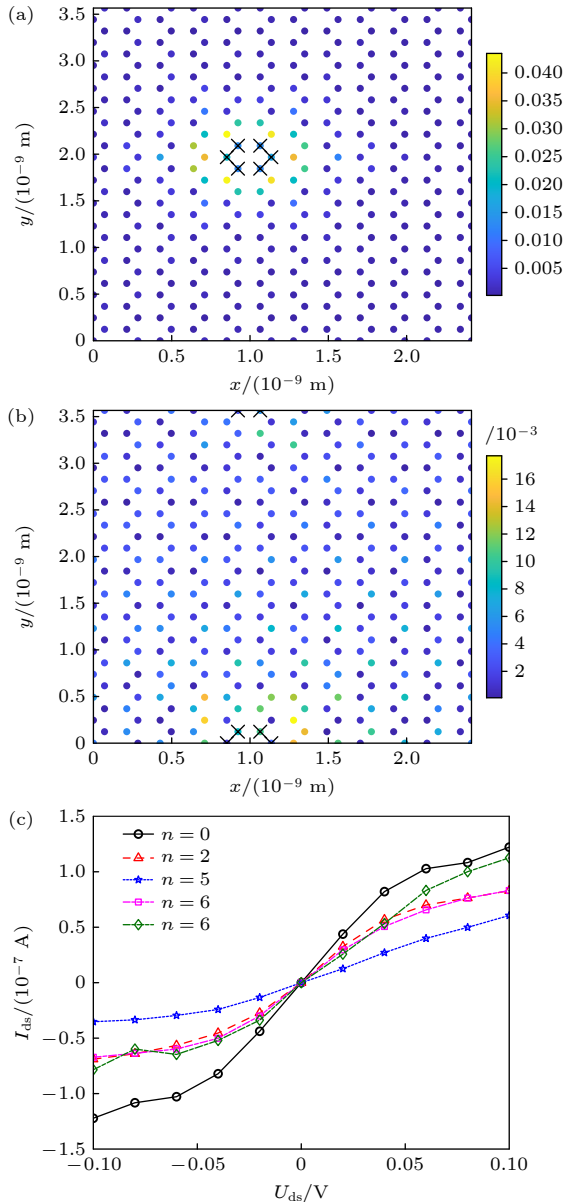


图 7 缺陷聚合的 PLDOS 分布及相应电流-电压曲线 (a), (b) 分别是缺陷团簇分布在 GNR-FET 的中央和边缘的 PLDOS 分布 ($E = 0 \text{ eV}$); (c) 不同的缺陷团簇分布对应的电流-电压曲线

Fig. 7. PLDOS distribution of defect aggregation and the corresponding current-voltage curves: (a), (b) The PLDOS distribution of defect clusters distributed in the center and edge of GNR-FET, respectively ($E = 0 \text{ eV}$); (c) the current-voltage curves corresponding to different defect cluster distributions.

整体输运行为与含 2 个随机点缺陷的情形相当, 远优于含 5 个分散缺陷的情况. 表明缺陷聚合后对载流子的散射效应反而减弱, 其物理机制可归结为空间局域性增强和无序度降低, 聚合缺陷将原本分散的散射中心集中于一个有限区域, 有效减少了对整个沟道的非均匀扰动, 并且相较于同等数量随机分布的离散缺陷, 聚合缺陷对系统长程结构有序性的破坏程度明显降低. 在离散缺陷体系中, 广泛分布的缺陷点会形成贯穿整个沟道的无序网络, 严重干扰电子的弹道输运, 而聚合缺陷则将结构扰动局域化于有限区域, 使沟道中大部分区域仍保持原始晶格的周期性排列.

此外, 我们还考虑空位点缺陷聚合在 GNR-FET 的边缘, 如图 7(b) PLDOS 分布图所示, 黑色叉号为聚合在边缘的 6 个点缺陷, 位于 178, 179 和 1—4 号格点. 图 7(c) 中绿色点划线为 GNR-FET 中边缘聚合缺陷时的电流曲线. 对比随机缺陷分布、中央缺陷分布和边缘缺陷分布的电流曲线, 表明边缘缺陷对载流子传输的阻碍效应较小. 该差异一方面是由于缺陷聚合本身已导致体系结构无序度降低, 如前所述, 局域化的散射中心减少了对长程电子输运的随机扰动. 另一方面, 边缘区域的电子态密度相对较低, 导致通过该区域的载流子通量较小. 因此, 即使存在缺陷团簇, 其对整体电流的贡献也受限于有限的载流子通道. 相比之下, 沟道中心区域是主要的载流子传输路径, 其高态密度和强相干性使其对缺陷更为敏感.

4 结 论

本文采用非平衡态格林函数方法, 结合紧束缚模型, 研究了辐照下产生随机空位点缺陷的石墨烯纳米带场效应晶体管的电子输运性能变化. 计算结果表明: 辐照带来的位移损伤会破坏 GNR-FET 中石墨烯纳米带的平移对称性, 给系统带来结构无序进一步引发 Anderson 局域化现象. 随着辐照引入的空位点缺陷的增加, GNR-FET 的输运性能会快速降低, 开关效应也被抑制, 随着系统结构无序程度提高, 体系达到局域化阈值, 进一步辐照的影响较小. 同时发现, 当点缺陷分布呈现聚合的状态时, 其对 GNR-FET 性能的影响会显著小于同数量的随机点缺陷. 本研究为评估 GNR-FET 在辐射环境中的可靠性提供了理论依据. 未来工作将结合辐照

实验与拉曼光谱表征, 验证理论预测; 同时扩展至更复杂的缺陷类型与多物理场耦合效应研究, 为石墨烯纳米带器件的设计提供指导。

参考文献

- [1] 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
- [2] Beenakker C W J 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 1337
- [3] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [4] Huang Y L, Wang K T, Xing Y, Liu G B, Zhao H K 2019 *Carbon* **143** 641
- [5] Wei M, Zhou M, Wang B, Xing Y 2020 *Phys. Rev. B* **102** 075432
- [6] Liu G L, Yang Z H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 076301 (in Chinese) [刘贵立, 杨忠华 2018 *物理学报* **67** 076301]
- [7] Chen X, Zhao H, Zhang Y, Liu L, Yang Z H, Song L L 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 198503 (in Chinese) [陈兴, 赵晗, 张艳, 刘露, 杨志宏, 宋玲玲 2021 *物理学报* **70** 198503]
- [8] Hwang W S, Zhao P, Tahy K, Nyakiti L O, Wheeler V D, Myers-Ward R L, Eddy C R, Gaskill D K, Robinson J A, Haensch W, Xing H, Seabaugh A, Jena D 2015 *APL Materials* **3** 011101
- [9] Gao X, Zheng L, Luo F, Qian J, Wang J, Yan M, Wang W, Wu Q, Tang J, Cao Y, Tan C, Tang J, Zhu M, Wang Y, Yanglizhi L, Sun L, Yin J, Lin I, Liu Z, Qin S, Peng H 2022 *Nat. Commun.* **13** 5410
- [10] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [11] Barone V, Hod O, Scuseria G E 2006 *Nano Lett.* **6** 2748
- [12] Zhou M, Jin H, Xing Y 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 044006
- [13] Merino-Diez N, Garcia-Lekue A, Carbonell-Sanromà E, Li J, Corso M, Colazzo L, Sedona F, SánchezPortal D, Pascual J I, de Oteyza D G 2017 *ACS nano* **11** 11661
- [14] Di Bartolomeo A 2016 *Phys. Rep.* **606** 1
- [15] Sharifi M, Akhouni E, Esmaili H 2016 *J. Comput. Electron.* **15** 1361
- [16] Niu L L, Fu H Y, Suo Y Q, Liu R, Sun F, Wang S S, Zhang G P, Wang C K, Li Z L 2021 *Physica E* **128** 114542
- [17] Fu H Y, Sun F, Liu R, Suo Y Q, Bi J J, Wang C K, Li Z L 2019 *Phys. Lett. A* **383** 867
- [18] Wang H, Wang H S, Ma C, Chen L, Jiang C, Chen C, Xie X, Li A P, Wang X 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 791
- [19] Jeong B, Wuttke M, Zhou Y, Müllen K, Narita A, Asadi K 2022 *ACS Appl. Electron. Mater.* **4** 2667
- [20] Wang X, Song S, Wang H, Guo T, Xue Y, Wang R, Wang H, Chen L, Jiang C, Chen C, Shi Z, Wu T, Song W, Zhang S, Watanabe K, Taniguchi T, Song Z, Xie X 2022 *Adv. Sci.* **9** 2202222
- [21] Zhang J, Qian L, Barin G B, Chen P, Müllen K, Ruffeux P, Fasel R, Zhang J, Calame M, Perrin M L 2023 *Mater. Quantum. Technol.* **3** 036201
- [22] Chen Q, Lodi A, Zhang H, Gee A, Wang H I, Kong F, Clarke M, Edmondson M, Hart J, O' Shea J N, Stawski W, Baugh J, Narita A, Saywell A, Bonn M, Müllen K, Bogani L, Anderson H L 2024 *Nat. Chem.* **16** 1133
- [23] Lyu B, Chen J, Wang S, Lou S, Shen P, Xie J, Qiu L, Mitchell I, Li C, Hu C, Zhou X, Watanabe K, Taniguchi T, Wang X, Jia J, Liang Q, Chen G, Li T, Wang S, Ouyang W, Hod O, Ding F, Urbakh M, Shi Z 2024 *Nature* **628** 758
- [24] Islam A E, Susner M A, Carpena-Núñez J, Back T C, Rao R, Jiang J, Pachter R, Tenney S A, Boeckl J J, Maruyama B 2020 *Carbon* **166** 446
- [25] Ding J T, Hu P J, Guo A M 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 157301 (in Chinese) [丁锦廷, 胡沛佳, 郭爱敏 2023 *物理学报* **72** 157301]
- [26] Gupta A, Sarkar N 2022 *Appl. Phys. A* **128** 434
- [27] Baildya N, Ghosh N N, Chattopadhyay A P 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126194
- [28] Kong W, Wang R, Xiao X, Zhan F, Gan L Y, Wei J, Fan J, Wu X 2021 *J. Phys. Chem. Lett.* **12** 10874
- [29] Thakur A, Sarkar N 2023 *Eur. Phys. J. B* **96** 113
- [30] Tien N T, Ut N V, Hoc B T, Ngoc Thao T T, Khanh N D 2019 *Adv. Condens. Matter Phys.* **2019** 4715953
- [31] Jauho A P, Wingreen N S, Meir Y 1994 *Phys. Rev. B* **50** 5528
- [32] Mathew S, Chan T, Zhan D, Gopinadhan K, Barman A R, Breese M, Dhar S, Shen Z, Venkatesan T, Thong J T 2011 *Carbon* **49** 1720
- [33] Goy O, Mueller R, Gross D 2009 *ZAMM-J. Appl. Math. Mech.* **89** 641

Electron transport characteristics of graphene nanoribbon devices under irradiation damage

GU Tianyang¹⁾ LIU Jianli²⁾ ZHANG Jingbo^{1)†}¹⁾ (*School of Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China*)²⁾ (*School of Space Environment and Material Science, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China*)

(Received 14 November 2025; revised manuscript received 5 January 2026)

Abstract

Graphene nanoribbons hold great promise for next-generation nanoscale semiconductor devices, yet their performance in radiation environments is critically compromised by displacement damage induced by high-energy particles. In this work, we employ the non-equilibrium Green's function formalism combined with a tight-binding model to systematically investigate how irradiation-induced monovacancy defects influence the transport characteristics of armchair-edged graphene nanoribbon field-effect transistors (GNRFETs). We compute current-voltage characteristics under varying gate and drain-source biases for devices containing 0, 2, 5, and 10 randomly distributed vacancies. Moreover, we further compare the effects of two distinct spatial configurations at identical defect concentrations: one in which vacancies are randomly dispersed throughout the ribbon and another in which they form aggregated clusters. Complementary analysis of the projected local density of states (PLDOS) provides microscopic insight into the electronic origins of transport degradation. Our results show that vacancy defects break the translational symmetry of the nanoribbon lattice, introduce structural disorder, and trigger Anderson localization. As the number of defects increases, the ON-state current drops sharply, the ON/OFF ratio deteriorates significantly, and switching functionality is severely suppressed. PLDOS maps confirm the emergence of localized electronic states near the Fermi level, directly linking spatial disorder to conductance collapse. Beyond a critical disorder threshold, the rate of performance degradation slows markedly, indicating saturation of the localization effect. Most importantly, the aggregated defects cause substantially less degradation than randomly distributed ones at the same concentration: PLDOS reveals that clustered vacancies confine electronic perturbations to localized regions, preserving extended conducting pathways elsewhere in the ribbon, whereas random vacancies induce pervasive state localization across the entire channel. This study establishes that the spatial distribution of defects, rather than merely their number, is a decisive factor governing radiation tolerance in GNRFETs.

Keywords: non-equilibrium Green's function, graphene nanoribbon, quantum transport, irradiation damage

DOI: [10.7498/aps.75.20251556](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251556)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251556](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251556)

† Corresponding author. E-mail: jinux@hit.edu.cn



辐照损伤石墨烯纳米带器件的输运特性

顾天阳 刘剑利 张景波

Electron transport characteristics of graphene nanoribbon devices under irradiation damage

GU Tianyang LIU Jianli ZHANG Jingbo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 090704 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251556

CSTR: 32037.14.aps.75.20251556

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251556>

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

线缺陷石墨烯纳米带的电输运研究

Electron transport in graphene nanoribbons with line defects

物理学报. 2023, 72(15): 157301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230502>

双层硼烯纳米带的量子输运研究

Quantum transport properties of bilayer borophene nanoribbons

物理学报. 2022, 71(22): 227301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221304>

石墨烯p-n结在磁场中的电输运热耗散

Thermal dissipation of electric transport in graphene p-n junctions in magnetic field

物理学报. 2022, 71(12): 127203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220029>

石墨烯中的拓扑安德森绝缘体相

Topological Anderson insulator phase in graphene

物理学报. 2025, 74(4): 047301 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241031>

多孔石墨烯纳米带各向异性和超低热导的理论研究

Theoretical study of anisotropy and ultra-low thermal conductance of porous graphene nanoribbons

物理学报. 2022, 71(2): 027803 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211477>

退相位环境下Werner态在石墨烯基量子通道中的隐形传输

Teleportation of Werner state via graphene-based quantum channels under dephasing environment

物理学报. 2022, 71(7): 070304 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211881>