物理学报 Acta Physica Sinica
Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

石墨炔/石墨烯异质结纳米共振隧穿晶体管第一原理研究

王天会 李昂 韩柏

First-principles study of graphyne/graphene heterostructure resonant tunneling nano-transistors

Wang Tian-Hui Li Ang Han Bai

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 68, 187102 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190859
在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.68.20190859
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

石墨烯纳米片大自旋特性第一性原理研究
First-principles study of graphene nanoflakes with large spin property
物理学报. 2018, 67(18): 187102 https://doi.org/10.7498/aps.67.20180867

石墨炔衍生物结构稳定性和电子结构的第一性原理研究
First-principle study of structure stability and electronic structures of graphyne derivatives
物理学报. 2017, 66(10): 107102 https://doi.org/10.7498/aps.66.107102

石墨烯纳米片磁有序和自旋逻辑器件第一原理研究
First-principles study of magnetic order in graphene nanoflakes as spin logic devices
物理学报. 2018, 67(21): 217101 https://doi.org/10.7498/aps.67.20181297

基于石墨烯-钙钛矿量子点场效应晶体管的光电探测器
Field effect transistor photodetector based on graphene and perovskite quantum dots
物理学报. 2018, 67(11): 118502 https://doi.org/10.7498/aps.67.20180129

二硫化钨/石墨烯异质结的界面相互作用及其肖特基调控的理论研究
Interfacial interaction and Schottky contact of two-dimensional WS_2/graphene heterostructure
物理学报. 2019, 68(9): 097101 https://doi.org/10.7498/aps.68.20190020

功能化扶手椅型石墨烯纳米带异质结的磁器件特性
Magnetic device properties for a heterojunction based on functionalized armchair-edged graphene nanoribbons
物理学报. 2016, 65(11): 118501 https://doi.org/10.7498/aps.65.118501

石墨炔/石墨烯异质结纳米共振隧穿晶体管第一原理研究*

王天会[1)] 李昂[1)] 韩柏[2)†]

1) (吉林大学珠海学院公共基础与应用统计学院, 珠海 519041)

2) (哈尔滨理工大学电气与电子工程学院, 工程电介质及其应用教育部重点实验室, 黑龙江省电介质工程重点实验室, 哈尔滨 150080)

(2019 年 6 月 1 日收到; 2019 年 7 月 10 日收到修改稿)

石墨烯和石墨炔的化学相容性表明它们能够以不同形式组合在一起, 从而构建新型超高频纳米晶体管. 通过石墨烯-石墨炔-石墨烯异质结纳米带构建双极器件模拟了两种新型纳米共振隧穿晶体管, 根据基于密度泛函理论的第一原理和非平衡格林函数方法对该晶体管的电子结构和量子输运特性进行了理论计算. 电子透射谱和电流-电压曲线的计算结果证明该晶体管的电流主要来源于共振隧穿跃迁并可由横向栅极电压控制, 因此可用作超高频纳米晶体管.

关键词: 石墨烯, 石墨炔, 纳米带异质结构, 共振隧穿晶体管

PACS: 71.15.Mb, 73.21.Cd, 73.21.Hb, 71.70.Fk **DOI:** 10.7498/aps.68.20190859

1 引 言

根据摩尔定律, 集成电路中每平方英寸的元件数量预计每两年翻一倍. 当微电子器件的关键尺寸缩小到 14 nm 以下, 继续发展高密度小尺寸的微电子集成电路面临着制造技术和器件性能的双重限制. 这些限制可以通过研制晶体管通道新材料来克服[1,2]. 由极小电子通道构建的电子晶体管器件尺寸成比例减小, 运行速度超快、能效高, 并且受其他性能和外界环境的影响较小[3,4].

碳纳米结构是潜在的高性能晶体管电子材料. 石墨烯基晶体管具有独特的电子特性, 将会替代硅纳米电子器件成为制造高性能集成电路的超快信息处理器件[5,6]. 为了能够控制石墨烯晶体管的电子跃迁, 石墨烯纳米材料应具有明显的可控电子带隙, 具有半导体能带特征而不是金属导电特性. 近年来诸多文献已经报道了控制石墨烯带隙方法, 包括施加电场、掺杂某些原子、拉伸和挤压等[7,8]. 石墨炔具有与石墨烯相似的平面周期结构, 但其碳原子成键由 sp 和 sp^2 混合杂化态组成, 因此以表示碳三键的碳炔命名. 自从 2010 年以六乙苯为原料在铜表面通过偶联反应首次合成石墨炔薄膜以后, 诸多实验和理论计算研究表明, 石墨炔因其成键的复杂性而呈现多种稳定结构[9–12]. 经典分子动力学模拟预测单层石墨炔的平面原子层内刚度可达到 170.4 N/m; 而基于密度泛函理论的广义梯度近似 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函第一原理计算证明石墨炔平面刚度和带隙分别为 165.8 N/m 和 0.46 eV[11,12]. 此外, Zhou 等[13] 利用 Materials Studio 软件包的 Dmol3 模块计算证明石墨炔纳米带的随纳米带结构发生改变, 带隙能够达到 0.49 eV. 与石墨烯晶体管相比, 石墨烯/石墨炔异质结具有明显的电子带隙, 可有效地应用于共振隧穿晶体管.

* 国家自然科学基金 (批准号: 51607048) 和黑龙江省普通本科高等学校青年创新人才培养计划 (批准号: UNPYSCT-2016049) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: bak_han@sina.com

© 2019 中国物理学会 Chinese Physical Society

共振隧穿晶体管是 1985 年由 Capasso 和 Kiehl 首先提出的, 因其在逻辑和信号处理方面广泛的应用潜力而备受关注[14]. 在栅极电压为零的条件下, 共振隧穿晶体管势阱中的电子能量小于势垒的能量, 不发生共振隧穿; 当施加栅极电压使沟道区导带底能级与源极或漏极的费米能级相同时, 产生的电流最大, 为峰电流; 当施加栅极电压继续增加致使导带底能级高于势垒能级时, 电流迅速下降, 呈现负微分电导, 但是由于热激发和隧穿沟道的影响导致电流不为零, 产生谷电流. 与传统的场效应晶体管相比, 共振隧穿晶体管具有高频、高速、低偏置电压及低功耗、双稳、自锁和少量器件完成多种逻辑功能等独特的性能. Teong 等[15] 基于 π 轨道紧束缚近似的非平衡格林函数 (NEGF) 方法, 探索石墨烯纳米带用于共振隧穿晶体管的可能性, 研究石墨烯的形状和操作温度对器件性能的影响, 通过改变石墨烯纳米带沟道的宽度和长度, 共振隧穿晶体管可以针对不同的应用进行调谐. Britnell 等[16] 发现当两个石墨烯电极的电子能谱对齐时夹在两个石墨烯电极之间的氮化硼将会发生电子共振跃迁, 电流-电压曲线呈现明显的共振峰, 峰谷比在 1—4 范围内. Mishchenko 等[17] 报道了夹在两个石墨烯电极之间的六边形氮化硼 (BN) 阻挡层呈现电子输运共振峰和负微分电导, 表明这些异质结中能够引入可调谐的射频振荡电流, 可应用于高频器件. Özçelik 等[18] 模拟了横向和等比重复的石墨烯/BN 多异质结复合结构的电子输运特性, 证明这种纳米结构具有明显的共振隧穿效应. Chowdhury[19] 利用 ATLAS SILVACO 微电子器件模拟软件设计了一种基于纳米氮化镓 (GaN) 的高电子迁移率共振隧穿晶体管, 证明 GaN 基共振隧穿晶体管的峰谷比 (PVR) 可以达到 2.66.

本文采用结合 NEGF 的第一原理计算方法, 通过连接石墨烯纳米带与石墨炔纳米带, 对石墨烯-石墨炔-石墨烯异质结纳米带的电子结构和电子输运特性进行计算, 探讨作为共振隧穿晶体管通道的可行性, 为实验研究提供理论依据, 对于设计和制造碳基超快纳米晶体管具有重要意义.

2 理论计算方法

石墨炔的二维原子平面结构由两种基本单元 (星形和网状结构) 构成, 因而石墨炔纳米带也具有两种宽度最小的基本结构, 本文选取这两种最基本的星形和网状纳米带 (图 1) 作为研究对象. 按照基于自旋密度泛函理论 (SDFT) 的全电子相对论数值轨道第一原理方法, 使用 Materials studio 8.0 软件包的 Dmol3 程序计算石墨炔纳米带的能量和电子结构[20], 通过第一原理计算能量泛函最小化的几何优化来计算原子结构, 并结合 NEGF 计算电子透射谱 (量子电导谱)、电流-电压曲线和电子电势及电荷密度分布[21,22]. 构建虚拟三维周期模型, 在非纳米带方向上设置 30 Å的真空层, 使电子波函数不发生交叠, 从而模拟一维纳米带和双极器件. 使用 Materials studio 软件包的 Materials Visualizer 和 Transport Device Builder 工具构建石墨炔/石墨烯异质结纳米带电子输运双极器件. 根据化学成键理论 (碳原子 sp^2 和 sp 杂化) 将石墨烯纳米片层边缘和石墨炔尖端覆盖氢原子以使碳原子不饱和键钝化. 基于狄拉克相对论量子力学方程组的 SDFT, 对不同自旋的电子采用不同本征态波函数, 计算自旋-轨道相互作用和自旋极化[23]. 几何优化采用 Smart 迭代方案进行能量泛函最小化, 使能量、原子作用力和位移分别小于 0.02 kcal/mol, 0.1 kcal/mol/Å和 0.001 Å. 电子输运计算需要构建双极器件, 包括电极和中心区域两部分, 将石墨炔纳米带作为中心区域两端连接石墨烯纳米带半无限电极构建双极器件, 石墨烯纳米带电极排列分别沿着石墨烯 [110] 晶向 (扶手椅型) 和 [100] 晶向 (锯齿型). 为了模拟纳米晶体管, 在石墨炔/石墨烯纳米带异质结双极器件的平面垂直方向上接合二氧化硅介电层 (厚度约为 1 nm), 并在介电层表面上构建铝半无限电极来施加栅极电压. 计算采用的具体方法和参数设置列于表 1 中, 自洽场 (SCF) 容忍度和布里渊区积分 $\boldsymbol{k}$ 点取样的取值保证了足够高的计算精度.

使用 Dmol3 程序中最新开发的量子冲击电导从头计算功能, 结合 DFT 和 NEGF 的方法计算电子输运特性. 将系统分为左电极 (L)、中心散射区 (C) 和右电极 (R) 三个部分, 通过迭代求解 NEGF 和 DFT 方程得到 L-C-R 标准双极器件的平衡电导. 假设两端电极只与散射区域耦合而不相互耦合, 则格林函数的方程表示为

表 1 使用 Dmol3 程序的计算方法和参数设置

Table 1. Scheme and parameter setting up in calculationswith Dmol3 program.

电子态描述及求解方法	计算方案	参数设置
交换相关泛函	GGA	PBEsol[24]
电子与原子实相互作用(core treatment)	全电子相对论(all electron relativistic)	
数值基组	双数值极化(DNP)	
轨道截至(orbital cutoff)	Global	5.0 Å
	容忍度	1×10^{-6} Ha/原子 (1 Ha = 27.2 eV)
SCF	多极展开	八极
	密度混合	电荷和自旋混合幅度分别为0.2和0.5
	轨道占据热拖尾(smearing)[25]	0.001 Ha
布里渊区积分$\boldsymbol{k}$点取样(电子结构)	Monkhorst-Pack格点[26]	$1\times1\times25$
计算范德瓦耳斯相互作用	DFT交换-相关泛函色散校正[27]	
布里渊区积分$\boldsymbol{k}$点取样(电子输运)	均匀间隔格点	间隔0.02/Å
	器件侧面缓冲长度	7.5 Å
	泊松网格最大格点间距	0.5 Å
泊松求解法和泊松边界条件(电子输运)	电极界面边界条件	Dirichlet
	非电极界面边界条件	Neumann
	电极边界区缓冲长度	3 Å

$$\begin{bmatrix} ES_{\rm LL}-\boldsymbol{H}_{\rm LL} & E\boldsymbol{S}_{\rm LC}-\boldsymbol{H}_{\rm LC} & 0 \\ ES_{\rm CL}-\boldsymbol{H}_{\rm CL} & E\boldsymbol{S}_{\rm CC}-\boldsymbol{H}_{\rm CC} & E\boldsymbol{S}_{\rm CR}-\boldsymbol{H}_{\rm CR} \\ 0 & E\boldsymbol{S}_{\rm RC}-\boldsymbol{H}_{\rm RC} & E\boldsymbol{S}_{\rm RR}-\boldsymbol{H}_{\rm RR} \end{bmatrix}\times\begin{bmatrix} g_{\rm LL} & g_{\rm LC} & g_{\rm LR} \\ g_{\rm CL} & g_{\rm CC} & g_{\rm CR} \\ g_{\rm RL} & g_{\rm RC} & g_{\rm RR} \end{bmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 分别是哈密顿矩阵和重叠矩阵, 用来计算中心散射区的格林函数 $g_{\rm CC}$, 并通过定义耦合矩阵来计算系统冲击过程中电子透射率和平衡电导:

$$G(E)=\frac{2e^2}{h}T(\Theta_{\rm l}g^{\rm r}\Theta_{\rm r}g^{\rm a}), \tag{2}$$

其中 $g^{\rm r}$ 和 $g^{\rm a}$ 分别表示中心散射区的延迟和超前格林函数, $\Theta_{\rm l}$ 和 $\Theta_{\rm r}$ 分别为左右两端电极的耦合函数, T 代表电子透射率, $G(E)$ 表示平衡量子电导, e 和 h 分别是电子电量和普朗克常数. 结合 DFT 和 NEGF 的方法以自洽的形式描述整个双端开放系统 (包括双电极半无限区域和器件散射中心) 的电子交换-相关作用, 通过自能项计算无限电极的作用, 并用格林函数描述有效述散射区域的非平衡电子分布. 如果没有外部偏置, 电子的输运特性可由公式 (1) 和 (2) 描述; 当外部偏压作用在电极上时, 只会引起特征值的刚性偏移. 一维系统中电子电导可以看作是一个传递问题, 电流由格林函数通过 Landauer Buttiker 公式得到[28]:

$$I(V)=\frac{e}{h}\int_{-\infty}^{+\infty}\{T(E,V)[f_{\rm L}(E,V)-f_{\rm R}(E,V)]\}{\rm d}E, \tag{3}$$

其中 $f_{\rm L}(E,V)$ 和 $f_{\rm R}(E,V)$ 分别表示偏压 V 作用下左右两端电极的费米-狄拉克能量分布函数.

3 结果与讨论

首先对两种典型的石墨烯纳米带——星形石墨炔 (SGDY) 和网状石墨炔 (NGDY) 纳米带进行第一原理能量泛函几何优化和电子结构计算, 再构建双极器件 (如图 1 所示) 用以计算量子输运特性. 由于石墨炔/石墨烯界面存在晶格失配, 因此几何优化以后在石墨炔/石墨烯异质结纳米带界面处的石墨炔碳原子环向纳米带中心偏转变形, 异质结界面处的石墨炔和石墨烯纳米带分别产生压应变和拉伸应变. 由于该应变主要是碳原子之间的成键角度发生轻微的变化, 所以应变产生的应力很小, 异质结构较为稳定. 在构建的双极器件中, SGDY 和 NGDY 纳米带沟道的尺寸 (长 × 宽) 分别为 (28.6 Å × 8.9 Å) 和 (34.2 Å × 16.1 Å). 采用基于全电子数值轨道基组方法的 Dmol3 程序进行电子结构计算, 得到 SGDY 和 NGDY 纳米带的电子能带结构如图 2 所示 (以费米能级设为能量参考点).

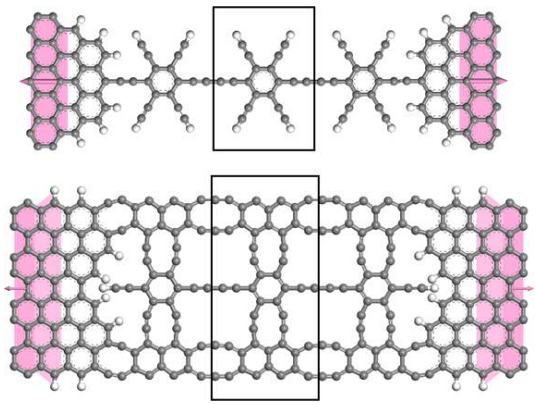

图 1 SGDY (上图) 和 NGDY (下图) 纳米带两端连接石墨烯纳米带半无限电极 (源极和漏极粉色区域) 构建的双极器件模型, 石墨炔尖端和石墨烯边缘碳原子由氢原子钝化, 黑色框架表示周期性单胞

Fig. 1. Schematic bipolar device models constructed with the SGDY (above panel) or NGDY (below panel) as center scattering region and the graphene nanoribbons as semi-infinite electrodes (source and drain in pink areas). The apex and edge carbon atoms are passivated by hydrogen atoms, and black frames indicate periodic unit cells.

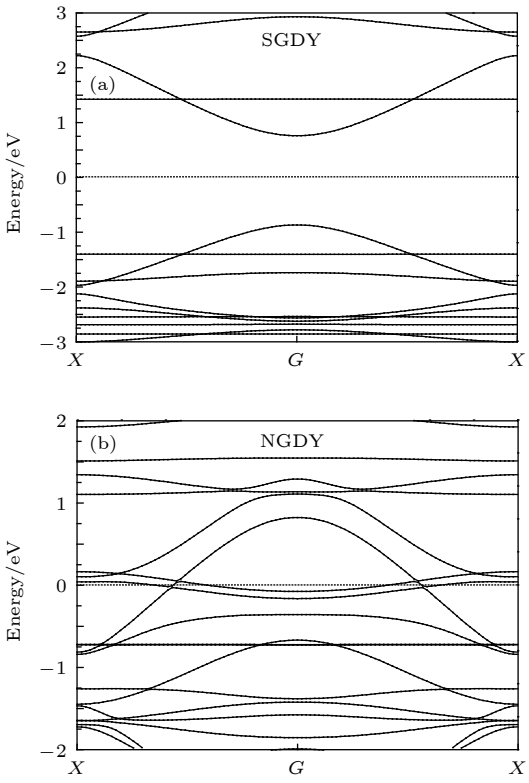

图 2 SGDY (a) 和 NGDY (b) 纳米带的电子能带结构, 以费米能级 (水平虚线) 为能量参考零点

Fig. 2. Electronic energy band structure of SGDY (a) and NGDY (b) nanoribbons with Fermi energy level as reference energy zero (horizontal dashed line).

两种结果均未呈现电子能量的自旋分裂, SGDY 纳米带的能带带隙为 1.63 eV, 在布里渊区 G 点呈现半导体直接带隙; 而 NGDY 纳米带不存在能带带隙, 呈现金属能带特征.

为了研究所构建晶体管的电输运特性, 采用双探针方法构建双极器件, 将石墨炔纳米带作为中心散射区域与两端石墨烯纳米带半无限电极相连, 用于施加偏置电压, 并在纳米带平面垂直方向构建用于施加栅极 U_g 的栅电极 (如图 3 所示), 计算不同 U_g 下的电子透射谱和电流-偏置电压 (I-U_b) 曲线. 图 4(a) 为 SGDY 和 NGDY 纳米带在 0—2 V 偏置电压范围内的 I-V 特性曲线 (栅极电压为零). 施加 U_b 在 1.5 V(阈值电压) 以下, 电流几乎为零; 当 U_b 超过阈值电压以后, 源极费米能级升高至与石墨炔纳米带沟道区的量子化能级相同, 形成电子共振隧穿, 电流以指数形式迅速增大. 虽然 SGDY 纳米带的电子能带存在带隙, 但其宽度较小, 电子在中心区输运过程仍然会发生较小的散射, 因此 SGDY 纳米带的电流略大于 NGDY 纳米带的电流. 在栅极电压 $U_g = 4$ V 时, SGDY 和 NGDY 纳米带晶体管的漏极电流随偏置电压的变化如图 4(b) 所示. 由于两个石墨烯电极之间载流子的共振隧穿, 在 $U_b = 0.7$ V 处出现一个强峰, 随后出现一个负微分电导区 (NDC). 当施加的偏置电压足以使中心散射区石墨炔量子阱内未占据量子态的能量

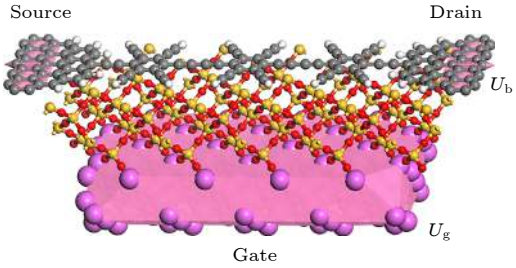

图 3 在 SGDY/石墨烯异质结纳米带双极器件的垂直方向施加栅极电压构建的晶体管电子输运计算模型, 粉色区域表示电极, 灰色、白色、红色、黄色和粉色小球分别代表碳、氢、氧、硅和铝原子

Fig. 3. Electron transport calculation in transistor model of bipolar devices with the SGDY/graphene nanoribbons heterostructure as the center scattering region and semi-infinite electrodes (source and drain) respectively under the gate voltage in vertical direction. The pink areas indicate electrodes, and the gray, white, red, yellow and pink spheres represent carbon, hydrogen, oxygen, silicon and aluminium atoms respectively.

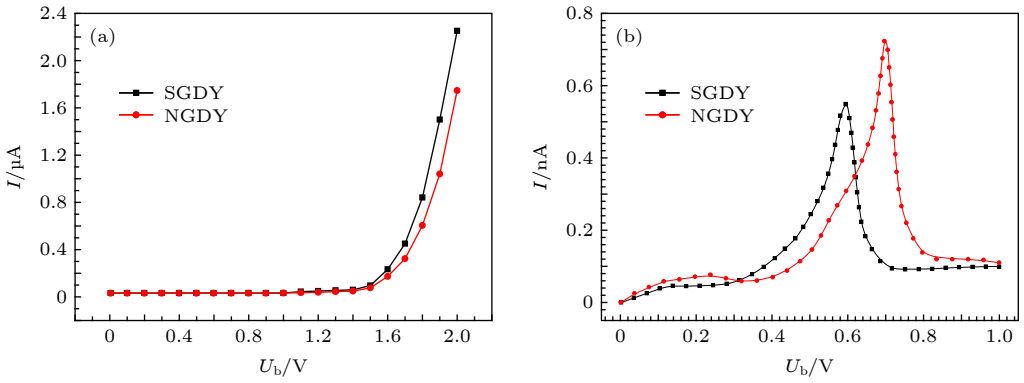

图 4 SGDY 和 NGDY 纳米带晶体管的漏极电流随偏置电压的变化 (a) $U_g = 0$ V; (b) $U_g = 4$ V

Fig. 4. Drain current of SGDY and NGDY nanoribbon transistors varying with bias voltage under (a) $U_g = 0$ V and (b) $U_g = 4$ V.

降低至石墨烯源极导带能量范围时, 量子阱处于谐振态, 所以电子可以穿过石墨炔沟道输运至石墨烯 NGDY 纳米晶体管的漏极, 否则电流几乎为零, 即纳米晶体管就失去了共振效应.

当偏置和栅极电压为零时, 两个石墨烯电极的化学势位于狄拉克点, 具有相同的能量. 通过增加偏置电压, 电子和空穴分别在负极和正极中积累, 从而产生电场, 使狄拉克点错位. 如果 $U_g \neq 0$, 可以调节 U_b 使两个电极的狄拉克点对齐. 因此在两个电极化学势之间能量区间的全部载流子在 *I*-*V* 曲线上形成一个强峰. 栅极电压 $U_g = 4$ V 时, SGDY 晶体管在偏置电压 0—1.0 V 范围内的电子透射谱如图 5 所示. 将偏置电压从 0 增加到 0.6 V, 源极费米能级与石墨炔纳米带沟道的量子化能级相同, 形成电子共振隧穿, 在偏置窗口 (−eV/2, +eV/2) 出现明显的电子输运峰 (如图 5 中两条垂直虚线所示区域), 因此由偏置窗口中透射函数积分确定的电流也随之增大. 将偏置电压从 0.6 V 增加到 0.65 V 时, 源极费米能级与石墨炔纳米带的量子化能级发生偏离, 共振隧穿转变为普通的电子隧穿, 导致偏置窗口内的电子透射谱峰消失, 因此电流突然减小, 表现为明显的 NDC, 使 SGDY 晶体管的 PVR 达到了 4.5. PVR 是指共振隧穿过程中电流最大值与最小值的比值, PVR 越高电子寿命也越长, 而且可以通过电子寿命设定适当的工作频率. 相比之下, NGDY 晶体管在偏置电压超过 0.7 V 以后呈现出更显著的 NDC, PVR 达到了 6.0. 通过与最近文献报道的不同材料纳米带晶体管 PVR 进行比较 (如表 2 所列), 表明 SGDY 和 NGDY 纳米带的 PVR 值优于氮化硼 (BN) 和氮化镓 (GaN), 因此可作为共振隧穿晶体管的纳米沟道.

类似的磷化硼 (BP)/碳化硅 (SiC) 纳米带双

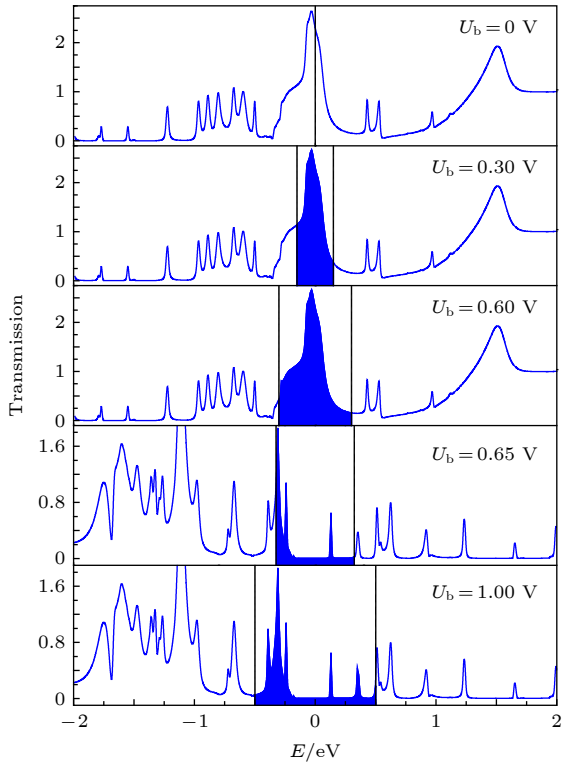

图 5 SGDY 纳米带晶体管在偏置电压 0—1.0 V 范围内的电子透射谱 (栅极电压 $U_g = 4$ V)

Fig. 5. Electron transmission spectra of SGDY nanoribbon transistors in the bias voltage range of 0–1.0 V under gate voltage $U_g = 4$ V.

异质结共振隧穿晶体管的沟道 (BP 纳米带) 长度直接影响共振隧穿条件及 NDC 特性, 沟道长度减小使共振隧穿电流峰值显著增高, 但 NDC 的 PVR 基本不发生变化 [29]. 图 2 给出的能带结构表明 SGDY 纳米带的导带底电子有效质量明显小于 NGDY 费米能级附近的电子有效质量. 由此可以判断: SGDY 纳米带共振隧穿晶体管的电子散射主要发生在源极或漏极 (石墨烯纳米带) 与沟道 (中心散射区的石墨炔纳米带) 的异质结界面附近 (隧

表 2 不同纳米带晶体管在不同栅极电压下的 PVR

Table 2. PVR for nanoribbon transistors fabricated with different materials under different gate voltage.

纳米带散射区	电极	研究方法	栅极电压 /V	PVR	数据来源
SGDY, NGDY	石墨烯	第一原理计算	5	4.5, 6.0	本文
BN	石墨烯	理论计算和实验	0, 20	1—4	Ref. [16]
BN	石墨烯	理论计算和实验	–40, 0, 40	—	Ref. [17]
GaN-Al-GaN	GaN	理论计算(Matlab)	–1, –2, –3	2.66	Ref. [19]

穿势垒区), 所以沟道长度对器件发生共振隧穿时的 I-U_b 曲线特征影响很小; 而电子在 NGDY 纳米带共振隧穿晶体管的沟道中也会发生明显的散射, 所以减小 NGDY 纳米带长度将导致共振隧穿电流明显增大. 此外, 由于双异质结器件中间石墨炔纳米带的量子化能级随其长度的增加而下降, 所以产生共振隧穿所需要的栅极电压将随共振隧穿晶体管沟道长度的增加而降低.

4 结 论

共振隧穿晶体管因其降低电路复杂性的能力而受到广泛关注, 在超高速和超高频应用领域是一个非常有前途的候选器件. 本文通过理论计算证明: SGDY 和 NGDY 纳米带晶体管中可以发生共振隧穿量子效应; 共振条件局限在狭窄偏置电压范围内, 使 I-U_b 特性出现谐振峰, 从而产生强负微分电导. SGDY 和 NGDY 纳米晶体管具有负微分电导和高峰谷电流比 (PVR 为 4.5 和 6.0), 可有效的应用于量子传输纳米电子器件.

参考文献

[1] Pi S, Lin P, Xia Q 2016 *Nanotechnology* **27** 464004

[2] Lawrence T C, Vashishtha V, Shifren L, Gujja A, Sinha S, Cline B, Ramamurthy C, Yeric G 2016 *Microelect. J.* **53** 105

[3] Guo Y G, Wang F Q, Wang Q 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 073503

[4] Punniyakoti S, Sivakumarasamy R, Vaurette F, Joseph P, Nishiguchi K, Fujiwara A, Clement N 2017 *Adv. Mater. Interf.* **4** 1601155

[5] Murugesan A 2014 *Int. J. Innovative Sci. Eng. Tech.* **1** 264

[6] Akbar F, Kolahduz M, Larimian S, Radamson H H 2015 *J. Mater. Sci. Mater. Elect.* **26** 4347

[7] Park J S, Choi H J 2015 *Phys. Rev. B* **92** 045402

[8] Mihnev M T, Wang F, Liu G, Rothwell S, Cohen P I, Feldman L C, Conrad E H, Norris T B 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 173107

[9] Li G, Li Y, Liu H, Guo Y, Li Y, Zhu D 2010 *Chem. Commun.* **46** 3256

[10] Cranford S W, Buehler M J 2011 *Carbon* **49** 4111

[11] Kang J, Li J, Wu F, Li S S, Xia J B 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 20466

[12] Long M, Tang L, Wang D, Li Y, Shuai Z 2011 *ACS Nano* **5** 2593

[13] Zhou J, Lü K, Wang Q, Chen X S, Sun Q, Jena P 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 174701

[14] Capasso F, Kiehl R A 1985 *J. Appl. Phys.* **58** 1366

[15] Teong H, Lam K T, Khalid S B, Liang G 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 084317

[16] Britnell L, Gorbachev R V, Geim A K, Ponomarenko L A, Mishchenko A, Greenaway M T, Fromhold T M, Novoselov K S, Eaves L 2013 *Nat. Commun.* **4** 1794

[17] Mishchenko A, Tu J S, Cao Y, Gorbachev R V, Wallbank J R, Greenaway M T, Morozov V E, Morozov S V, Zhu M J, Wong S L, Withers F, Woods C R, Kim Y J, Watanabe K, Taniguchi T, Vdovin E E, Makarovsky O, Fromhold T M, FaI'ko V I, Geim A K, Eaves L, Novoselov K S 2014 *Nat. Nanotech.* **9** 808

[18] Özçelik V O, Durgun E, Ciraci S 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 13248

[19] Chowdhury S, Chattaraj S, Biswas D 2015 *J. Semicond.* **36** 044001

[20] Allis D G, Prokhorova D, Korter T M 2006 *J. Phys. Chem. A* **110** 1951

[21] Niehaus T A, Rohlfing M, Della Sala F, Di Carlo A, Frauenheim T 2005 *Phys. Rev. A* **71** 022508

[22] Pecchia A, Penazzi G, Salvucci L, Di Carlo A 2008 *New J. Phys.* **10** 065022

[23] Chantis A N, Christensen N E, Svane A, Cardona M 2010 *Phys. Rev. B* **81** 205205

[24] Perdew J P, Ruzsinszky A, Csonka G I, Vydrov O A, Scuseria G E, Constantin L A, Zhou X L, Burke K 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 136406

[25] Weinert M, Davenport J W 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13709

[26] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188

[27] Tkatchenko A, Scheffler M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 073005

[28] Ghanbari Shohany B, RoknabadiM R, Kompany A 2016 *Commun. Theor. Phys.* **65** 99

[29] Dong J, Li H, Li L 2013 *NPG Asia Mater.* **5** e56

First-principles study of graphyne/graphene heterostructure resonant tunneling nano-transistors*

Wang Tian-Hui [1)] Li Ang [1)] Han Bai [2)†]

1) (*School of Disciplinary Basics and Applied Statistics, Zhuhai College of Jilin University, Zhuhai* 519041, *China*)

2) (*Key Laboratory of Engineering Dielectrics and Its Application, Ministry of Education, Heilongjiang Provincial Key Laboratory of Dielectric Engineering, School of Electrical and Electronic Engineering, Harbin University of Science and Technology, Harbin* 150080, *China*)

(Received 1 June 2019; revised manuscript received 10 July 2019)

Abstract

Resonant tunneling transistors have received wide attention because of their ability to reduce the complexity of circuits, and promise to be an efficient candidate in ultra-high speed and ultra-high frequency applications. The chemical compatibility between graphene and graphdiyne implies that they can be combined into various configurations to fulfill ultra-high frequency nanotransistor. In the present paper, two novel resonant tunneling transistors based on graphene/graphdiyne/graphene double-heterojunction are theoretically developed to model two new kinds of bipolar devices with two representative graphdiyne nanoribbons. The electronic structures of two pristine graphdiyne nanoribbons are investigated by performing the first-principles calculations with all-electron relativistic numerical-orbit scheme as implemented in Dmol3 code. The electronic transport properties including quantum conductance (transmission spectrum) and electrical current varying with bias-voltage for each of the designed graphdiyne nanoribbon transistors are calculated in combination with non-equilibrium Green function formalism. The calculated electronic transmission and current-voltage characteristics of these transistors demonstrate that the current is dominantly determined by resonant tunneling transition and can be effectively controlled by gate electric field thereby representing the favorable negative-differential-conductivity, which is the qualified attribute of ultra-high frequency nanotransistor. It follows from the I-$U_{\rm b}$ variations explained by electronic transmission spectra that quantum resonance tunneling can occur in the proposed star-like graphdiyne (SGDY) and net-like graphdiyne (NGDY) nanoribbon transistors, with the resonance condition limited to a narrow bias-voltage range, leading to a characteristic resonant peak in I-$U_{\rm b}$ curve, which means the strong negative differential conductivity. Under a gate voltage of 4 V, when the bias-voltage rises up to 0.6 V (0.7 V), the Fermi level of source electrode aligns identically to the quantized level of SGDY (NGDY) nanoribbon channel, causing electron resonance tunneling as illustrated by the considerable transmission peak in bias window; once the source Fermi level deviates from the quantized level of SGDY (NGDY) channels at higher bias-voltage, the resonance tunneling transforms into ordinary electron tunneling, which results in the disappearing of the substantial transmission peak in bias window and the rapid declining of current. The designed SGDY and NGDY nanotransistors will achieve high-level negative differential conductivity with the peak-to-valley current ratio approaching to 4.5 and 6.0 respectively, which can be expected to be applied to quantum transmission nanoelectronic devices.

Keywords: graphene, graphdiyne, nanoribbon heterostructure, resonant tunneling transistor

PACS: 71.15.Mb, 73.21.Cd, 73.21.Hb, 71.70.Fk **DOI:** 10.7498/aps.68.20190859

* Projects supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51607048) and the Young Innovative Talent Training Program of Heilongjiang Province Undergraduate Colleges and Universities, China (Grant No. UNPYSCT-2016049).

† Corresponding author. E-mail: bak_han@sina.com