

应变对两层半氢化氮化镓薄膜电磁学性质的调控机理研究

肖美霞 梁尤平 陈玉琴 刘萌

Strain field tuning the electronic and magnetic properties of semihydrogenated two-bilayer GaN nanosheets

Xiao Mei-Xia Liang You-Ping Chen Yu-Qin Liu-Meng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 023101 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.023101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.023101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I2>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

分子空位缺陷对环三亚甲基三硝胺含能材料几何结构、电子结构及振动特性的影响

Analyses of the influences of molecular vacancy defect on the geometrical structure electronic structure and vibration characteristics of Hexogeen energetic material

物理学报.2015, 64(24): 243102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.243102>

B_nY ($n=1-11$) 团簇的结构和电子性质

Structural and electronic properties of the B_nY ($n=1-11$) clusters

物理学报.2014, 63(24): 243101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.243101>

TiO₂ 纳米管电子结构和光学性质的第一性原理研究

First-principles study of electronic structure and optical properties of TiO₂ nanotubes

物理学报.2014, 63(24): 243102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.243102>

IrB 和 IrB₂ 力学性质的第一性原理计算

First-principles calculations of the mechanical properties of IrB and IrB₂

物理学报.2014, 63(15): 153101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.153101>

Pd_nAl[±] ($n=1-8$) 二元团簇的密度泛函理论研究

A density functional theory study of small bimetallic Pd_nAl[±] ($n=1-8$) clusters

物理学报.2014, 63(11): 113101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.113101>

应变对两层半氢化氮化镓薄膜电磁学性质的调控机理研究*

肖美霞[†] 梁尤平 陈玉琴 刘萌

(西安石油大学材料科学与工程学院, 西安 710065)

(2015年9月25日收到; 2015年10月25日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的第一性原理模拟计算, 研究了在应变作用下两层半氢化氮化镓纳米薄膜的电学和磁学性质. 没有表面修饰的两层氮化镓纳米薄膜的原子结构为类石墨结构, 并具有间接能隙. 然而, 当两层氮化镓纳米薄膜的一侧表面镓原子被氢化时, 该纳米薄膜却依然保持纤锌矿结构, 并且展示出铁磁性半导体特性. 在应变作用下, 两层半氢化氮化镓纳米薄膜的能隙可进行有效调控, 并且它将会由半导体性质可转变为半金属性质或金属性质. 这主要是由于应变对表面氮原子的键间交互影响和p-p轨道直接交互影响之间协调作用的结果. 该研究成果为实现低维半导体纳米材料的多样化提供了有效的调控手段, 为其应用于新型电子纳米器件和自旋电子器件提供重要的理论指导.

关键词: 氮化镓纳米薄膜, 表面修饰, 应变, 电磁学性质

PACS: 31.15.es, 61.46.-w, 75.70.Ak, 81.05.Ea

DOI: 10.7498/aps.65.023101

1 引言

大块氮化镓是一种具有较大能隙(3.4 eV)的半导体材料. 由于它具有很多独特的物理性质, 如光学、电学、磁学等性质^[1], 氮化镓材料在太阳能电池、发光二极管及自旋电子器件方面具有广泛的应用前景^[2-4]. 最近, 研究发现半导体纳米材料可以展现出半金属性质, 即在一个电子极化轨道上呈现金属性, 而在另一个电子极化轨道上呈现绝缘性. 这种半金属性材料在电子自旋纳米器件中具有潜在的应用价值^[5].

目前, 氮化镓已经制备成不同种类的纳米结构, 例如纳米管^[6], 纳米棒^[7], 纳米带^[8], 纳米线^[9]和纳米膜^[10]. 研究结果表明氮化镓具有稳定的单层结构^[11], 尤其是最近理论研究发现非常薄的氮化镓纳米薄膜可以形成类似石墨的结构^[12]. 由于二维纳米薄膜具有较高的表面体积比, 表面修饰

对可以有效调节其电学和磁学性质^[13-16]. 没有表面修饰和完全氢化的氮化镓纳米薄膜展示出非磁性, 而完全表面氢化促使氮化镓纳米薄膜由间接转变为直接能隙^[17]. 半氢化可以促使二维半导体纳米薄膜具有一定的磁性, 例如, 半氢化的石墨将转变为铁磁性半导体^[18], 在石墨中嵌入锯齿三角形石墨纳米薄片也将会使其具有铁磁性^[19]. 研究也证实了半氢化促使单层氮化镓纳米薄膜由无磁性转变为铁磁性半导体^[20,21]. 此外, 应变对半导体纳米材料的结构及性质的调控作用起着至关重要的影响. 对单层二硫化钼材料施加一个很小的拉应变(0.5%)时, 其能带结构由直接能隙转变为间接能隙, 并且随着拉应变的进一步增加, 能带结构依然保持间接能隙特性, 且能隙呈现出线性下降的趋势^[22]. 值得注意的是, 半氟化的单层氮化镓纳米薄膜可以通过应变来实现铁磁性和反铁磁性之间的转变^[23]. 没有表面修饰的氮化镓薄膜在较大拉应变作用下将由纤锌矿结构转变为类石墨平面结构,

* 陕西省教育厅科研基金(批准号: 2013JK0894)、国家级大学生创新创业训练计划项目(批准号: 201510705230)、西安石油大学博士科研启动基金(批准号: 2012BS004)和西安石油大学“材料科学与工程”省级优势学科(批准号: 312010005)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: mxixiao@xsyu.edu.cn

并且其能隙有大幅度下降^[24]. 然而, 表面修饰和应变对半导体纳米材料的电学和磁学性质的耦合效应的研究还很少.

在本论文中, 我们采用基于密度泛函理论的第一性原理研究应变对半氢化的两层氮化镓纳米薄膜的电学和磁学性质的调控效果. 该研究结果不仅有助于了解氮化镓纳米材料在特殊环境下的物理特性, 而且对其在新型电子器件和自旋电子器件领域中的应用具有重要的意义.

2 计算机模拟方法

我们采用基于极性密度泛函理论的DMol³ 模块进行模拟计算^[25,26], 相关交换函数使用广义梯度近似(GGA)中Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 方法^[27]. 氮化镓纳米薄膜采用 2×2 的超晶胞, 其真空为15 Å来避免相邻晶胞间的相互作用. 所有原子都完全弛豫. 核处理方法使用的是密度泛函理论半核赝势, 这种方法对镓元素也考虑了一定的相对论效应^[28]; 全电子效应主要针对氮元素和氢元素^[29]. 此外, 基本设置使用双数字极化^[25]. 结构优化中 k 点设置使用 $9 \times 9 \times 1$, 而性质计算中 k 点设置使用 $17 \times 17 \times 1$ ^[30]. 模拟计算中使用了拖尾效应, 拖尾值为0.001 Ha(1 Ha = 27.2114 eV). 能量收敛公差, 最大力收敛公差和最大位移收敛公差分别为 1.0×10^{-5} Ha, 0.002 Ha/Å和0.005 Å.

3 结果与讨论

我们采用没有表面修饰和表面完全氢化的氮化镓纳米薄膜验证精度. 研究发现没有表面修饰的两层氮化镓薄膜的原子结构由最初的纤锌矿结构转变为类石墨结构, 图1(a)给出其在优化后的原子结构图. 该类石墨结构的氮化镓纳米薄膜没有磁性, 其间接能隙值为2.97 eV. 当两层氮化镓纳米薄膜表面的氮原子和镓原子完全氢化时, 该纳米薄膜的原子结构依然为纤锌矿结构, 如图1(b)所示, 并且转变为直接能隙半导体, 其能隙值为2.35 eV. 极性计算表明没有表面修饰和完全表面氢化的氮化镓纳米薄膜为非磁性材料. 该研究结果与已报道的研究结果相符合^[17,31].

与氮化硼和氧化锌纳米薄膜相似^[32,33], 氮化镓纳米薄膜表面的镓原子和氮原子的化学性质不同. 我们研究发现^[21], 只有表面镓原子进行氢化得

到的氮化镓纳米薄膜(命名为H-GaN)具有铁磁性, 其原子结构如图1(c)所示; 而只有表面氮原子进行氢化得到的两层氮化镓纳米薄膜却没有磁性, 并且呈现金属性质. 因此, 本文只研究对表面镓原子进行氢化而得到的两层氮化镓纳米薄膜在应变作用下电学和磁学性质的调控效果.

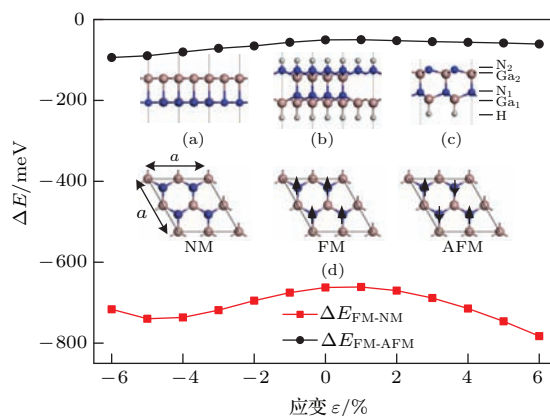


图1 (网刊彩色) 在不同应变 ε 作用下, 两层H-GaN纳米薄膜在铁磁态(FM)下的系统能量分别与非磁态(NM)或反铁磁态(AFM)下系统能量的差值 ΔE 变化关系图(a)没有表面修饰;(b)表面完全氢化的两层氮化镓纳米薄膜在优化后原子结构的正视图;(c)两层H-GaN纳米薄膜的正视图;(d)非磁性、铁磁性和反铁磁态下的俯视图

Fig. 1. (color online) The energy difference ΔE between ferromagnetic (FM) and nonmagnetic (NM) or antiferromagnetic (AFM) states of two-bilayer GaN nanosheets with hydrogenated Ga atoms (H-GaN). The atomic structures of (a) bare and (b) fully hydrogenated two-bilayer GaN nanosheets after geometry optimization, (c) atomic structure in side views and (d) NM, FM and AFM states in top view for two-bilayer H-GaN nanosheets.

已有研究结果^[23,32]表明, 单层半氟化的氮化硼和氮化镓纳米薄膜在应变作用下会发生反铁磁性性质与铁磁性质的转变. 为了探究两层半氢化的氮化镓纳米薄膜在应变作用下的磁性状态, 我们模拟计算了图1(d)中非磁态、铁磁性态和反铁磁态下两层H-GaN纳米薄膜在不同应变作用下的系统总能量. 如图1所示, 通过比较发现, 该两层H-GaN纳米薄膜在应变($-6\% \leq \varepsilon \leq +6\%$)下其铁磁态下的系统能量比其他两种情况下的能量低. 该研究结果表明两层H-GaN纳米薄膜具有稳定的铁磁性. 我们的研究结果与无应变的单层H-GaN纳米薄膜具有铁磁性的研究结果相符合^[4,20].

我们首先采用原子结构来解释应变对两层H-GaN纳米薄膜的电学和磁学性质的调控效果. 对于没有应变的两层H-GaN纳米薄膜, 通过原子结

构分析发现, 相比于没有表面修饰的氮化镓纳米薄膜, 优化后 H-GaN 纳米薄膜的原子结构变化较小. 镓原子与其表面吸附的氢原子形成的 H—Ga₁ 键互相平行并垂直于氮化镓薄膜. Ga₁ 与 N₁ 平面以及 Ga₂ 与 N₂ 平面之间的距离分别为 0.717 和 0.454 Å. 而 Ga₁—H 键长为 1.557 Å 比 GaH 二聚物的键长 1.685 Å 稍短, 这证实了表面吸附的氢原子与表面的镓原子之间形成了强烈的 H—Ga 键. 该 H—Ga 键的形成导致表面氮原子存在悬空键和轨道电子的极性不配对. 在两层半氢化氮化镓纳米薄膜中, 通过 Hirshfeld 电荷分析可得出, 尽管其他原子也具有一定的磁性, 但是表面氮原子的磁矩占有主导地位, 其磁矩大小为 0.62 μ_B .

两层 H-GaN 纳米薄膜产生磁性的原因还可

以通过能带结构和极性态密度图进行深入分析. 图 2(a) 和 (b) 分别为两层 H-GaN 纳米薄膜在没有应变作用下的能带结构和部分态密度图, 其上旋和下旋的不对称性表明了该薄膜为铁磁性半导体. 能带结构图给出两层 H-GaN 纳米薄膜在上旋轨道和下旋轨道的能隙分别为 3.99 和 0.06 eV. 然而, 对于没有应变作用的单层 H-GaN 纳米薄膜, 其上旋轨道和下旋轨道的能隙分别为 4.40 和 0.33 eV^[20]. 通过比较发现, 两层 H-GaN 纳米薄膜的能隙值降低, 这意味着该纳米薄膜可能在更小的应变作用下由半导体转变为半金属或金属. 部分态密度图证实了两层 H-GaN 纳米薄膜的磁性主要是由表面没有修饰的氮原子所决定, 小部分受其他原子的影响.

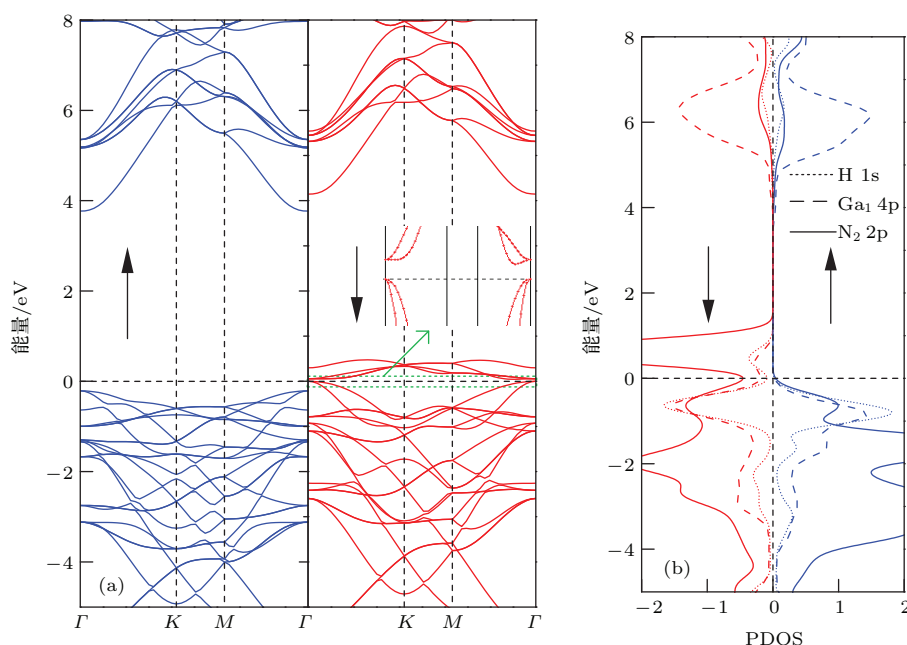


图 2 (网刊彩色) 铁磁态下两层 H-GaN 纳米薄膜的 (a) 能带结构图和 (b) 部分态密度图

Fig. 2. (color online) (a) Band structure and (b) partial density of states (PDOS) of two-bilayer H-GaN nanosheet in ferromagnetic state.

当对两层 H-GaN 纳米薄膜施加应变 ($\varepsilon = -6\% \sim +6\%$) 后, 其上旋轨道和下旋轨道中能隙 E_g 是关于应变 ε 的函数关系, 如图 3 所示. 研究发现该纳米薄膜在应变 $\varepsilon = 0 \sim +6\%$ 的拉应变作用下依然为铁磁性半导体. 此时上旋轨道中能隙 E_g 将可降低到 2.71 eV, 这是因为导带底能级下移和价带顶能级上移共同作用的结果; 而下旋轨道中导带底能级上移, 促使能隙 E_g 增加到 0.41 eV. 而当压应变为 $\varepsilon = -1\%$ 时, 它将转变为铁磁性半金属, 此时上旋轨道具有半导体性质, 能隙值为 4.16 eV; 而下旋轨道展示出金属性质. 伴随着压应变的增

加, 导带底能级上移的幅度比价带顶能级下移的幅度大, 它们共同作用促使上旋轨道中的能隙 E_g 逐渐增加, 甚至达到 4.79 eV; 下旋轨道中能级始终贯穿费米面, 导致该轨道保持金属性质. 当压应变为 $\varepsilon = -6\%$ 时, 上旋和下旋轨道中能级都贯穿费米面, 促使两层 H-GaN 纳米薄膜转变为铁磁性金属.

为了确定铁磁态下两层 H-GaN 纳米薄膜的结构稳定性, 其结合能 E_b 采用公式 $E_b = (E_{\text{H-GaN}} - E_{\text{GaN}} - n_{\text{H}}E_{\text{H}})/n_{\text{H}}$ 来进行计算, 其中 E_{GaN} 和 $E_{\text{H-GaN}}$ 分别为没有表面修饰和半氢化的两层氮化镓纳米薄膜的能量, E_{H} 为单个氢原子的

能量, 而 n_H 为氢原子的个数. 系统的结合能 E_b 越小, 系统越稳定. 图 4 给出在应变作用下两层 H-GaN 纳米薄膜的结合能 E_b 是关于应变 ε 的函数. 采用密度泛函理论 DFT-D 计算得到两层 H-GaN 纳米薄膜的结合能 E_b 为 -1.20 eV, 比单层 H-GaN 纳米薄膜的结合能 (-0.75 eV) 在数值上更低, 表明对两层氮化镓纳米薄膜表面的镓原子进行氢化是更容易实现. 研究发现, 伴随着拉应变(压应变)的增加, 结合能 E_b 数值呈现线性增加(降低), 这表明在压应变作用下, 铁磁态下两层 H-GaN 纳米薄膜的原子结构更为稳定. 值得注意的是, 铁磁态下两层 H-GaN 纳米薄膜在 -6% — $+6\%$ 的应变作用下其原子结构依然稳定.

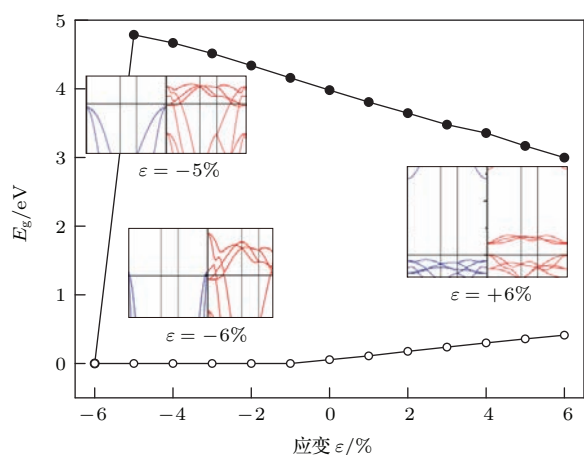


图 3 (网刊彩色) 铁磁态下两层 H-GaN 纳米薄膜的上旋轨道和下旋轨道中的能隙 E_g 关于应变 ε 的函数关系图, 其中实心圆和空心圆分别代表上旋和下旋轨道中的能隙. 插图为在不同应变场下的局部能带结构图

Fig. 3. (color online) For two-bilayer H-GaN nanosheets in ferromagnetic states, band gaps ΔE_g in spin-up (solid spheres) and spin-down (hollow spheres) states as a function of strain ε , where the inserts show the partial band structures for $\varepsilon = +6\%$, $\varepsilon = -5\%$, and $\varepsilon = -6\%$.

上述研究结果证实了应变可以有效调控两层半氢化氮化镓纳米薄膜的电学和磁学性质, 促使该纳米薄膜可具有铁磁性的半导体、半金属和金属性质. 该电学和磁学性质可从两个方面来理解^[23]: 表面氮原子的键间交互影响和 p-p 轨道直接交互影响. 键间交互影响表示一个原子的上旋(下旋)密度影响其最近邻原子的下旋(上旋)密度; 而 p-p 轨道直接交互影响表示一个原子的上旋(下旋)密度只是影响其最近邻同种元素的下旋(上旋)密度, 而不需其他原子调节. 尽管键间交互影响和 p-p 轨道直接交互影响两种方法, 从键的角度理解是相

同的, 但是表面氮原子的键间交互影响受到相邻镓原子的间接调节, 而表面氮原子的 p-p 轨道直接交互影响是通过真空直接调节. 结果发现对于没有应变作用下两层 H-GaN 纳米薄膜, 表面相邻氮原子间的键长 d_{N2-N2} 约为 3.182 Å, 表面氮原子和相邻的镓原子间的键长 d_{N2-Ga2} 约为 1.892 Å. 伴随着压应变(拉应变)的增加, d_{N2-N2} 和 d_{N2-Ga2} 都将减小(增加). 此外, 两层 H-GaN 纳米薄膜表面上镓原子和其表面吸附的 H 原子间 H—Ga₁ 键的键长 d_{H-Ga1} 伴随着压应变的增加而减小; 而伴随拉应变的增加, 它基本保持不变. 该研究结果暗示了应变对两层半氢化的氮化镓纳米薄膜的电学和磁学性质的调控作用主要是由键间交互影响和 p-p 轨道直接交互影响共同决定的. 从而揭示了两层半氢化氮化镓纳米薄膜分别呈现铁磁性半导体、半金属和金属性质的根本原因.

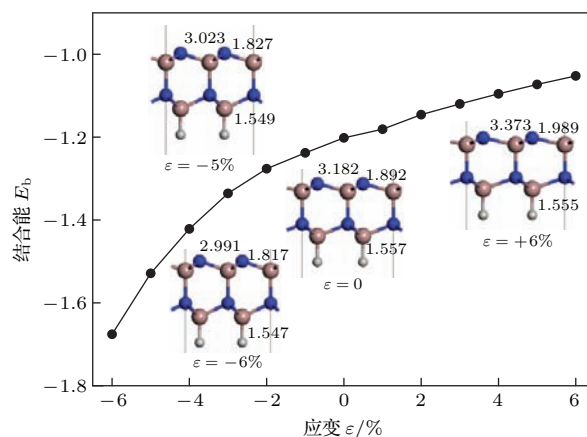


图 4 (网刊彩色) 铁磁态下的两层 H-GaN 纳米薄膜结合能 E_b 关于应变 ε 的函数关系图. 插图给出在不同应变作用下的原子结构图及键长变化

Fig. 4. (Color online) For two-bilayer H-GaN nanosheets in ferromagnetic states, binding energy E_b as a function of strain ε , where the inserts show the atomic structures and bond lengths for $\varepsilon = 0\%$, $\varepsilon = +6\%$, $\varepsilon = -5\%$, and $\varepsilon = -6\%$.

4 结 论

总之, 采用基于密度泛函理论的第一性原理模拟方法, 我们系统研究了两层半氢化氮化镓纳米薄膜的电学和磁学性质伴随着应变的变化规律. 研究结果表明, 当只有表面的镓原子被氢化时, 两层半氢化氮化镓纳米薄膜转变为铁磁性半导体. 当施加一定的应变 ($-6\% \leq \varepsilon \leq +6\%$) 时, 两层半氢化氮化镓纳米薄膜依然具有铁磁性质. 但是, 当压应变 $\varepsilon = -1\%$ 时, 两层半氢化氮化镓纳米薄膜将转变为

铁磁性半金属; 伴随压应变的增加, 其上旋轨道的能隙将单调增加; 当压应变 $\varepsilon = -6\%$ 时, 它将转变为铁磁性金属. 然而, 在拉应变 ($\varepsilon \leq +6\%$) 作用下, 两层半氢化氮化镓纳米薄膜依然为铁磁性半导体, 其上旋轨道的能隙将逐渐降低, 而下旋轨道的能隙将增大. 这主要是由表面氮原子的键间交互影响和 p-p 轨道直接交互影响共同作用的结果. 此外, 铁磁态下两层半氢化氮化镓纳米薄膜在应变作用下其原子结构始终稳定. 该研究结果证实了表面修饰和应变可有效调节氮化镓纳米薄膜的性质, 为设计新型的电子器件和电子自旋器件开辟了新的设计思路, 并具有非常重要的科学研究意义.

参考文献

- [1] Morkoc H, Strite S, Gao G B, Lin M E, Sverdlov B, Burns M 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 1363
- [2] Liu Y A, Zhuang Y Q, Du L, Su Y H 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 140703 (in Chinese) [刘宇安, 庄奕琪, 杜磊, 苏亚慧 2013 物理学报 **62** 140703]
- [3] Zhang D Y, Zheng X H, Li X F, Wu Y Y, Wang J F, Yang H 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 068801
- [4] Ma Y D, Dai Y, Guo M, Niu C W, Yu L, Huang B B 2011 *Appl. Surf. Sci.* **257** 7845
- [5] Lopez-Bezanilla A, Ganesh P, Kent P R C, Sumpter B G 2014 *Nano Research* **7** 63
- [6] Goldberger J, He R R, Zhang Y F, Lee S, Yan H Q, Choi H J, Yang P D 2003 *Nature* **422** 599
- [7] Bae S Y, Seo H W, Park J, Yang H, Kim H, Kim S 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 4564
- [8] Xiang X, Cao C B, Huang F L, Lv R T, Zhu H S 2004 *J. Cryst. Growth* **263** 25
- [9] Duan X F, Lieber C M 2000 *J. Am. Chem. Soc.* **122** 188
- [10] Guo R H, Lu T P, Jia Z G, Shang L, Zhang H, Wang R, Zhai G M, Xu B S 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 127305 (in Chinese) [郭瑞花, 卢太平, 贾志刚, 尚林, 张华, 王蓉, 翟光美, 许并社 2015 物理学报 **64** 127305]
- [11] Sahin H, Cahangirov S, Topsakal M, Bekaroglu E, Akturk E, Senger R T, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155453
- [12] Freeman C L, Claeysens F, Allan N L, Harding J H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 066102
- [13] Gao N, Zheng W T, Jiang Q 2012 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** 257
- [14] Chen X F, Lian J S, Jiang Q 2012 *Phys. Rev. B* **86** 125437
- [15] Zhang W X, Li T, Gong S B, He C, Duan L 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 10919
- [16] Li S, Wu Y F, Liu W, Zhao Y H 2014 *Chem. Phys. Lett.* **609** 161
- [17] Tang Q, Cui Y, Li Y F, Zhou Z, Chen Z F 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 1724
- [18] Zhou J, Wang Q, Sun Q, Chen X S, Kawazoe Y, Jena P 2009 *Nano Lett.* **9** 3867
- [19] Dai Q Q, Zhu Y F, Jiang Q 2012 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** 1253
- [20] Xiao W Z, Wang L L, Xu L, Wan Q, Pan A L, Deng H Q 2011 *Phys. Status Solidi B* **248** 1442
- [21] Xiao M X, Yao T Z, Ao Z M, Wei P, Wang D H, Song H Y 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 8692
- [22] Wu M S, Xu B, Liu G, Ouyang C Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 227102 (in Chinese) [吴木生, 徐波, 刘刚, 欧阳楚英 2012 物理学报 **61** 227102]
- [23] Ma Y D, Dai Y, Guo M, Niu C W, Yu L, Huang B B 2011 *Nanoscale* **3** 2301
- [24] Dong L, Yadav S K, Ramprasad R, Alpay S P 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 202106
- [25] Delley B 1990 *J. Chem. Phys.* **92** 508
- [26] Delley B 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 7756
- [27] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [28] Delley B 2002 *Phys. Rev. B* **66** 155125
- [29] Koelling D D, Harmon B N 1977 *J. Phys. C* **10** 3107
- [30] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [31] Li H M, Dai J, Li J, Zhang S, Zhou J, Zhang L J, Chu W S, Chen D L, Zhao H F, Yang J L, Wu Z Y 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 11390
- [32] Zhou J, Wang Q, Sun Q, Jena P 2010 *Phys. Rev. B* **81** 085442
- [33] Tang Q, Li Y F, Zhou Z, Chen Y S, Chen Z F 2010 *ACS Appl. Mater. Inter.* **2** 2442

Strain field tuning the electronic and magnetic properties of semihydrogenated two-bilayer GaN nanosheets*

Xiao Mei-Xia[†] Liang You-Ping Chen Yu-Qin Liu-Meng

(College of Materials Science and Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an 710065, China)

(Received 25 September 2015; revised manuscript received 25 October 2015)

Abstract

In this paper, first-principles calculations based on the density functional theory are performed to investigate the effects of strain field on the electronic and magnetic properties of two-bilayer gallium nitride (GaN) nanosheets. The two-bilayer GaN nanosheet without surface modification forms a planar graphitic structure, whereas that with full hydrogenation for the surface Ga and N atoms adopts the energetically more favorable wurtzite structure. Surface hydrogenation is proven to be an effective way to induce a transition from indirect to direct band gap. The bare and fully-hydrogenated GaN nanosheets are nonmagnetic semiconductors. When only one-side Ga or N atoms on the surface are hydrogenated, the semihydrogenated two-bilayer GaN nanosheets will preserve their initial wurtzite structures. The two-bilayer GaN nanosheet with one-side N atoms hydrogenated transforms into a nonmagnetic metal, while that with one-side Ga atoms hydrogenated (H-GaN) is a ferromagnetic semiconductor with band gaps of 3.99 and 0.06 eV in the spin-up and spin-down states, respectively. We find that the two-bilayer H-GaN nanosheets will maintain ferromagnetic states under a strain field and the band gaps E_g in spin-up and spin-down states are a function of strain ε . As the tensile strain is +6%, the band gap in spin-up state reduces to 2.71 eV, and that in spin-down state increases to 0.41 eV for the two-bilayer H-GaN nanosheets. Under the compressive strain field, the two-bilayer H-GaN nanosheets will show a transition from semiconducting to half-metallic state under compression of -1%, where the spin-up state remains as a band gap insulator with band gap of 4.16 eV and the spin-down state is metallic. Then the two-bilayer H-GaN nanosheets will turn into fully-metallic properties with bands crossing the Fermi level in the spin-up and spin-down states under a compressive strain of -6%. Moreover, the value of binding energy E_b for the two-bilayer H-GaN nanosheet decreases (increases) monotonically with increasing compressive (tensile) strain. It is found that although hydrogenation on one-side Ga atoms of the two-bilayer H-GaN nanosheets is preferred to be under compressive strain, the two-bilayer H-GaN nanosheets are still the energetically favorable structures. The physical mechanisms of strain field tuning band gaps in the spin-up and spin-down states for the two-bilayer H-GaN nanosheets are mainly induced by the combined effects of through-bond and p-p direct interactions. Our results demonstrate that the predicted diverse and tunable electronic and magnetic properties may lead to the potential application of GaN nanosheets in novel electronic and spintronic nanodevices.

Keywords: GaN nanosheets, surface modification, strain field, electronic and magnetic properties

PACS: 31.15.es, 61.46.-w, 75.70.Ak, 81.05.Ea

DOI: 10.7498/aps.65.023101

* Project supported by the Scientific Research Foundation of the Education Department of Shaanxi Province, China (Grant No. 2013JK0894), the National College Students' Training Programs for Innovation and Entrepreneurship of Shaanxi province, China (Grant No. 201510705230), the Youth Science and Technology Innovation Fund of Xi'an Shiyou University, China (Grant No. 2012BS004), and the Provincial Superior Discipline for Materials Science and Engineering of Xi'an Shiyou University, China (Grant No. 312010005).

[†] Corresponding author. E-mail: mxxiao@xsyu.edu.cn