

压缩应变载荷下氮化镓隧道结微观压电特性及其巨压电电阻效应

张耿鸿 朱佳 姜格蕾 王彪 郑跃

Atomic scale piezoelectricity and giant piezoelectric resistance effect in gallium nitride tunnel junctions under compressive strain

Zhang Geng-Hong Zhu Jia Jiang Ge-Lei Wang Biao Zheng Yue

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 107701 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.107701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.107701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

电驱动金刚石对顶砧低温连续加压装置

In situ tuning hydrostatic pressure at low temperature using electrically driven diamond anvil cell

物理学报.2016, 65(3): 037701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037701>

射频磁控溅射制备氮化锌薄膜的椭圆偏振光谱研究

Spectroscopic ellipsometry study of the Zn₃N₂ films prepared by radio-frequency sputtering

物理学报.2014, 63(13): 137701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.137701>

掺铒硫系玻璃的制备及其微结构光纤的中红外信号放大特性研究

Fabrication of erbium-doped chalcogenide glass and study on mid-IR amplifying characteristics of its microstructured fiber

物理学报.2012, 61(15): 157701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.157701>

一维压电 Fibonacci 类准周期声子晶体传输特性

The transmission properties in one-dimensional piezoelectric Fibonacci-class quasi-periodical phononic crystals

物理学报.2012, 61(10): 107702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.107702>

压缩应变载荷下氮化镓隧道结微观压电特性 及其巨压电电阻效应*

张耿鸿¹⁾²⁾ 朱佳¹⁾²⁾ 姜格蕾¹⁾²⁾ 王彪^{1)2)3)†} 郑跃^{1)2)‡}

1) (中山大学物理科学与工程技术学院, 微纳物理力学实验室, 广州 510275)

2) (中山大学光电材料与技术国家重点实验室, 广州 510275)

3) (中山大学中法核工程与技术学院, 珠海 519082)

(2015年12月3日收到; 2016年2月18日收到修改稿)

电子器件可控性研究在日益追求器件智能化和可控化的当今社会至关重要. 基于第一性原理和量子输运计算, 本文研究了压缩应变载荷对氮化镓 (GaN) 隧道结基态电学性质和电流运输的影响, 在原子尺度上窥视了氮化镓隧道结的微观压电性, 验证了其内在的巨压电电阻 (GPR) 效应. 计算结果表明, 压缩应变载荷可以调节隧道结内氮化镓势垒层的电势能降、内建电场、电荷密度和极化强度, 进而实现对隧道结电流运输和隧穿电阻的调控. 在 -1.0 V 的偏置电压下, -5% 的压缩应变载荷将使氮化镓隧道结的隧穿电阻增至 4 倍. 本研究展现了氮化镓隧道结在可控电子器件中的应用潜力, 也展现了应变工程在调控电子器件性能方面的光明前景.

关键词: 应变调控, GaN 隧道结, 微观压电性, 巨压电电阻效应

PACS: 77.65.-j, 77.80.bn, 73.50.Dn, 77.84.Bw

DOI: 10.7498/aps.65.107701

1 引言

21 世纪以来, 基于压电效应和半导体效应的压电电子学迅猛发展, 2009 年已被评为十大新兴科技之一. 目前, 结合纳米科技, 压电电子学已成为一大热点前沿, 引起广泛关注. 它广泛研究微纳尺寸下压电半导体材料和器件的物理性能、影响因素、性能改善和调控、理论机理和发展应用等.

氮化镓 (GaN) 作为第三代半导体 (宽禁带半导体) 材料的代表, 其禁带宽度高达 3.4 eV, 具有高热导、高击穿场强和稳定化学性等诸多优点, 其抗辐射腐蚀和耐高温高压能力很强, 广泛应用于高温大功率设备^[1,2]. GaN 还具有很好的光学性质, 可应用于发光器件, 如蓝光、白光发光二极管^[3,4]. 此外, GaN 还是压电材料, 具有很强的极化电场, 其异质

结界面可以形成高浓度高迁移率的二维电子气, 广泛应用于高频晶体管和场效应管中^[5,6]. GaN 已成为现代半导体研究热点领域之一.

众所周知, 在材料和器件的生产、制备、组装和加工应用过程中, 应力应变很难避免. 它会伴随着器件中缺陷的存在, 界面晶格的失配, 外界力学载荷的加载等因素而引入. 应力应变的存在必然会对器件, 特别是压电功能器件的性能产生影响. 研究应力应变对材料和器件的影响并加以利用, 从而实现材料和器件性能的改善或调控, 这已成为一种方法并发展成一门热点工程 (应力、应变工程). 它在日益追求器件智能化和可控化的当今社会更加显示出重要的科研价值和现实意义, 并取得了不少成果. 比如, 在铁电领域, Zheng 和 Woo^[7] 从理论上提出了基于力学载荷的方式调控铁电隧道

* 中国博士后科学基金 (批准号: 2014M552267) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20110171110022) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangbiao@mail.sysu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zhengy35@mail.sysu.edu.cn

结隧穿电阻,首次发现其巨压电电阻(GPR)效应,即力学载荷可以显著调节隧道结隧穿电阻使其发生巨大变化,这在可控电子器件和传感器等方面具有很大的应用前景. Luo等^[8]从第一性原理上也验证了铁电隧道结的力学调控效应. 而在压电领域, Zhang等^[9]从第一性原理上实现了应变载荷对氧化锌(ZnO)隧道结电学性质和隧穿电流的调控,揭示了其GPR效应. 实验上, Yang等^[10]基于ZnO的压电性制备了高灵敏度的压电传感器;而文献^[11–15]研究了力学载荷对ZnO纳米线、纳米带电子运输的影响并组装了各式各样力学调控电子器件,同时对其内在影响调节机理进行系统理论计算和模拟研究并创立了压电电子学和压电光子学.

然而,对于与ZnO具有相同纤锌矿结构的Ga₂N而言,早期研究更多集中于微电子和光电子领域,主要研究其光、电性能,而对其压电性能也集中于其体材料的能带、极化、弹性、介电等宏观基本性质的研究^[16–18],但对其纳米压电性的研究则相对较少. 最近,随着Ga₂N纳米结构的研发和制备,有关Ga₂N纳米结构压电性能的研究逐渐取得进展. Agrawal和Espinosa^[19]2011年对比研究了Ga₂N和ZnO纳米线的巨压电特性尺寸效应,发现Ga₂N巨压电特性与纳米线尺寸的相互关系比ZnO更为显著. 同时, Zhang等^[20]研究了Ga₂N纳米线压电性质在温度和尺寸下的行为. 此外,2012年Yu等^[21]针对Ga₂N纳米带运输性质的压电效应进行了研究. 随后,其所在的王中林科研组研究了Ga₂N纳米带的压电电子行为,成功研制Ga₂N压电晶体管并用以组装相应的逻辑器件^[22,23]. 最近,他们又发现Ga₂N纳米线的压电电子行为受极性取向的影响^[24]. 现在,人们越来越关注Ga₂N纳米材料及其器件的压电性能,开始探索其影响因素并做相应的调控尝试和研究,取得了一定成果,如纳米发电机^[25],微型发光二极管^[26],光电探测器和传感器^[27]等. 与ZnO有着诸多相似性能的Ga₂N也将是纳米压电电子学研究的候选对象,有望在纳米压电电子领域独占一席之地,急待科研工作者的进一步研究.

本文将Ag-GaN-Ag隧道结为例,采用第一性原理和量子运输方法,研究压缩应变载荷对Ga₂N隧道结基态电学性质(如电势能、电场、电荷密度与极化强度)和电流运输的影响,一窥其微观压电行为,探索其应变载荷影响、调节规律,最终实现应变

载荷对其电学性能的调控.

2 计算模型与方法

本文构建的Ag-GaN-Ag隧道结原子结构示意图如图1所示. 它由(0001)取向的Ga₂N势垒薄膜夹在两个Ag(111)电极之间而构成,其中Ga₂N的 c 轴沿 z 轴负方向. 图中虚线方框为Ga₂N隧道结的晶胞单元,在 $x-y$ 平面周期性扩展. 图1(a)和图1(b)分别给出隧道结的侧面图和仰视图,图1(c)给出压缩应变载荷下的隧道结,显示了应变加载方式:沿着 $x-y$ 平面内晶胞的基矢方向均匀施加压缩应变. 这里应变大小定义为 $\epsilon = (a - a_0)/a_0$,其中 a 和 a_0 分别表示施加压缩应变时和未加应变时隧道结 $x-y$ 平面内晶胞晶格常数. 基于传统处理方法^[9,28]和Ga₂N及Ag的软硬质地,此处隧道结 $x-y$ 平面内晶格常数以Ga₂N为基准. 故 a_0 设定为计算所得的无应变载荷下Ga₂N晶胞的 a 值晶格常数,为3.216 Å.

本文所有隧道结的结构优化弛豫和基态性质计算都采用基于密度泛函理论和平面波基组的Vienna *ab-initio* simulation package (VASP)软件^[29]. 电子间交换关联势采用广义梯度近似(GGA)的Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)方案^[30],而赝势则采用Projector-Augmented Wave method (PAW)^[31]来描述. 在结构优化弛豫和基态性质自洽计算时布里渊区数值积分采用Monkhorst-Pack方法^[32]分别划分 k 点网格为 $9 \times 9 \times 3$ 和 $13 \times 13 \times 3$. 在结构优化弛豫过程中,能量收敛判据提高到 10^{-4} eV. 此外,对于不同应变载荷下的每个Ga₂N隧道结,其晶格常数 c 和各个原子的所有坐标都进行了自由弛豫.

GaN隧道结结构优化后,我们采用基于密度泛函理论和非平衡格林函数方法^[33]的Atomistic Toolkit package (ATK)软件^[34,35]研究隧道结在应变载荷下的电流输运行为. 为屏蔽Ga₂N势垒对电极的影响,在ATK中构建双电极体系时,中央散射区除了Ga₂N势垒层外还左右分别包含了4层和3层Ag原子. 计算中电子间交换关联势仍采用GGA-PBE. 为提高精度,所有原子的局域数值原子轨道基组采用双 ζ 极化(double zeta polarized). 此外,体系自洽计算时布里渊区 k 点取样采用 $18 \times 18 \times 100$ 的网格,而计算电流时,则采用了 70×70 的密集 k 点网格对垂直于电流输运方向上二维布里渊区中的透射谱进行积分.

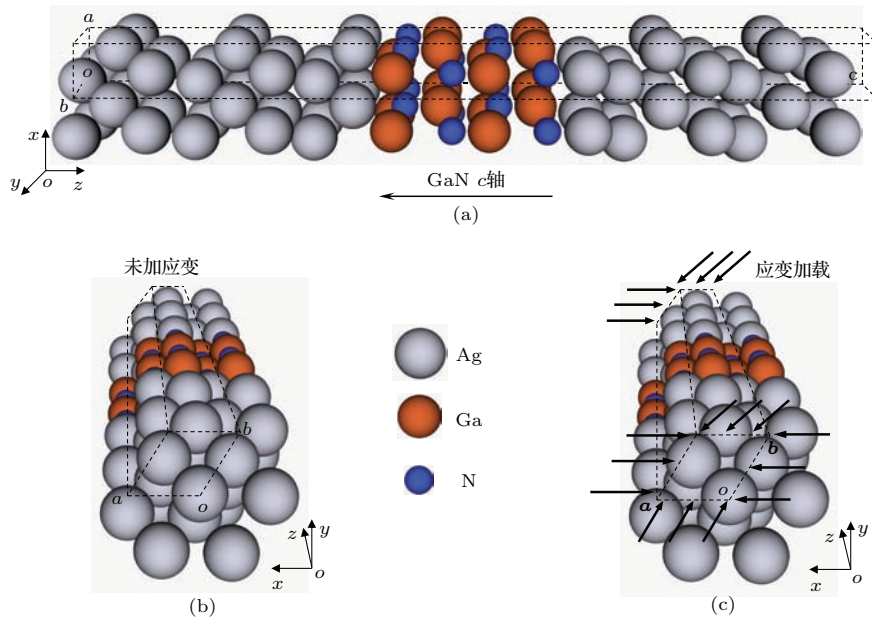


图1 (网刊彩色) Ag-GaN-Ag 隧道结原子结构示意图 (a) 侧面图, 其中虚线方框为隧道结的单元晶格; (b) 未加应变载荷时隧道结仰视图; (c) 隧道结应变载荷加载方式, 其中应变沿平行于面内晶格基矢 \mathbf{a} , \mathbf{b} 的方向施加
 Fig. 1. (color online) Schematic atomic structure of the Ag-GaN-Ag tunnel junction: (a) Side view of the tunnel junction, the unit cell of the junction is shown by the box; (b) top view of the junction without strain; (c) scheme of strain how to apply into the junction, which is parallel to the in-plane lattice basic vectors, \mathbf{a} and \mathbf{b} .

3 计算结果与分析

3.1 GaN 隧道结电势能降及其应变调节

由于 GaN 晶体的非中心对称结构, 隧道结中 GaN 势垒层左右原子端面各不相同, 势必会影响其电子电势分布. 为此我们计算了零应变载荷下 Ag-GaN-Ag 隧道结沿 z 方向的电子静电电势能,

如图 2(a) 所示. 图中的平面平均 (planar average, PA) 曲线是对计算所得的三维空间电势能分布沿着 z 方向在 x - y 平面进行积分平均而得到, 而红色曲线则是采用了宏观双平均 (double macroscopic average, DMA) 方法 [36,37] 对 PA 曲线进行了光滑处理以过滤掉不相关的原子振荡信息. 可以看到, 由于 GaN 势垒层左右端面的不同, 其电势能曲线存在明显的电势能降, 进而具有相应的内建电场.

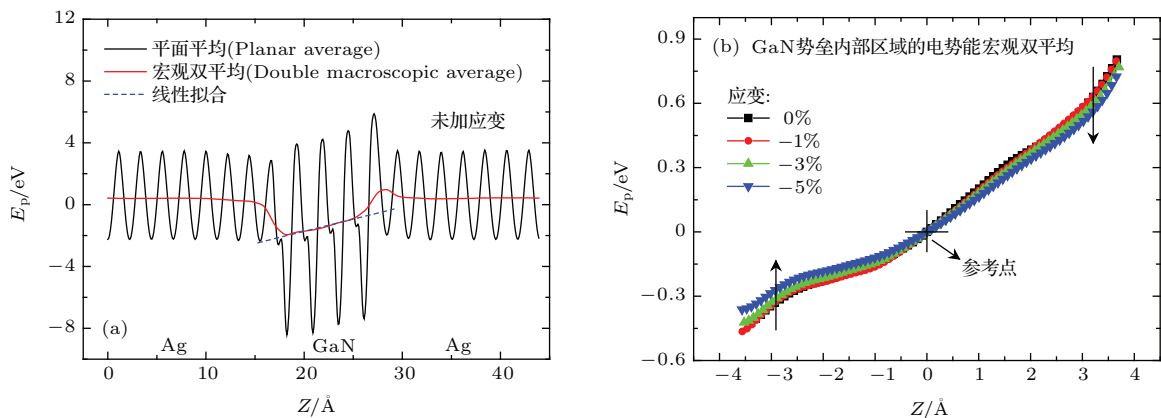


图2 (网刊彩色) GaN 隧道结 z 方向上静电电势能分布图 (a) 未加应变载荷下 GaN 隧道结 z 方向静电电势能分布图; (b) 压缩应变载荷下隧道结中 GaN 势垒层内部区域的电势能分布图, 其中箭头给出了电势能随应变的演化趋势
 Fig. 2. (color online) Electrostatic potential energy distribution of the GaN tunnel junction in the z direction: (a) The electrostatic potential energy profile of the GaN tunnel junction without strain; (b) the double macroscopic averages (DMAs) of the electrostatic potential energy in the central GaN region under different compressive strains, the evolution trend of the DMA with applied strain is labeled by the arrows.

通过对此电势能降进行线性拟合, 可以估算其内建电场大概为 1.58 V/nm . 此外, 相对于远离界面处更为光滑的电势能 DMA 曲线, 还可以看到界面处因势垒和电极的相互作用而产生的电势能扰动, 具有较为明显的界面效应.

我们知道, GaN 为压电材料, 应变载荷势必会对其物理性能产生影响. 为了研究应变载荷对 GaN 势垒层电势能的影响, 图 2(b) 给出了不同压缩应变载荷下 GaN 势垒层内部区域的电势能变化情况. 为了方便不同应变载荷下隧道结电势能的比较, 我们以隧道结内 GaN 势垒层的中心为统一的零能量参考点. 可以看到, 应变载荷可以对 GaN 势垒层的电势能降产生调控作用, 进而调节其内建电场. 相对于零应变载荷时 GaN 势垒层因结构非对称而导致的固有电势能降, 施加 x - y 平面内的压缩应变可以减缓其电势能降, 从而减小其内建电场, 而且所加压缩应变载荷越大, 减缓程度越强. 当压缩应变载荷增强到 -5% 时, 隧道结 GaN 势垒层内建电场将降为 1.36 V/nm . 应变载荷下 GaN 势垒层电势能降的演变意味着应变载荷下 GaN 势垒将会产生一个压电电势和压电电场, 从而导致其电势能的变化, 它来源于 GaN 的压电性.

3.2 GaN 隧道结微观压电电荷及其极化强度的应变演化

下面将进一步研究微观原子尺度上 GaN 隧道结的压电性. 利用泊松方程 $\nabla^2 U = -\rho/\epsilon$, 可以从电势能曲线上求得体系的电荷密度分布 [38]. 为了简化计算, ϵ 取为真空介电常数. 为了提高精度, 在上述电势能计算过程中, 隧道结 z 轴方向上总共计算了 1000 个电势能数据点. 图 3(a) 给出了压缩应变载荷下隧道结中 GaN 势垒层内部的压电电荷密度分布演化情况. 压电电荷密度定义为应变载荷和零应变载荷下体系电荷密度之差. 图中用点线同时标出各原子层的位置. 可以看到势垒层内微观压电电荷密度分布并不均匀, 与原子位置密切相关, 具有振荡性, 且端面处的压电电荷密度相对较大. 此外, 从图 3(a) 可以看到明显的压电效应, 即随着应变载荷的增强, 势垒层内压电电荷密度随之单调增大.

在 GaN 晶体结构中, 每个原子 (Ga 或 N) 都被四个另一种原子 (N 或 Ga) 包围形成四面体. 然而由于 GaN 的非中心对称结构, 在 c 轴方向上四面体的正负离子中心并不重合, 从而导致无外加载荷

情况下 GaN 仍存在自发极化. 这是一种因结构非对称性而诱导的极化, 简称结构极化. 通过密度泛函微扰理论 [39] 计算 GaN 各原子玻恩有效电荷后, 乘以单位体积中 GaN 四面体内正负离子中心的相对位移便可计算出 GaN 的自发离子位移极化强度. 基于此方法我们估算了零应变载荷下隧道结中 GaN 势垒层的平均极化强度为 0.12 C/m^2 . 当施加应变载荷时, 由于压电效应, 其极化将发生变化. 图 3(b) 展示了压缩应变载荷下隧道结 GaN 势垒层平均极化演化情况. 可以看到, 压缩应变载荷将会逐渐削弱 GaN 势垒层的平均极化强度. 当所加载压缩应变载荷足够强时, 甚至会扭转势垒层中的极化, 使其发生反转. 事实上, 这意味着 GaN 势垒层中存在某种因应变而诱导的压电极化, 它与因结构非对称而产生的结构极化叠加在一起而形成了最终的总极化.

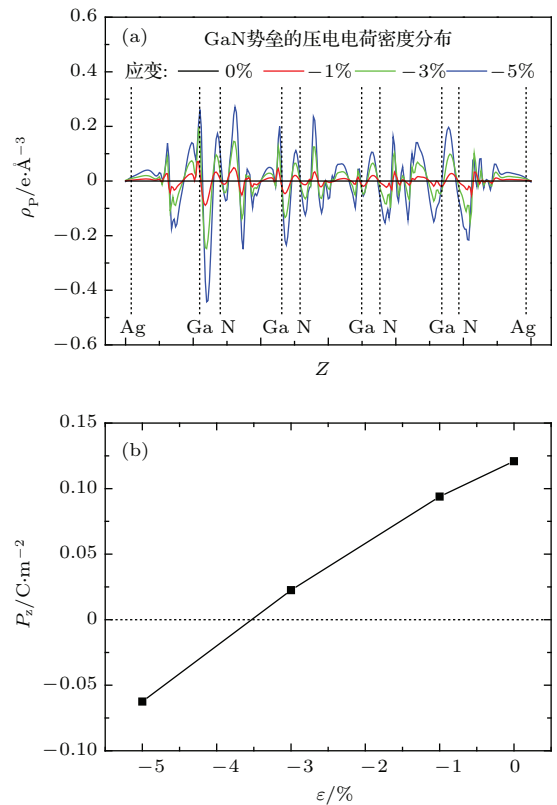


图 3 (网刊彩色) 隧道结中 GaN 势垒层压电电荷密度及其极化强度 (a) 应变载荷下隧道结中 GaN 势垒层内部压电电荷密度分布演化情况, 其中点线标出了各原子层的位置; (b) 应变载荷下隧道结 GaN 势垒层平均极化强度演化情况
Fig. 3. (color online) Piezocharge density and average polarization of the GaN barrier in the tunnel junction: (a) Piezocharge density distribution of the GaN barrier in the tunnel junction under strain. The position of each atomic layer is labeled by the dotted line; (b) strain inter-related evolution trend of the average polarization of GaN barrier in the tunnel junction.

3.3 GaN 隧道结电流运输的应变调控

上文研究了压缩应变载荷对 GaN 隧道结静电势能、电荷密度和极化强度的影响, 在原子尺度上窥视了 GaN 隧道结的微观压电性 (压电电势、压电电场、压电电荷和压电极化). 基于这些影响, 应变载荷势必会进一步对隧道结的电流运输产生影响. 为此, 我们利用 ATK 软件研究了压缩应变载荷下隧道结的电流运输行为.

在 ATK 软件中, 隧道结隧穿电流是通过 Landauer-Büttiker 公式求出 [37,40]:

$$I = \frac{2e}{h} \int T(E)[f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]dE,$$

其中 μ_L , μ_R 和 f 分别是左、右电极的化学势和隧道结的费米分布函数, 而 $T(E)$ 则是隧道结的电子透射谱函数. 计算所得的应变载荷下 GaN 隧道结电流运输如图 4 (a) 所示. 当隧道结左电极所加电势高于右电极电势时定义为正向偏压. 可以看到,

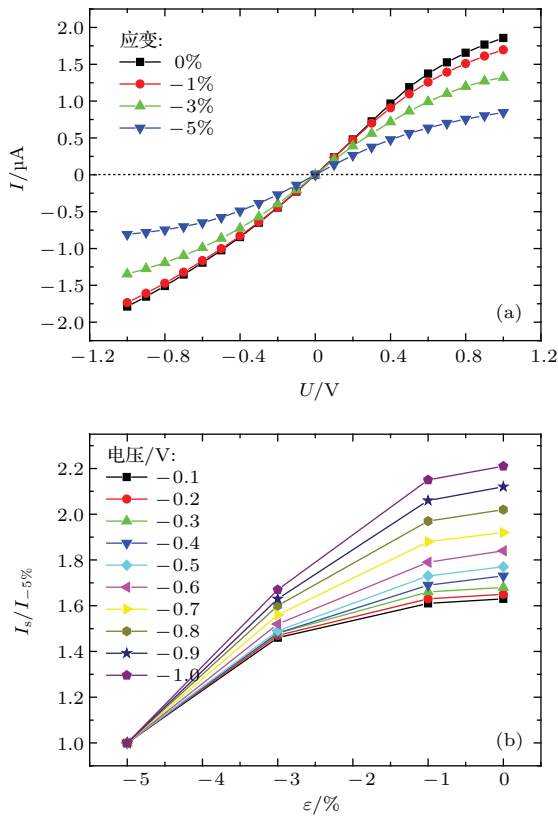


图4 GaN 隧道结的隧穿电流 (a) 应变载荷下隧道结的隧穿电流; (b) 不同电压下标度电流随应变的变化情况
Fig. 4. Tunneling current of the GaN tunnel junction: (a) Tunneling current as a function of bias voltage under different strains and (b) dependence of the rescaled tunneling current on the applied strain at different bias voltages.

电流随电压的变化并非线性. 在较大电压下电流增长减缓, 有饱和的倾向. 而且由于 GaN 势垒层的结构非对称性, 正负电压下的电流运输也稍有不同, 呈现出一定的电流非对称性. 此外, 还可以清晰地看到应变载荷对隧道结电流运输的调控. 随着所加载压缩应变载荷的减小, 隧道结隧穿电流逐渐增强. 因而可以利用应变载荷调节 GaN 隧道结的隧穿电流.

从图 4 (a) 还可以看到, 应变载荷对 GaN 隧道结隧穿电流的调节能力还与所加电压大小有关. 为了更清晰地展示应变载荷对隧穿电流的调控能力, 我们以反向偏压为例给出了不同电压下隧穿电流随应变的变化情况, 如图 4 (b) 所示. 图中的隧穿电流以 -5% 压缩应变载荷时隧道结的电流为基准 (即标度电流, $I_s/I_{-5\%}$). 总体而言, 随着压缩应变载荷的减弱, 隧穿电流逐渐增强. 此外, 不同电压下应变载荷对隧穿电流的调节能力不同, 较大电压下 GaN 隧道结隧穿电流的应变调控能力更强.

3.4 GaN 隧道结的巨压电阻效应

为了表征压缩应变载荷对 GaN 隧道结隧穿电阻的调控能力, 我们绘制了不同压缩应变载荷下隧道结隧穿电阻随外加电压的变化曲线, 如图 5 (a) 所示. 从图 5 (a) 可以看到, 由于隧道结 GaN 势垒结构的非对称性, 隧道结隧穿电阻随正负电压的变化呈现出明显的非对称性. 同时, 在任一应变载荷下, 隧道结隧穿电阻并非固定不变, 而与所加电压大小有关, 电压越强, 隧穿电阻越大. 此外, 应变载荷可以调节隧道结隧穿电阻. 在任一电压下, 随着应变载荷的逐渐增大, 隧穿电阻也逐渐增大. 在较大的电压下, 应变载荷对隧道结隧穿电阻的调控能力更强.

为了定量表征应变载荷对 GaN 隧道结隧穿电阻的调控能力, 我们引入巨压电阻 (giant piezoelectric resistance, GPR) 比值 [7-9], 定义为 $GPR = (R_s - R_0)/R_0$, 其中 R_s 和 R_0 分别表示应变载荷下和零应变载荷下 GaN 隧道结的隧穿电阻. 同时我们将应变载荷调节隧道结隧穿电阻发生显著变化的现象称之为 GPR 效应. 它是一种总效应, 包含了压电效应和压阻效应两部分的贡献 [9,13]. 图 5 (b) 以反向偏压为例给出了 GaN 隧道结的 GPR 比值随压缩应变载荷的演化情况. 可以看到, 在任一电压下, GPR 比值随应变载荷的增强而增大. 而且应变载荷越大, GPR 比值增长得越

快. 此外, 较大的电压也能获得更快的 GPR 比值增长. 在 -1.0 V 的偏压和 -5% 的应变载荷下, GaN 隧道结的 GPR 比值将接近 400% . 可见 GPR 比值对应变载荷的响应较为强烈, 应变可控 GaN 隧道结的隧穿电阻, 在隧道结内呈现出 GPR 效应.

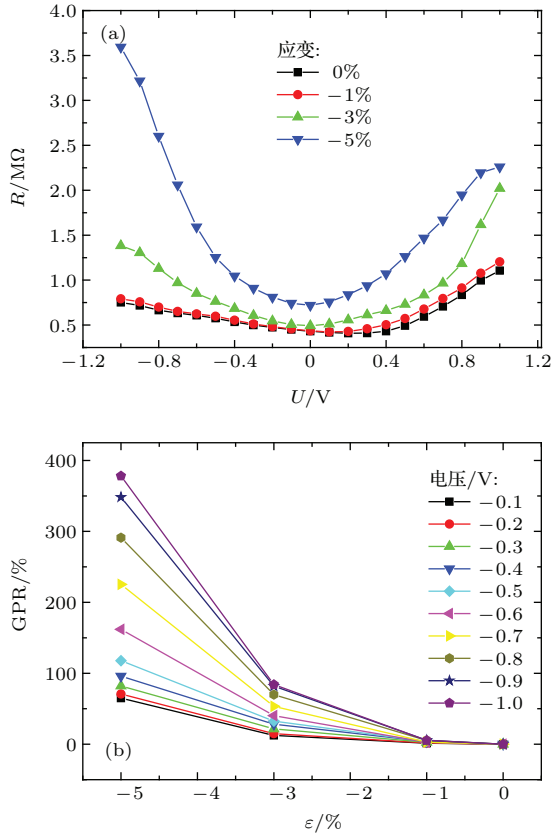


图5 (网刊彩色) GaN 隧道结隧穿电阻及其 GPR 效应 (a) 不同应变载荷下 GaN 隧道结的隧穿电阻; (b) 不同电压下隧道结的 GPR 比值随应变的演化情况

Fig. 5. (color online) Tunneling resistance and the GPR effect of the GaN tunnel junction: (a) Tunneling resistance of the GaN junction as a function of bias voltage under different strains; (b) GPR ratio as a function of applied strain for the tunnel junction under different bias voltages.

4 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理和非平衡格林函数方法, 我们研究了 Ag-GaN-Ag 隧道结中的电势能降、电荷密度与极化强度等基态电学性质和电流运输在压缩应变载荷下的行为规律. 计算结果表明, 由于 GaN 结构的非对称性, 隧道结内 GaN 势垒层中存在固有的电势能降、内建电场和自发极化. 压缩应变载荷可以调节隧道结内势垒层的电势能降、内建电场、极化强度和电荷密度, 蕴含着 GaN 势垒层内压电电势、压电电场、压电极化

和压电电荷的产生, 从中在原子尺度上窥视了 GaN 隧道结的微观压电性. 同时, 我们还实现了压缩应变载荷对 GaN 隧道结电流运输和隧穿电阻的调控, 展现出其内在的 GPR 效应. 具体而言, 随着压缩应变载荷的增强, 隧道结中 GaN 势垒的压电电荷密度逐渐增强, 电势能降逐渐变缓, 内建电场逐渐减弱, 平均极化强度逐渐减小乃至反转. 同时隧道结隧穿电流逐渐减弱, 隧穿电阻逐渐增强, 呈现出明显的应变调控规律. 尤其是在较大的偏置电压和较大的压缩应变载荷下, GaN 隧道结的电流、电阻调控能力更强. 在 -1.0 V 的偏置电压和 -5% 的压缩应变载荷下, GaN 隧道结的 GPR 比值将接近 400% , 这有望应用于可控电子器件和力电传感器中. 本研究将应变工程扩展到 GaN 器件性能调控之中, 实现了应变载荷对隧道结基态电学性能和电流运输的调控, 展现出应变工程在功能器件性能调控中的无限潜能和灿烂前景.

参考文献

- [1] Strite S, Morkoç H 1992 *J. Vac. Sci. Technol. B* **10** 1237
- [2] Ambacher O 1998 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31** 2653
- [3] Liou J K, Chen C C, Chou P C, Tsai Z J, Chang Y C, Liu W C 2014 *IEEE J. Quantum Elect.* **50** 973
- [4] Zhao L X, Yu Z G, Sun B, Zhu S C, An P B, Yang C, Liu L, Wang J X, Li J M 2015 *Chin. Phys. B* **24** 068506
- [5] Wu Y F, Saxler A, Moore M, Smith R P, Sheppard S, Chavarkar P M, Wisleder T, Mishra U K, Parikh P 2004 *IEEE Elect. Device Lett.* **25** 117
- [6] Higashiwaki M, Mimura T, Matsui T 2008 *Appl. Phys. Express* **1** 021103
- [7] Zheng Y, Woo C H 2009 *Nanotechnology* **20** 075401
- [8] Luo X, Wang B, Zheng Y 2011 *ACS Nano* **5** 1649
- [9] Zhang G H, Luo X, Zheng Y, Wang B 2012 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** 7051
- [10] Yang Y, Qi J J, Gu Y S, Wang X Q, Zhang Y 2009 *Phys. Status Solidi RRL* **3** 269
- [11] Wang Z L 2007 *Adv. Mater.* **19** 889
- [12] Zhou J, Fei P, Gu Y D, Mai W J, Gao Y F, Yang R S, Bao G, Wang Z L 2008 *Nano Lett.* **8** 3973
- [13] Zhang Y, Liu Y, Wang Z L 2011 *Adv. Mater.* **23** 3004
- [14] Feng X L, Zhang Y, Wang Z L 2013 *Sci. China Tech. Sci.* **56** 2615
- [15] Liu Y, Zhang Y, Yang Q, Niu S M, Wang Z L 2015 *Nano Energy* **14** 257
- [16] Jiao Z Y, Yang J F, Zhang X Z, Ma S H, Guo Y L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 117103 (in Chinese) [焦照勇, 杨继飞, 张现周, 马淑红, 郭永亮 2011 物理学报 **60** 117103]
- [17] Yang Z Q, Xu Z Z 1997 *Acta Phys. Sin. (Overseas Edition)* **6** 606
- [18] Hao G D, Chen Y H, Fan Y M, Huang X H, Wang H B 2010 *Chin. Phys. B* **19** 117104
- [19] Agrawal R, Espinosa H D 2011 *Nano Lett.* **11** 786

- [20] Zhang J, Wang C Y, Chowdhury R, Adhikari S 2013 *Scripta Mater.* **68** 627
- [21] Yu R M, Dong L, Pan C F, Niu S M, Liu H F, Liu W, Chua S, Chi D Z, Wang Z L 2012 *Adv. Mater.* **24** 3532
- [22] Yu R M, Wu W Z, Ding Y, Wang Z L 2013 *ACS Nano* **7** 6403
- [23] Yu R M, Wang X F, Peng W B, Wu W Z, Ding Y, Li S T, Wang Z L 2015 *ACS Nano* **9** 9822
- [24] Zhao Z F, Pu X, Han C B, Du C H, Li L X, Jiang C Y, Hu W G, Wang Z L 2015 *ACS Nano* **9** 8578
- [25] Wang C H, Liao W S, Ku N J, Li Y C, Chen Y C, Tu L W, Liu C P 2014 *Small* **10** 4718
- [26] Jiao Q Q, Chen Z Z, Ma J, Wang S Y, Li Y, Jiang S, Feng Y L, Li J Z, Chen Y F, Yu T J, Wang S F, Zhang G Y, Tian P F, Xie E Y, Gong Z, Gu E D, Dawson M D 2015 *Opt. Express* **23** 237856
- [27] Hertog M D, Songmuang R, Gonzalez-Posada F, Monroy E 2013 *Jpn. J. Appl. Phys.* **52** 11NG01
- [28] Kamiya T, Tajima K, Nomura K, Yanagi H, Hosono H 2008 *Phys. Status Solidi A* **205** 1929
- [29] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [30] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [31] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [32] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [33] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [34] Payne M C, Teter M P, Allan D C, Arias T A, Joannopoulos J D 1992 *Rev. Mod. Phys.* **64** 1045
- [35] Soler J M, Artacho E, Gale J D, García A, Junquera J, Ordejón P, Sánchez-Portal D 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 2745
- [36] Junquera J, Cohen M H, Rabe K M 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 213203
- [37] Zhang G H, Zheng Y, Wang B 2013 *J. Appl. Lett.* **114** 044111
- [38] Liu W, Zhang A H, Zhang Y, Wang Z L 2015 *Nano Energy* **14** 355
- [39] Gonze X, Lee C 1997 *Phys. Rev. B* **55** 10355
- [40] Datta S 1997 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press) pp102–112

Atomic scale piezoelectricity and giant piezoelectric resistance effect in gallium nitride tunnel junctions under compressive strain*

Zhang Geng-Hong¹⁾²⁾ Zhu Jia¹⁾²⁾ Jiang Ge-Lei¹⁾²⁾ Wang Biao^{1)2)3)†} Zheng Yue^{1)2)‡}

1) (*Micro-Nano Physics and Mechanics Research Laboratory, School of Physics and Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China*)

2) (*State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China*)

3) (*Institute Franco-Chinois de l'Energie Nucléaire, Sun Yat-sen University, Zhuhai 519082, China*)

(Received 3 December 2015; revised manuscript received 18 February 2016)

Abstract

It is an urgent and significant issue to investigate the influence factors of functional devices and then improve, modify or control their performances, which has important significance for the practical application and electronic industry. Based on first principle and quantum transport calculations, the effects of compressive strain on the current transport and relative electrical properties (such as the electrostatic potential energy, built-in electric field, charge density and polarization, etc.) in gallium nitride (GaN) tunnel junctions are investigated. It is found that there are potential energy drop, built-in electric field and spontaneous polarization in the GaN barrier of the tunnel junction due to the non-centrosymmetric structure of GaN. Furthermore, results also show that all these electrical properties can be adjusted by compressive strain. With the increase of the applied in-plane compressive strain, the piezocharge density in the GaN barrier of the tunnel junction gradually increases. Accordingly, the potential energy drop throughout the GaN barrier gradually flattens and the built-in electric field decreases. Meanwhile, the average polarization of the barrier is weakened and even reversed. These strain-dependent evolutions of the electric properties also provide an atomic level insight into the microscopic piezoelectricity of the GaN tunnel junction. In addition, it is inspiring to see that the current transport as well as the tunneling resistance of the GaN tunnel junction can be well tuned by the compressive strain. When the applied compressive strain decreases, the tunneling current of the junction increases and the tunneling resistance decreases. This strain control ability on the tunnel junction's current and resistance becomes more powerful at large bias voltages. At a bias voltage of -1.0 V, the tunneling resistance can increase up to 4 times by a -5% compressive strain, which also reveals the intrinsic giant piezoelectric resistance effect in the GaN tunnel junction. This study exhibits the potential applications of GaN tunnel junctions in tunable electronic devices and also implies the promising prospect of strain engineering in the field of exploiting tunable devices.

Keywords: strain regulation, GaN tunnel junctions, atomic scale piezoelectricity, giant piezoelectric resistance effect

PACS: 77.65.-j, 77.80.bn, 73.50.Dn, 77.84.Bw

DOI: 10.7498/aps.65.107701

* Project supported by the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2014M552267) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20110171110022).

† Corresponding author. E-mail: wangbiao@mail.sysu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhengy35@mail.sysu.edu.cn