

非金属原子掺杂扶手椅型砷烯纳米管的磁电子性质及调控*

韩佳凝[†] 黄俊铭 曹胜果 李占海 张振华[‡]

(长沙理工大学, 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114)

(2023年4月20日收到; 2023年7月25日收到修改稿)

诱发非磁材料磁性并灵活调控其磁电子性质对于研发高性能磁器件非常重要. 基于密度泛函理论 (DFT), 系统研究了非金属原子 X ($X = \text{B}, \text{N}, \text{P}, \text{Si}, \text{Se}, \text{Te}$) 取代性掺杂扶手椅型砷烯纳米管 AsANT 的结构稳定性、磁电子性质、载流子迁移率以及应变对杂质管磁电子性质的调控效应. 计算的结合能和形成能证明了杂质管 AsANT- X 的结构稳定性, 可能在实验中实现. 杂质管电子结构的计算表明 AsANT- X ($X = \text{B}, \text{N}, \text{P}$) 为无磁半导体, 而 AsANT- X ($X = \text{Si}, \text{Se}, \text{Te}$) 表现为双极化磁性半导体, 磁性源于杂质原子与 As 之间未配对电子的出现. 此外, 掺杂可以灵活调控 AsANT 的载流子迁移率到一个较宽的范围, 并且呈现明显的载流子极性和自旋极性. 特别是, 应变可以导致 AsANT-Si 在双极化磁性半导体、半-半导体、磁金属和无磁金属之间的多磁相变过渡, 这种在无磁态和高磁化态之间的转换可用于设计由应变控制的自旋极化运输的机械开关. 本研究为砷烯的应用提供了新途径.

关键词: 扶手椅型砷烯纳米管, 非金属原子掺杂, 磁电子性质, 载流子迁移率, 应变效应**PACS:** 71.15.-m, 73.20.At, 73.63.-b, 73.22.-f**DOI:** 10.7498/aps.72.20230644

1 引言

近年来, 2D 材料因其在纳米电子器件中的潜在应用引起了研究人员的广泛关注. 自 2014 年 Han 等^[1] 利用机械剥离的方法成功制备磷烯后, 第 V 主族元素的单层结构以其独特的物理性质逐渐进入人们的视野. 2015 年, Zhang 等^[2-5] 首次在理论上预测了砷烯 ($\beta\text{-As}$) 的存在^[2], 基于密度泛函理论的计算结果表明, 单层砷烯具有可调带隙、高载流子迁移率和良好的可见光/紫外光吸收能力. 此外, 通过改变层数、层堆叠方式、层间距和施加上层内应变等方法也可以对砷烯的能带结构进行调控^[6]. 然而, 这些研究还都停留在理论层面. 直

到 2016 年 Tsai 等^[7] 用等离子辅助工艺, 以 InAs 为衬底, 成功合成多层灰砷纳米带. 次年, Gusmao 等^[8] 利用水性剪切剥离的方法获得了砷烯纳米片. 由于独特且优异的特性, 研究者预期砷烯在纳米电子器件和光电探测器等领域有着广阔的应用前景.

磁性材料在自旋电子器件的应用中起着重要作用, 然而绝大多数 2D 材料本征无磁, 为实现其在磁器件方面的应用, 对 2D 材料诱导磁性是非常必要的. 目前已有一些关于砷烯如何诱导磁性以及相关磁电子特性的研究, 诱导磁性方法主要包括: 掺杂^[9-14]、吸附^[15-18]、空位缺陷^[19,20] 及构造异质结^[21,22] 等. 值得一提的是, 掺杂一直被认为是在无磁材料中诱导磁性的重要手段. 例如: 过渡金属原子 Ti, V, Cr, Ni, Mn 和 Fe^[9-13] 及非金属元素 Ga

* 国家自然科学基金 (批准号: 61771076) 和湖南省研究生创新项目 (批准号: CX20200820) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: HanJN@stu.csust.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn

和 Ge^[14] 掺杂均可以在 2D 砷烯中诱导磁性. 此外, 研究表明机械应变是对材料的电子及磁特性进行调控的有效手段^[2,3,20,23,24]. 例如实验研究证明应变对石墨烯的力-电性质具有很好的调控作用^[23,24]. 理论研究表明通过施加双轴拉伸应变可以实现砷烯间接带隙到直接带隙的转变^[2,3], 这在开发机械传感器和光电器件方面具有重要的应用. 施加应变也可以有效调节 h-As 的能带结构^[20], 该研究拓展了砷烯基电子器件的应用范围.

然而, 据知目前对砷基材料的电子特性和磁性的研究基本限于 2D 结构. 因此, 非常有必要进一步探索 1D 砷烯结构的电子及磁电子性质. 迄今, 纳米管作为最重要的二维材料衍生物已经被广泛研究. 例如, 研究表明碳纳米管的电子结构 (金属性或半导体性) 可由纳米管的直径和手性决定^[25]. 而 BN 纳米管表现出较稳定的宽带隙半导体性质, 且其电子性质几乎与直径和手性无关^[26,27]. 对扶手椅型黑磷纳米管的研究发现, 其载流子迁移率在管径较小时为 $10^2 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 随着管径的增大, 其迁移率将会逐渐接近 2D 黑磷单层的值^[28,29]. 显然, 纳米管具有独特的性质, 砷烯纳米管的电子及磁电子特性具有重要的研究价值.

本文系统研究了非金属元素掺杂扶手椅型砷烯纳米管 AsANT- X ($X = \text{B}, \text{N}, \text{P}, \text{Si}, \text{Se}, \text{Te}$) 的结构稳定性, 磁电子性质, 载流子迁移率及应变对杂质管的调控效应. 计算结果表明, AsANT- X 具有良好的结构稳定性, X 原子可灵活调控砷烯纳米管的带隙和磁相. 此外, 杂质管的迁移率被调控到了一个比较大的范围, 且表现出明显的载流子极性和自旋极性. 特别是, 应变可以导致 AsANT-Si 在双极化磁性半导体、半-半导体、磁金属和无磁金属之间的多磁相变过渡, 这种在无磁态和高磁化态之间的转换可用于设计由应变控制的自旋极化运输的机械开关. 本文研究为砷烯应用提供了更多的新途径.

2 计算方法

本文模型的结构优化, 稳定性评估及磁电子特性的计算均通过基于密度泛函理论 (DFT) 的 Atomistix ToolKit (ATK) 软件包来实现^[30]. 该软件包已广泛应用于纳米材料的研究中^[14,31–35]. 为了求解 Kohn-Sham 方程, 交换关联函数采用

Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 函数形式的广义梯度近似 (GGA), 并使用 Troullier-Martins 模守恒赝势来表征原子实和价电子的相互作用, 同时采用原子轨道的线性组合展开电子价态. 考虑原子的静电极化效应, 所有电子波函数的展开均采用双 zeta 加极化 (DZP) 的基函数组. 在布里渊区的 x , y 和 z 方向上, k 点采样选为 $1 \times 1 \times 100$ 个点, 其中 z 轴是 1D 纳米管的周期方向. 截断能被设置为 150 Ry. 对于研究的所有结构, 为了消除模型与其“图像”之间的相互作用, 除了纳米管周期性重复的 z 轴方向外, 另外两个方向上的真空层均设置大于 15 Å. 所有与特性有关的计算都在几何结构优化之后进行, 直到每个原子上的所有应力小于 $0.01 \text{ eV}/\text{Å}$. 为简单起见, 系统的费米能级设置为零. 此外, 采用形变势理论计算载流子迁移率^[36]. 并对系统的输运性质进行分析^[37–39]. 相关参数设置与电子结构计算的设置相同.

3 结果与讨论

3.1 模型结构及其稳定性

砷烯 (单层) 是具有六方晶体结构的 2D 无磁半导体材料, 理论研究表明, 它有黑磷相 $Pmna$ (α -As)、蓝磷相 $P3m1$ (β -As), $Pnm2_1$ (γ -As) 和 $Pmc2_1$ (δ -As)^[3,40] 四种同素异形体, 具有更高稳定性的 β -As 烯已经被广泛的研究. 本征 β -As 烯的主视图和边视图如图 1(a) 所示, 其优化后的晶格常数约为 3.601 Å, 相邻 As 原子之间的键长 $d_{\text{As}} \approx 2.514 \text{ Å}$, β -As 单层的厚度 $d_{\text{L}} \approx 1.432 \text{ Å}$, 这与以前研究报道的晶格常数 3.61 Å, $d_{\text{As}} \approx 2.51 \text{ Å}$ 及 $d_{\text{L}} \approx 1.40 \text{ Å}$ ^[41] 吻合较好. 本工作研究功能化 β -As 单层的衍生物-扶手椅型砷烯纳米管 (AsANT), 它是由纳米带卷曲形成的. 众所周知, 单壁砷烯纳米管 (AsNT) 可以通过手性向量 $\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ 进行描述, 对应的手性指数为 (m, n) , 其中 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 为单胞基矢^[14,29], 与手性指数的 $(m, 0)$ 和 $(0, n)$ 两个方向相对应的纳米管分别称为扶手椅型砷烯纳米管 (AsANT) 和锯齿椅型砷烯纳米管 (AsZNT). 本文选择 $(10, 0)$ AsANT 为代表进行研究, 对应 \mathbf{a}_1 方向为 10 个原胞长度的纳米带绕水平轴卷曲而成的扶手椅型砷烯纳米管, 其顶视图和边视图如图 1(b) 所示. 计算的该本征管的能带结构如图 1(c) 所示, 显然, 它为无磁半导体, 带隙 $\text{BG} = 1.68 \text{ eV}$.

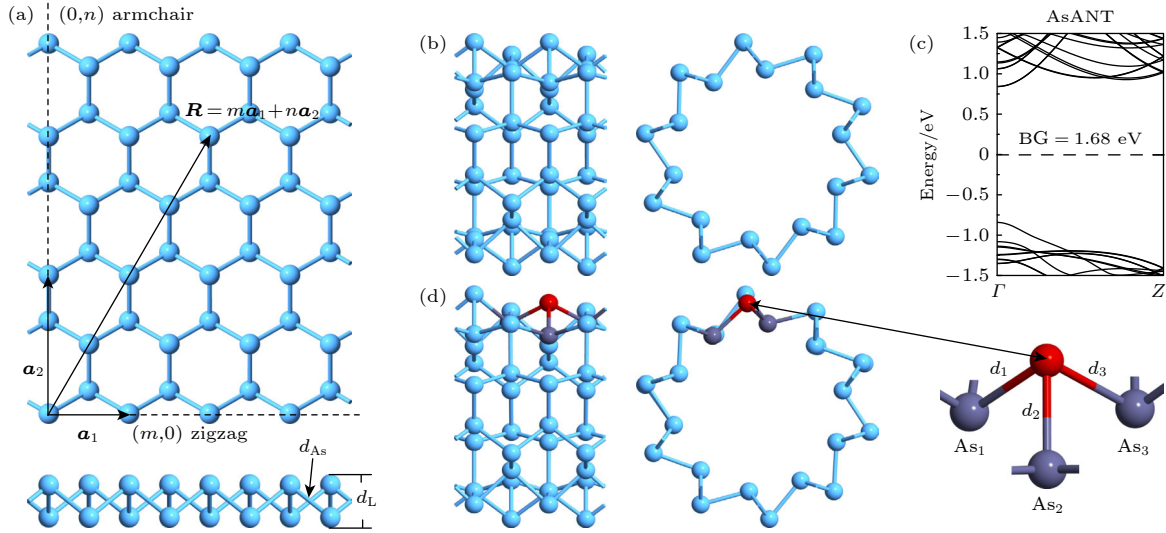


图 1 β -As 的几何结构 (a) 2D 砷烯的主视图和边视图; (b) 本征单壁扶手椅型砷烯纳米管结构的顶视图和边视图; (c) 本征砷纳米管的能带结构; (d) 非金属原子 (B, N, P, Si, Se, Te) 取代性掺杂后单壁扶手椅型砷烯纳米管的顶视图和边视图和掺杂部分的局部放大图. As_1 , As_2 和 As_3 为与杂质原子相连的 3 个内层 As 原子, d_1 , d_2 和 d_3 为杂质原子和 As_1 , As_2 , As_3 相连的键长

Fig. 1. Geometry structure of β -As: (a) Top and side views of 2D bucked arsenene; (b) top and side views of an arsenic armchair nanotube; (c) band structure of an intrinsic arsenic armchair nanotube; (d) top, side views of hybridized arsenene armchair nanotube substitutionally doped with non-metallic atoms (B, N, P, Si, Se, Te) in outermost atom layer and partial enlarged details. As_1 , As_2 and As_3 are three inner-layer arsenene atoms bonded to non-metallic atom, and d_1 , d_2 and d_3 are the bonds length between non-metallic atom and As_1 , As_2 , As_3 respectively.

为了在纳米管中诱导磁性, 考虑利用非金属原子 X ($X = B, N, P, Si, Se, Te$) 掺杂砷烯纳米管, 并用 $AsANT-X$ ($X = B, N, Si, P, Se, Te$) 表征杂质管, 考虑到实验操作的简便性, 仅模拟对纳米管最外层原子进行取代性掺杂, 杂质管的顶视图、边视图及掺杂部分的局部放大图见图 1(d). 考虑纳米管结构的完整性、稳定性及计算难度, 在每两个单胞构成的超胞中取代性掺杂一个非金属原子, 最近邻的两个杂质原子之间的距离为 $\sim 7.30 \text{ \AA}$. 优化后的 $AsANT-X$ 模型表明: X 掺杂对 $AsANT$ 结构完整性的影响很小. As_1 , As_2 和 As_3 分别为与 X 原子相连的内层原子. 实验上, 这种掺杂可通过类似石墨烯掺杂的方法来实现, 即先利用高能原子/离子扫描透射显微镜的电子束轰击产生空位^[42,43], 然后将合适的 X 原子吸附到这些空位中形成杂质管.

$AsANT-X$ 优化后可以清楚地观察到 X 原子附近的局部形变, 在杂质管 $AsANT-X$ ($X = B, N, P, Si, Se$) 中, 杂质原子均向纳米管内部移动, 而 $AsANT-Te$ 中的杂质原子向管径外部移动, 这可能是由于 Te 原子拥有比 As 原子更大的原子半径, 值得注意的是所有杂质原子的位移都很小. 为了解杂质管相对孤立原子的能量稳定性, 计算了杂质管的结合能 E_b , 其定义为

$$E_b = (E_{AsANT-X} - n_X E_X - n_{As} E_{As}) / (n_{As} + n_X),$$

其中, $E_{AsANT-X}$ 为杂质管的总能量, E_X 为孤立杂质原子的能量, E_{As} 为孤立 As 原子的能量, n_X 与 n_{As} 分别为杂质原子与 As 原子的数量. 根据结合能的定义, 负的结合能意味着更稳定的结构. 如表 1 所列, 计算的杂质管 $AsANT-B$, $AsANT-N$, $AsANT-P$, $AsANT-Si$, $AsANT-Se$ 和 $AsANT-Te$ 的结合能分别为 -5.248 , -5.279 , -5.256 , -5.210 , -5.167 和 -5.170 eV/原子 . 也就是在 -5.279 — -5.167 eV/原子 范围内, 其绝对值是一个相当大的值, 这表明杂质管相对孤立原子是能量稳定的. 为了进一步评估杂质管相对本征管的能量稳定性, 计算了杂质管的形成能 E_f , 其定义为

$$E_f = \frac{E_{AsANT-X} + n_{As} E_{As} - E_{AsANT} - n_X E_X}{n_{As} + n_X},$$

其中, E_{AsANT} 为本征管的总能量. 计算结果表明: $AsANT-B$, $AsANT-N$, $AsANT-P$ 的形成能分别为 -0.004 , -0.035 和 -0.012 eV/原子 , 即形成能为负值, 这表明非金属原子 $X = B, N, P$ 掺杂 $AsANT$ 是一个放热反应, 相比本征管, 其杂质管拥有稍高的能量稳定性. 而 $AsANT-Si$, $AsANT-Se$ 和 $AsANT-Te$ 的形成能分别为 0.032 , 0.075 和 0.074 eV/原子 , 即形成能为正值. 这表明非金属原子 $X = Si$,

表 1 AsANT- X 的结合能 E_b , 形成能 E_f , 键长 d_1 , d_2 和 d_3 及磁相. BMSC 和 NMS 分别表示双极化磁性、无磁半导体
 Table 1. Binding energy E_b , formation energy E_f , and bond lengths d_1 , d_2 and d_3 , and magnetic phases of AsANT- X . BMSC and NMS indicate bipolar magnetic semiconductor and non-magnetic semiconductor, respectively.

结构	E_b /(eV/原子)	E_f /(eV/原子)	$d_1, d_2, d_3/\text{\AA}$	类型
AsANT-B	-5.248	-0.004	2.055, 2.046, 2.055	NMS
AsANT-N	-5.279	-0.035	2.043, 2.043, 2.043	NMS
AsANT-P	-5.256	-0.012	2.421, 2.419, 2.422	NMS
AsANT-Si	-5.210	0.032	2.413, 2.424, 2.412	BMSC
AsANT-Se	-5.167	0.075	2.785, 2.503, 2.784	BMSC
AsANT-Te	-5.170	0.074	2.857, 2.638, 2.855	BMSC

Se, Te 掺杂 AsANT 的过程为吸热过程, 但是吸收的热量非常少, 这说明相比本征管, 其杂质管能量稳定性稍微降低, 但能量上还是非常稳定的. 结合能和形成能的计算结果都表明 AsANT-N 在能量上是稳定的.

此外, 表 1 还列出了各杂质管中杂质原子与其相邻的 As 原子之间的键长 d_i ($i = 1, 2, 3$). 显然, d_i 值密切相关于杂质原子的类型, 即不同类型的杂质原子与本征管之间发生不同的相互作用. Se—As 和 Te—As 的键长略长于 2D 砷烯单层中 As—As 键长 2.51\AA ^[41], 而其他 X —As 的键长则略小于 $d_{\text{As—As}}$, 这种结果可能是由以下两个原因造成的: 1) 相比其他 X 原子, Se 和 Te 原子拥有更大的原子半径, 由于 Te 原子半径略大于 Se 原子, Te—As 的键长略长于 Se—As 的键长; 2) 不同类型的 X 原子与其相邻的 As 原子之间存在不同的轨道杂化, 这种差异也是造成 X -As 不同的重要原因. 在 AsANT- X ($X = \text{B, P, Se, Te}$) 中, d_1 与 d_3 均大于 d_2 , 这是由于在卷曲成管的过程中, d_1 与 d_3 处于略微拉伸的状态. 此外, 由于 As_1 与 As_3 原子位置等同, 但不等同于 As_2 , 所以一般情况下 d_1 与 d_3 几乎完全相同, 但与 d_2 存在差异.

为检验杂质管的热稳定性, 对杂质管进行淬火的分子动力学模拟. 在一个淬火循环中, 设置其初始温度为 300 K, 最高温度为 500 K, 温度步长为 10, 动态步长为 1 fs. 淬火总时间为 8 ps. 其中, AsANT- X ($X = \text{B, P, Si, Te}$) 淬火前、后结构如图 2 所示. 与淬火前的结构 (左侧图) 相比, 淬火后 (右侧图) X 原子与其相邻的 As 原子均发生了较小的不规则位移, X 原子从原始位置向管径外侧有一个很小的移动, 但未发生重构现象. 这表明杂质管的热稳定性非常高.

3.2 磁电子性质

如上所述, 考虑在每 2 个单胞组成的超胞中取代性掺杂一个非金属原子. 为了解杂质管的磁分布, 首先计算各杂质管的自旋极化密度 $\Delta\rho = \rho_\alpha - \rho_\beta$, 其中, ρ_α 和 ρ_β 分别为 α -spin (红色) 和 β -spin (蓝色) 的自旋密度, 计算结果如图 3 所示. 显然, $X = \text{B, N, P}$ 原子掺杂不能诱导磁性. 有趣的是, Si, Se, Te 原子掺杂能诱导明显的磁性, 对应的磁矩列于表 2 中, 可以看出 AsANT-Si, AsANT-Se 和 AsANT-Te 的总磁矩分别为 1.000, 0.994 和 $0.777 \mu_B$ /超胞, 且杂质管一半左右的磁矩都分布在杂质原子上, Si, Se 和 Te 原子的磁矩分别为 $0.502\mu_B$, $0.368\mu_B$ 和 $0.310\mu_B$. 由于 As_1 和 As_3 处于等同的位置, 其磁矩也非常接近. As_2 磁矩的值和方向与杂质原子的类型密切相关. 怎样理解磁性来源? 对于本征砷烯或砷烯纳米管, 每 1 个 As 原子与邻近的 3 个 As 原子连接, 而 As 原子外层 4p 轨道上有 3 个电子, 恰与邻近 As 原子的 3 个 4p 电子配对, 自旋方向相反, 导致整个砷烯或纳米管无磁. 而 Si, Se, Te 原子掺杂导致外层电子配对情况发生变化, 例如, Si 原子外层 3p 轨道只有 2 个电子, 这样 Si 原子与周围 3 个 As 原子成键后, 会出现一个未配对的 p 电子, 从而产生磁性. Se 及 Te 原子分别有 4 个 4p 和 5p 电子, 当与周围 3 个 As 原子成键后, 也会出现一个未配对的 p 电子, 导致磁性. 总之, Si, Se, Te 原子掺杂诱发的是 p 电子磁性, 这个磁矩应该是 $1 \mu_B$ /超胞, 与上文计算结果基本相符. 不完全吻合的原因是由于掺杂元素 X 与 As 原子的电负性不同导致电荷转移, 这种电荷转移也可能导致电子自旋重排的发生^[44,45]. 当然, 晶体场效应造成的 X 原子轨道中电子占据态的变化也可能改变原子的磁性^[46]. 同时, 由于电子转移, 磁性 p 电子不会局限在一个原子上, 而是在一个较

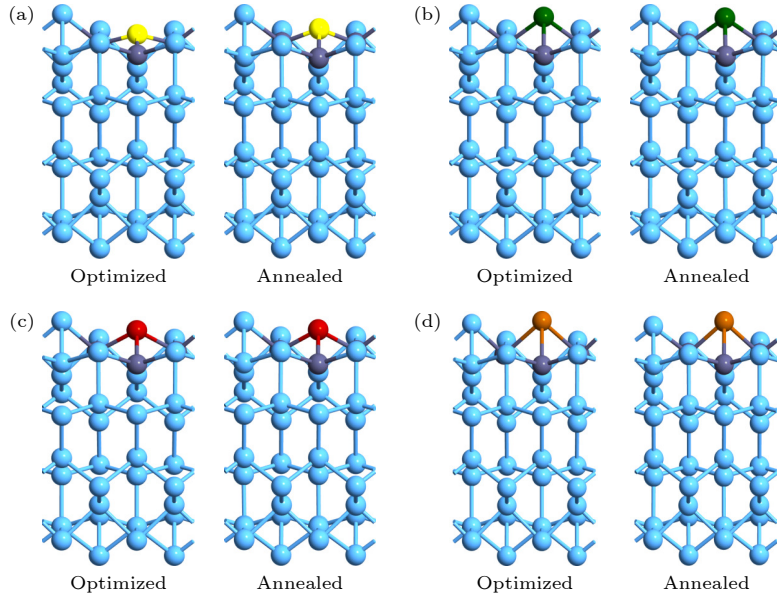


图 2 500 K/8 ps 下, 淬火前后纳米管结构图 (其中每个超胞由 2 个原胞组成) (a) AsANT-B; (b) AsANT-P; (c) AsANT-Si; (d) AsANT-Te

Fig. 2. Structure comparison of nanotube after and before annealing by 500 K with 8 ps (Among them, each supercell consists of two units): (a) AsANT-B; (b) AsANT-P; (c) AsANT-Si; (d) AsANT-Te.

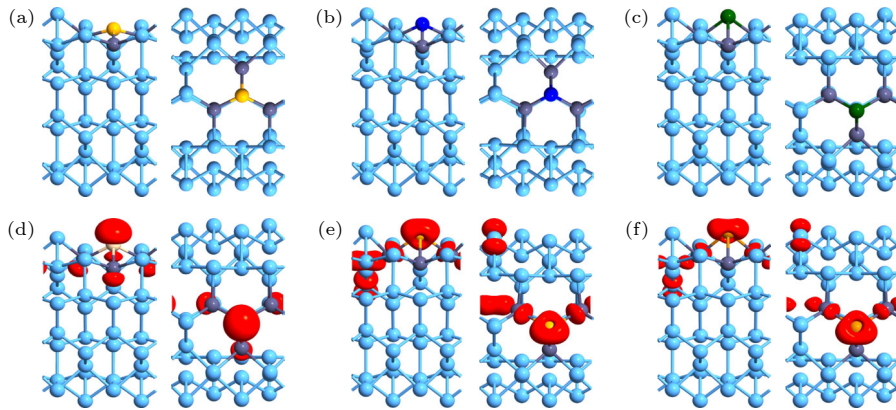


图 3 等值面为 $0.02 \text{ eV}/\text{\AA}^3$ 时, 纳米管在 FM 状态下计算的自旋极化密度 (磁空间分布) (a) AsANT-B; (b) AsANT-N; (c) AsANT-P; (d) AsANT-Si; (e) AsANT-Se; (f) AsANT-Te

Fig. 3. Calculated spin polarized density (magnetic spatial distribution) for nanotube in FM state, where the isosurface is set to $0.02 \text{ eV}/\text{\AA}^3$: (a) AsANT-B; (b) AsANT-N; (c) AsANT-P; (d) AsANT-Si; (e) AsANT-Se; (f) AsANT-Te.

大的区域, 如图 3 所示. 而对于掺杂原子 N 和 P, 它们与 As 处于相同族, 外层 p 轨道都是 3 个电子, 当 N 或 P 原子与邻近 3 个砷原子连接时, p 电子完全配对, 与砷烯中情况一样, 没有磁性. 而对于掺杂原子 B, 最外层也是 3 个电子 (2 个 s 电子和 1 个 p 电子), 当 B 原子与邻近 3 个砷原子成键时, 没有不配对的电子, 所以无磁性.

众所周知, 磁稳定性是评估一种铁磁材料是否能投入实际应用的重要指标, 磁化能 E_M 和磁交换能 E_{ex} 是常见的量度磁稳定性的物理量, 分别定义为 $E_M = E_{\text{NM}} - E_{\text{FM}}$ 和 $E_{\text{ex}} = E_{\text{AFM}} - E_{\text{FM}}$. 其中,

E_{NM} , E_{FM} 与 E_{AFM} 分别为杂质管在无磁态 (NM)、铁磁态 (FM) 和反铁磁态 (AFM) 的能量, 计算结果列于表 2. AsANT-Si, AsANT-Se 和 AsANT-Te 的磁化能分别为 51.48, 56.40 和 1.93 meV/超胞, 磁交换能分别为 20.92, 44.99 和 1.89 meV/超胞. 所以杂质管的能量基态是铁磁态.

如上所述, 本征管为无磁性半导体, 直接带隙为 1.68 eV, 如图 1(c) 所示, 这个带隙略大于 2D 砷烯的带隙 1.49 eV^[18,41]. 这是由于 2D 砷烯卷曲成 1D 纳米管, 引入一维量子限域效应和小应变. 本文计算的各杂质管的能带结构、态密度及投影态

表 2 AsANT- X ($X = \text{Si}, \text{Se}$ 和 Te) 的磁矩 M , 磁化能 E_M , 磁交换能 E_{ex} 及磁相
 Table 2. Magnetic moment M , the magnetized energy E_M , the magnetic exchange energy E_{ex} and the magnetic phase for AsANT- X ($X = \text{Si}, \text{Se}$ and Te).

Structure	AsANT-Si	AsANT-Se	AsANT-Te
X	0.502	0.368	0.310
As_1	0.108	0.177	0.128
M/μ_B	As_2 0.104	-0.006	0.003
	As_3 0.108	0.174	0.126
Total	1.000	0.994	0.777
E_M/meV	51.48	56.40	1.93
E_{ex}/meV	20.92	56.40	1.89
磁相	BMSC	BMSC	BMSC

密度如图 4 所示, 其中投影态密度投影在杂质原子上. 掺杂后, 杂质管保持半导体性不变, 但因 X 原子的类型不同, 杂质管的带隙与磁相出现了显著的差异. B, N 及 P 原子掺杂的纳米管能带是自旋简并的, 即未表现出磁性, 与图 3(a)—(c) 一致, 其带隙分别为 0.77, 1.25 及 1.67 eV, 如图 4(a)—(c) 所示. 这表明 X 原子掺杂可灵活调节砷烯纳米管的带隙. 相比本征管, 掺杂后纳米管的带隙均有不同程度的减小, 这是由杂质原子与 As 原子之间的轨

道杂化改变和电子转移造成的, 电子的转移使纳米管中的静电势能改变, 进而导致能带结构的变化, 尤其是杂质管 AsANT-B 最为明显. 掺杂杂质原子减小纳米管带隙, 也许对于研发宽带检测功能的红外光-电探测器具有潜在应用. 更有趣的是, Si, Se 和 Te 原子掺杂的杂质管能带结构是高度自旋极化的, 即表现出明显磁性, 与图 3(d)—(f) 一致, 且均为双极化磁性半导体 (BMSC), 如图 4(d)—(f) 所示. 由于 X 原子和 As 原子之间的轨道杂化, 可以看到明显的子带劈裂和费米能级附近新子带的出现, 这使得杂质管的带隙明显减小. Si, Se 和 Te 掺杂后杂质管的 α -spin (β -spin) 带隙分别为 0.57 (1.14), 1.17 (0.41) 和 1.07 (0.32) eV. 这种自旋极化的特征使得 AsANT- X ($X = \text{Si}, \text{Se}, \text{Te}$) 对于研发自旋过滤与检测的磁器件方面具有潜在应用.

图 4 还列出了各杂质管的态密度及投影态密度图. 由此可以看出, 杂质原子 X 对费米能级附近的能带有重要贡献, 且 X 的 PDOS 和纳米管的 DOS 峰值几乎彼此严格对齐, 这表明 X 原子与 AsANT 纳米管之间发生了强的轨道杂化, 即 X 杂质原子与 AsANT 纳米管紧密结合所构成的杂质管结构非常稳定, 这已被计算的结合能、形成能以及淬火

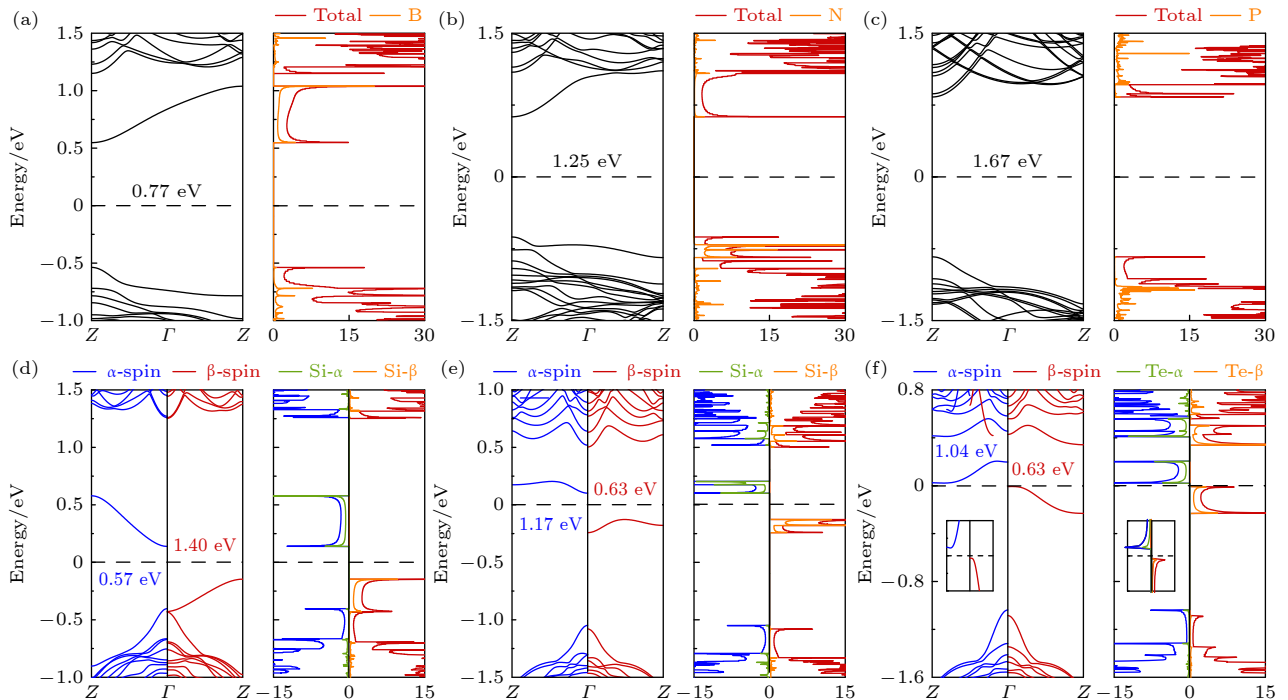


图 4 纳米管的能带、态密度及投影态密度图, 其中投影态密度投影在杂质原子上 (a) AsANT-B; (b) AsANT-N; (c) AsANT-P; (d) AsANT-Si; (e) AsANT-Se; (f) AsANT-Te

Fig. 4. Band structure and the DOS/PDOS for nanotube, and the orbital PDOS is projected on the impurity atom: (a) AsANT-B; (b) AsANT-N; (c) AsANT-P; (d) AsANT-Si; (e) AsANT-Se; (f) AsANT-Te.

模拟所证实. 同时观察磁性杂质管的态密度可以发现, 无论是 X 原子的 PDOS 还是杂质管的 DOS, 他们的 α -spin 和 β -spin 都高度非对称, 特别在费米能级附近, 这意味着杂质管是完全自旋极化, 即 Si, Se 及 Te 原子掺杂能使 AsANT 纳米管导出明显的磁性.

3.3 有效质量和载流子迁移率

众所周知, 载流子的有效质量及迁移率是表征杂质管磁电子性质和磁输运性质的重要物理量. 一维系统的载流子有效质量可以根据准自由电子模型进行估算, 定义为: $m^* = \hbar^2(\partial^2 E(k)/\partial k^2)^{-1}$, 其中, $E(k)$ 为能量, k 为波矢量. 由图 4 的能带结构可以发现, 杂质管在费米能级附近的带边态与杂质原子的种类密切相关, 这说明不同的杂质原子对应不同的载流子有效质量. 我们计算的本征管与各杂质管中载流子的有效质量如图 5(a) 所示, 为简洁起见, 本征管标记为 “As”. 经计算, 本征管中电子和空穴的有效质量分别为 $0.125m_e$ 和 $0.153m_e$, m_e 为一个静电子的质量. 无磁杂质管电子的有效质量与

本征管相差不大, 而 Si, Se 和 Te 杂质管中 β -spin 的电子有效质量远高于本征管, 分别为 $1.276m_e$, $1.594m_e$ 和 $2.552m_e$. 对于空穴的有效质量, 除了 Si 掺杂的杂质管中 α -spin 的有效质量 ($0.025m_e$) 远小于本征管之外, 其他均高于本征管, 尤其是 AsANT-Te, 其 α -spin 和 β -spin 空穴的有效质量更是分别达到了 $1.300m_e$ 和 $2.886m_e$, 这对应于能带边缘附近较弱的色散关系. 这是容易理解的, X 原子掺杂使纳米管产生局部形变, 会导致晶体与载流子之间相互作用的增强, 从而增大其有效质量. 与之相反, 也存在掺杂后有效质量变小的情况, 如 AsANT-N 中电子的有效质量, AsANT-Si 中 α -spin 对应的电子和空穴的有效质量及 AsANT-Se 和 AsANT-Te 中 α -spin 对应的电子有效质量, 它们对应于能带边缘更强的色散关系.

对于纳米材料在纳米电子器件中的应用, 拥有合适的带隙和高的载流子迁移率非常重要. 本工作利用基于形变势理论的声子散射模型计算载流子迁移率^[36]. 在这个模型中, 声子散射被认为是影响载流子输运的主要机制, 特别是纵向声波是影

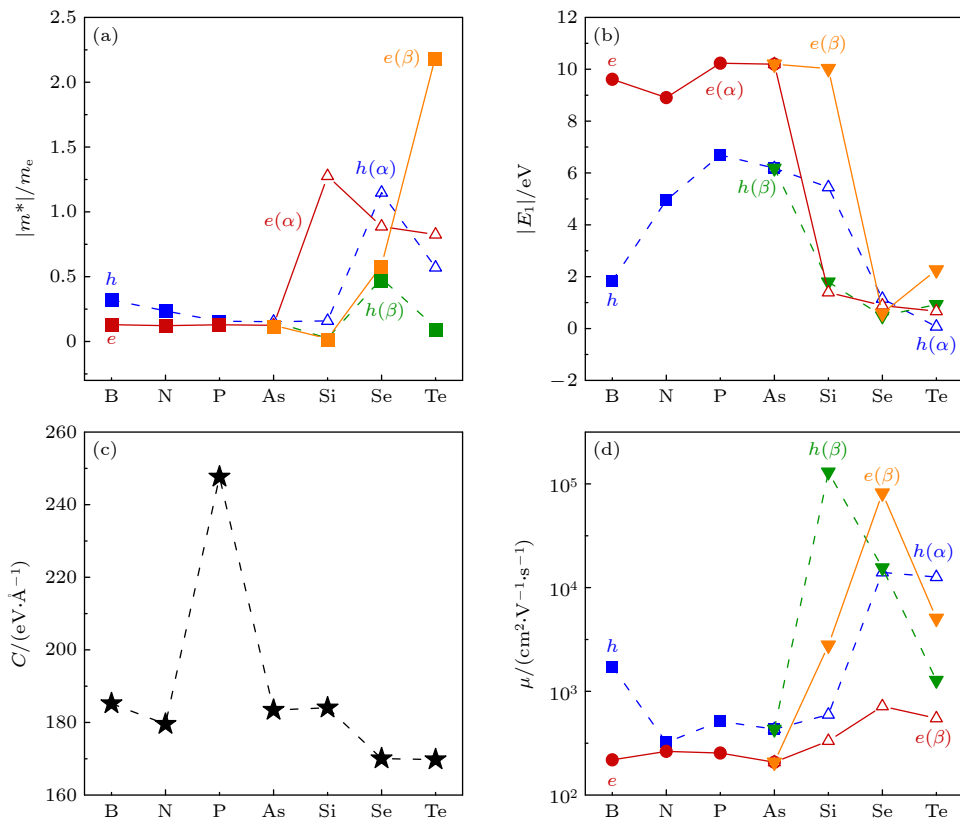


图 5 AsANTs- X 沿输运方向电子和空穴的特性 (a) 有效质量 m^* ; (b) 形变势常数 $|E_1|$; (c) 拉伸模量 C ; (d) 载流子迁移率 μ
 Fig. 5. Peculiarity for electron and hole along the transport direction for AsANTs- X : (a) Effective mass m^* ; (b) deformation potential constant $|E_1|$; (c) stretching modulus C ; (d) carrier mobility μ .

响载流子迁移率的最重要的因素^[47]. 对此, 首先计算纳米管轴向形变势常数 $|E_1|$ 和拉伸模量 C . $E_1 = \partial E_{\text{edge}}/\partial \delta$, $\varepsilon = (L-L_0)/L_0$, L 和 L_0 分别为应变后和应变前杂质管的晶格常数, E_{edge} 为导带底或价带顶沿传输方向的能量. 拉伸模量 C 表征杂质管抵抗应变的刚度, $C = (\partial^2 E_{\text{total}}/\partial \varepsilon^2)/L_0$, 其中 E_{total} 为超胞的总能量. 计算结果如图 5(b) 和图 5(c) 所示, $|E_1|$ 和 C 对杂质原子的类型非常敏感. 除 AsANT-P 的形变势常数 $|E_1|$ 的值略大于本征管之外, 其他杂质管的 $|E_1|$ 都比本征管小, 尤其是磁性管, 无论是其电子还是空穴, 有些 $|E_1|$ 值远小于本征管, 这意味着它们的能量在被声子散射后发生较大的变化. 而杂质管的拉伸模量 C 在 170.032—247.641 eV/Å 内, 只有 AsANT-P 的拉伸模量远高于本征管, 达到 247.641 eV/Å.

基于上面数据, 计算各杂质管的载流子迁移率. 一维半导体系统的载流子迁移率可通过 $\mu_{1D} = e\hbar^2 C / [(2\pi k_B T)^{1/2} |m^*|^{3/2} E_1^2]$ ^[47] 进行计算, 其中 e 为电子电荷, \hbar 为约化普朗克常数, k_B 为玻尔兹曼常数, ε 为单轴应变, T 为温度, 取 $T = 300$ K. 计算各杂质管 AsANT- X 的载流子迁移率如图 5(d) 所示. 作为比较, 也计算了本征管 AsANT 的载流子迁移率. 结果表明, 本征管电子和空穴的迁移率都在 10^2 cm²/(V·s) 的数量级, 这基本上与 MoS₂^[48] 和 Ti₂CO₂^[49] 纳米带的值相当, 且不存在载流子极性. 而对于杂质管的载流子迁移率, 可归纳出以下结论: 1) X 原子掺杂将 AsANT 的载流子迁移率调节到一个很宽的范围, 电子迁移率范围为 10^2 — 10^4 cm²/(V·s), 其差值为 2 个数量级. 空穴的迁移率范围为 10^2 — 10^5 cm²/(V·s), 相差 3 个数量级, 且取决于 X 原子的类型. 2) 相比本征管, 磁性杂质管的载流子迁移率在大多数情况下增大, 尤其是 AsANT-Si 的 α -spin 的空穴迁移率更是达到了 10^5 cm²/(V·s) 的数量级. AsANT-Se 的 α -spin 的电子和空穴迁移率, β -spin 的空穴迁移率及 AsANT-Te 的 β -spin 的空穴迁移率也都达到了 10^4 cm²/(V·s) 的数量级. 而无磁杂质管 AsANT- X ($X = B, N, P$) 的载流子迁移率与本征管相差不大. 有趣的是, 与未掺杂的情况相比, 杂质管的电子迁移率通常都有很大的提升, 除 AsANT-N 外, 空穴迁移率也有不同程度的增大. 3) X 原子掺杂增强了 AsANT 的载流子极性. AsANT-Si 的 α -spin, AsANT-Se 和 AsANT-Te 的 β -spin 的电子和空穴的载流子迁移

率均相差 2 个数量级, 表现出明显的载流子极性. 4) 杂质管出现了明显的迁移率自旋极性, 例如 AsANT-Si 的空穴, 其 α -spin 和 β -spin 的迁移率相差 3 个数量级. 杂质管迁移率的载流子极性 (或自旋极性) 表明不同载流子 (或同一载流子的不同自旋态) 之间的电荷输运能力不同, 这可以应用在光催化中分离不同的载流子 (或在自旋过滤器件中分离不同的自旋). 总而言之, 这些发现证明 X 原子掺杂可以灵活调节 AsANT 的载流子迁移率, 包括其大小、载流子极性及自旋极性.

3.4 应变效应

众所周知, 施加应变是调节纳米材料磁电子性质以扩展其应用的常用方法之一. 以 AsANT-Si 为例研究杂质管磁电子特性的应变效应. 应变的方向设为管的轴向, 如图 6(a) 所示. 应变的定义如上所述, 正值表示拉伸应变, 负值表示压缩应变. 计算的 AsANT-Si 在不同应变下的能带结构如图 6(b) 所示, 显然, 轴向应变的施加灵活调节了杂质管的磁电子特性. 可以清楚看到杂质管不同的磁性相变. 未施加应变时杂质管为双极化磁性半导体 (在自旋极化的能带结构中, 离费米能级最近的导带底 (CBM) 和价带顶 (VBM) 来源于不同方向的自旋态), 并在应变 $\varepsilon \geq -2\%$ 时保持该磁相. 增大压缩应变至 $\varepsilon = -3\%$ 时, 杂质管变为半-半导体 (在自旋极化的能带结构中, 离费米能级最近的导带底 (CBM) 和价带顶 (VBM) 来源于同一方向的自旋态: α -spin 态). 继续增大压缩应变至 $\varepsilon \leq -4\%$ 时, 杂质管表现为磁金属. 随着压缩应变的进一步增大, 当 $\varepsilon \leq -6\%$ 时, 杂质管变为无磁金属并保持这种状态. 由此可见, 施加应变可以诱导杂质管实现双极化磁性半导体、半-半导体、磁金属、无磁金属之间的相变. 这种在无磁态和高磁化态之间的转换可用于设计由应变控制的自旋极化运输的机械开关.

为了评估应变过程中杂质管结构稳定性和磁稳定性, 计算杂质管在不同应变下的应变能和磁化能, 如图 6(c) 所示. 应变能定义为 $E_S = E_{S_0} - E_0$, 其中 E_{S_0} 和 E_0 分别为施加应变后、前 FM 基态下每个超胞的总能量. 显然, 应变能随应变的函数呈二次抛物线的形式, 这说明在所选择的应变范围内, 杂质管产生的形变为弹性形变, 即在 AsANT-Si 中, 由杂质管引起的管状形变是完全可逆的. 此

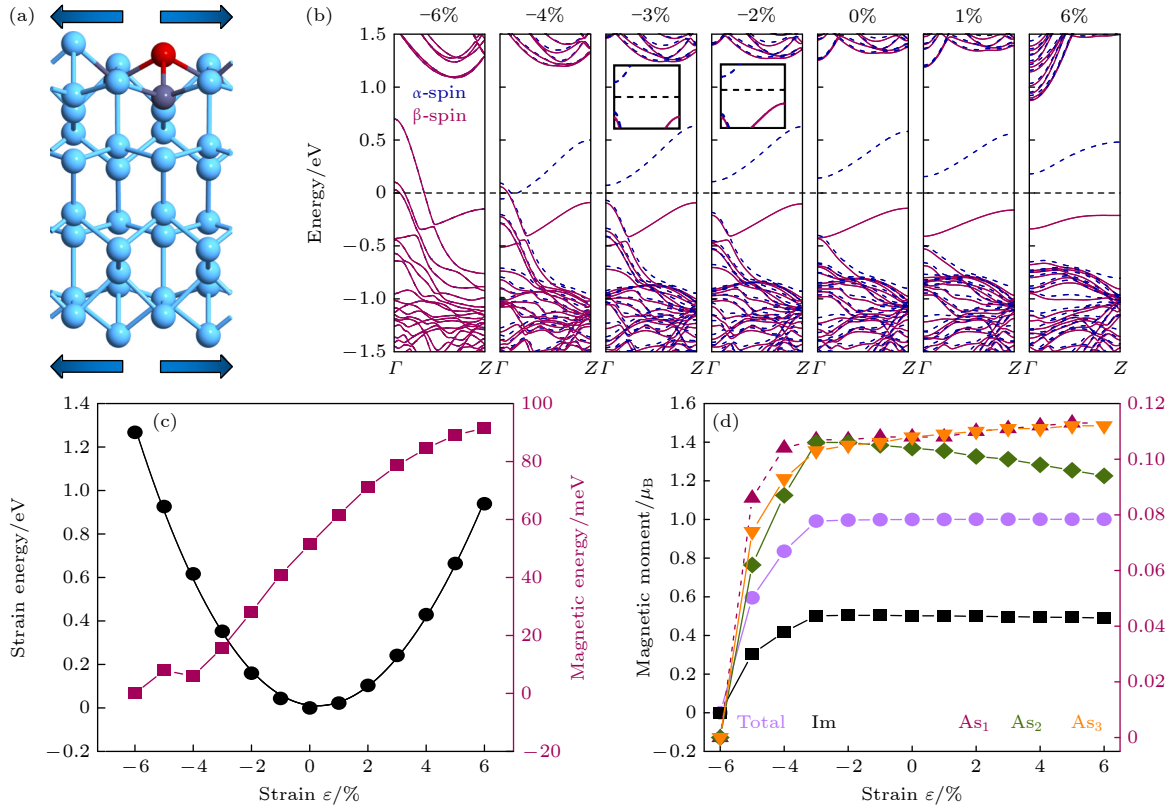


图6 应变调控效应 (a) 对 AsANT-Si 施加应力示意图; (b)—(d) 铁磁态下 AsANT-Si 的能带结构 (b), 应变能和磁化能 (c), 磁矩与应变 (d) 的关系

Fig. 6. Strain tuning effects: (a) Schematic for AsANT-Si applied by stretching strain; (b)—(d) band structures (b), strain energy and magnetic energy (c), and magnetic moment versus strain (d) for AsANT-Si in the FM state.

外, 在整个应变过程中, 杂质管的磁化能一直为正, 这说明杂质管保持 FM 基态性质不变. 并且, 杂质管的磁化能随压缩应变的增大呈减小的趋势, 直到 $\epsilon \leq -6\%$ 时杂质管磁性消失. 而在拉伸应变过程中, 磁化能一直增大, 磁稳定性增强. 杂质管每超胞的总磁矩, 杂质原子 Si 及与其相连的 As₁, As₂, As₃ 的磁矩如图 6(d) 所示. 可以发现, 在 $-6\% \leq \epsilon \leq -3\%$ 内, 杂质管的总磁矩和各原子的磁矩均随压缩应变的增大而显著减小, 直到 $\epsilon = -6\%$ 时, 杂质管的磁性消失. 而当 $\epsilon \geq -3\%$ 时, 杂质管的总磁矩随应变缓慢增大, 而杂质 Si 原子的磁矩略有减小, 但变化范围都非常小. As₁, As₂, As₃ 的磁矩变化趋势也发生了改变, 其中 As₁ 和 As₃ 的磁矩随应变增大, As₂ 的磁矩随应变减小, 这主要是由于 As₁ 和 As₃ 的位置等同, 而不同于 As₂ 造成的.

为了解 AsANT-Si 磁电子性质变化的内部机理, 利用 Mulliken 布居分析, 计算了杂质原子及与之相联的 As₁, As₂, As₃ 之间的电子转移, 以及连接杂质原子和 As 原子所对应的键长及相应夹角, 如图 7(a)—(c) 所示. 显然, 杂质原子的电子转移

量随压缩应变的增大而增大, 尤其是 $-6\% \leq \epsilon \leq -3\%$ 时, Si 和 As₁, As₂, As₃ 的电子转移量均显著增大, 而在拉伸过程中, Si 原子电子转移量随拉伸应变的增大而减小, 与之相反, As₁, As₂, As₃ 的电子转移量均增大, 但拉伸应变过程中电子转移量变化的范围远远小于压缩应变. 如前所述, 电荷转移能导致电子自旋重排的发生^[44,45], 从而改变纳米管磁性.

除电荷转移外, 应变过程中键长的变化会改变原子内部未配对电子状况^[50], 这也是影响材料磁性的重要原因. 即键长拉伸会增强材料的离子键特征, 导致原子中出现更多的未配对电子, 磁性增强. 反之, 键长压缩会增强共价键特征, 相应地减少未配对电子, 使磁性减弱. 由图 7(b) 和图 7(c) 可得到以下 4 个结论: 1) d_1 与 d_3 随压缩应变的增大先减小后增大, 随拉伸应变单调增大. 而 d_2 随压缩应变的增大单调增大, 随拉伸应变增大单调减小. 2) θ_1 和 θ_2 随压缩应变的增大先增大后减小, 随拉伸应变单调减小, θ_3 随压缩应变的增大单调减小, 随拉伸应变增强单调增加. 3) 无论是键长 d_i 还是夹角 θ_i 均在 $-6\% \leq \epsilon \leq -3\%$ 范围内产生了明显

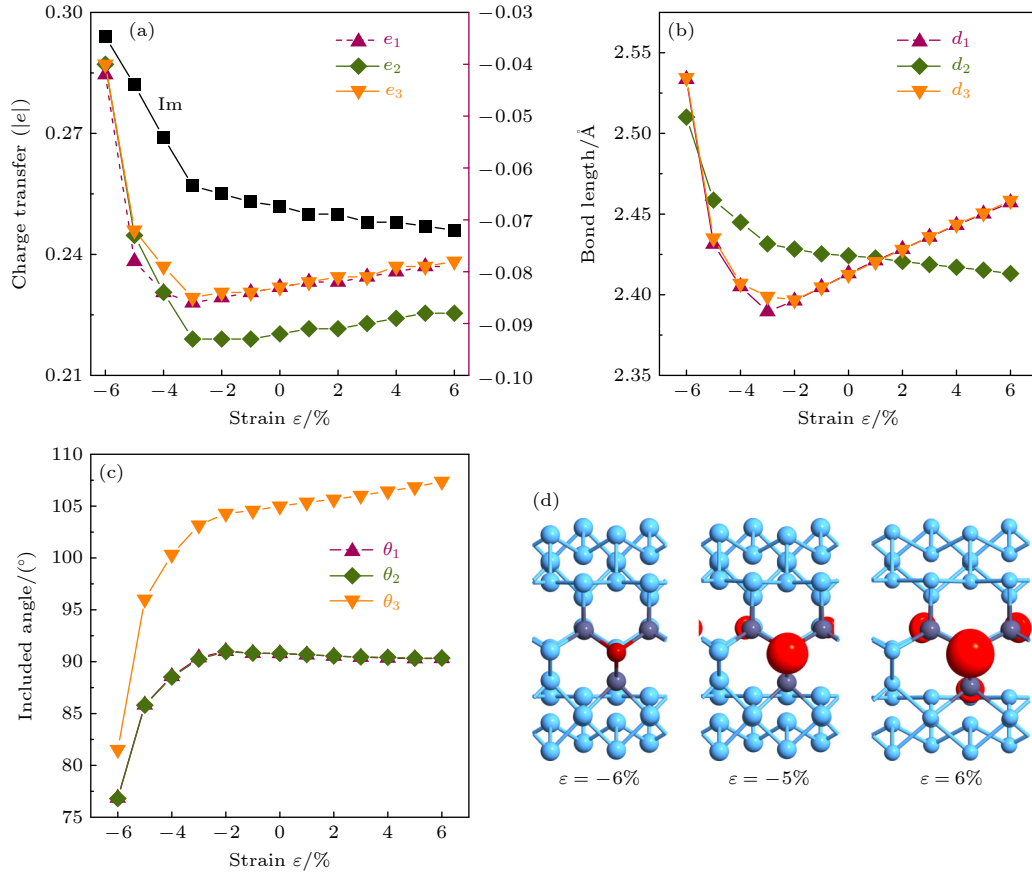


图 7 铁磁态下 AsANT-Si 不同因素随应变的变化, 其中 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ 分别为 d_1 与 d_2, d_2 与 d_3, d_1 与 d_3 之间的夹角, 等值面设置为 $0.02 \text{ eV}/\text{\AA}^3$ (a) 电荷转移; (b) 键长变化; (c) 键角变化; (d) 自旋极化电荷密度 (磁空间分布)

Fig. 7. Changes of AsANT-Si factors with strain in ferromagnetic state, where $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ are the angles between d_1 and d_2, d_2 and d_3, d_1 and d_3 , respectively, and the isosurface is set to $0.02 \text{ eV}/\text{\AA}^3$: (a) Charge transfer; (b) bond length; (c) change of bond angles; (d) spin polarized density (magnetic spatial distribution).

的变化, 而在 $-3\% \leq \epsilon \leq 6\%$ 的范围内变化甚微. 4) d_1 与 d_3 和 θ_1 与 θ_2 在整个应变过程中几乎相等, 这种差异是由于 As_1 和 As_3 位置等同而不同于 As_2 , 并且它们与前面所述的磁矩, 电子转移的趋势基本吻合. 最后, 计算了 $\epsilon = -6\%, -5\%, 6\%$ 时杂质管的自旋极化电荷密度, 可以发现当 $\epsilon = -6\%$ 时, 杂质管上没有磁性态分布, 与其无磁的状态吻合. $\epsilon = -5\%$ 和 6% 时的自旋极化电荷密度的计算结果表明杂质管的磁性主要分布在 Si 原子上, 少数分布在与其相连的 As 原子上, 且磁分布的区域与它们各自的磁矩值基本吻合.

4 总结

基于密度泛函理论, 系统研究了非金属元素 X ($X = B, N, P, Si, Se, Te$) 掺杂扶手椅型砷烯纳米管 AsANT 的结构稳定性、磁电子性质、载流子迁移率和应变调控效应. 计算的结合能、形成能及

Forcite 淬火的分子动力学模拟证实杂质管结构非常稳定. 电子结构计算表明 AsANT- X ($X = B, N, P$) 为无磁半导体, 在费米能级附近, 杂质原子的引入使纳米管带隙减小, 这对于研发宽带检测功能的红外光-电探测器等更具优势. 而 AsANT- X ($X = Si, Se, Te$) 表现为高度自旋极化的双极化磁性半导体, 可用以设计双极化自旋场效应过滤器件和自旋阀. 此外, 杂质原子可以调控砷烯纳米管载流子迁移率到一个较宽的范围, 并且可以观察到迁移率的载流子极性和自旋极性. 特别是, 应变可以引发 AsANT-Si 在双极化磁性半导体、半-半导体、磁金属及无磁金属之间的多磁相过渡, 这种在无磁态和高磁化态之间转换可用于设计应变控制的自旋极化运输的机械开关, 即通过施加应变以控制电子运输在有磁和无磁之间可逆的转换, 从而达到控制自旋极化运输的目的. 总之, 这项工作拓展了砷基电子器件到磁器件的应用.

参考文献

- [1] Han L, Neal A T, Zhen Z, Zhe L, Xu X, David T, Ye P D 2014 *ACS Nano* **8** 4033
- [2] Zhang S, Yan Z, Li Y, Chen Z, Zeng H 2015 *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **127** 3155
- [3] Kamal C, Ezawa M 2015 *Phys. Rev. B* **91** 085423
- [4] Kecik D, Durgun E, Ciraci S 2016 *Phys. Rev. B* **94** 205410
- [5] Zhang S L, Xie M Q, Li F Y, Yan Z, Li Y F, Kan E, Liu W, Chen Z F, Zeng H B 2016 *Angew. Chem. Int. Ed.* **55** 1666
- [6] Zhu Z, Guan J, Tomanek D 2015 *Phys. Rev. B* **91** 161404
- [7] Tsai H S, Wang S W, Hsiao C H, Chen C W, Ouyang H, Chueh Y L, Kuo H C, Liang J H 2016 *Chem. Mater.* **28** 425
- [8] Gusmao R, Sofer Z, Bousa D, Pumera M 2017 *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **56** 14417
- [9] Qi M, Dai S, Wu P 2020 *J. Phys. Condens. Mat.* **32** 085802
- [10] Bai M, Zhang W X, He C 2017 *J. Solid State Chem.* **251** 1
- [11] Du J, Xia C, An Y, Wang T, Jia Y 2016 *J. Mater. Sci.* **51** 9504
- [12] Sun M L, Wang S K, Du Y H, Yu J, Tang W C 2016 *Appl. Surf. Sci.* **389** 594
- [13] Liu M, Chen Q, Huang Y, Cao C, He Y 2016 *Superlattices Microstruct.* **100** 131
- [14] Han J N, Zhang Z H, Fan Z, Zhou R 2020 *Nanotechnology* **31** 315206
- [15] Liu M Y, Chen Q Y, Huang Y, Li Z Y, Cao C, He Y 2018 *Nanotechnology* **29** 095203
- [16] Li G, Zhao Y, Zeng S, Ni J 2016 *Appl. Surf. Sci.* **390** 60
- [17] Li Z J, Xu W, Yu Y Q, Du H Y, Zhen K, Wang J, Luo L B, Qiu H L, Yang X B 2016 *J. Mater. Chem. C* **4** 362
- [18] Ersan F, Aktürk E, Ciraci S 2016 *J. Phys. Chem. C* **120** 14345
- [19] Iordanidou K, Kioseoglou J, Afanas'ev V V 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 9862
- [20] Sun X T, Liu Y X, Song Z G, Wang X, Cheng Y 2017 *J. Mater. Chem. C* **5** 4159
- [21] Song Y, Li D, Mi W B, Wang X C, Cheng Y C 2016 *J. Phys. Chem. C* **120** 5613
- [22] Xia C X, Xue B, Wang T X, Peng Y T, Jia Y 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 193107
- [23] Lee Y, Bae S, Jang H, Jang S, Zhu S E, Sim S H, Song Y I, Hong B H, Ahn J H 2010 *Nano Lett.* **10** 490
- [24] Bae S K, Kim H K, Lee Y B, Xu F, Iijima S 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 574
- [25] Saito R, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1999 *Sci. World. J.* **54** 832
- [26] Rubio A, Corkill J L, Cohen M L 1994 *Phys. Rev. B* **49** 5081
- [27] Blase X, Rubio A, Louie S G, Cohen M L 1995 *Phys. Rev. B* **51** 6868
- [28] Yu S, Zhu H, Eshun K, Arab A, Badwan A, Li Q A 2015 *J. Appl. Phys.* **118** 164306
- [29] Kuang W, Hu R, Fan Z Q, Zhang Z H 2019 *Nanotechnology* **30** 145201
- [30] Santos E J G, Sánchez-Portal D, Ayuela A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 125433
- [31] Han J N, He X, Fan Z Q, Zhang Z H 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 1830
- [32] Wang D, Zhang Z H, Deng X Q, Fan Z Q, Tang G P 2016 *Carbon* **98** 204
- [33] Fan Z Q, Zhang Z H, Ming Q, Zhang Z H 2012 *Comp. Mater. Sci.* **53** 294
- [34] Zhang H, Zhou W, Yang Z, Zhang Z H 2017 *Mater. Res. Express* **4** 126301
- [35] Liu J, Zhang Z H, Deng X Q, Zhang Z H 2015 *Org. Electron.* **18** 135
- [36] Bardeen J, Shockley W 1950 *Phys. Rev.* **80** 72
- [37] Zhang Z H, Guo C, Kwong D J, Li J, Deng X, Fan Z Q 2013 *Adv. Funct. Mater.* **23** 2765
- [38] Pan J B, Zhang Z H, Deng X Q, Qiu M, Guo C 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 013503
- [39] Zhang Z H, Deng X Q, Tan X Q, Qiu M, Pan J B 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 183105
- [40] Gao Y, Cheng Z, Wen M, Zhang X, Wu F, Dong H, Zhang G 2021 *Nanotechnology* **32** 245702
- [41] Wang D, Chen, L, Shi C, Wang X, Cui G, Zhang P, Chen Y 2016 *Sci. Rep.* **6** 28487
- [42] Rodríguez-Manzo J A, Cretu O, Banhart F 2010 *ACS Nano* **4** 3422
- [43] He Z, He K, Robertson A W, Kirkland A I, Kim D, Ihm J, Yoon E, Lee G D, Warner J H 2014 *Nano Lett.* **14** 3766
- [44] Kunstmann J, Özdoğan C, Quandt A, Fehske H 2011 *Phys. Rev. B* **83** 045414
- [45] Li X, Wu X, Yang J 2014 *J. Am. Chem. Soc.* **136** 5664
- [46] Yagi Y, Briere T M, Sluiter M H F, Kumar V, Farajian A A, Kawazoe Y 2004 *Phys. Rev. B* **69** 075414
- [47] Beleznyay F B, Bogár F, Ladik J 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 5690
- [48] Cai Y, Zhang G, Zhang Y W 2014 *J. Am. Chem. Soc.* **136** 6269
- [49] Zhang X, Zhao X D, Wu D H, Jing Y, Zhou Z 2015 *Nanoscale* **7** 16020
- [50] Hu R, Li Y H, Zhang Z H, Fan Z Q, Sun L 2019 *J. Mater. Chem. C* **7** 7745

Magneto-electronic property and strain regulation for non-metal atom doped armchair arsenene nanotubes^{*}

Han Jia-Ning[†] Huang Jun-Ming Cao Sheng-Guo Li Zhan-Hai
Zhang Zhen-Hua[‡]

(Human Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering,
Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 20 April 2023; revised manuscript received 25 July 2023)

Abstract

For the development of high performance magnetic devices, inducing magnetism in non-magnetic materials and flexibly regulating their magneto-electronic properties are very important. According to the density functional theory (DFT), we systematically study the structural stability, magneto-electronic properties, carrier mobility and strain effect for each of armchair arsenene nanotubes doped with non-metallic atoms X ($X = \text{B}, \text{N}, \text{P}, \text{Si}, \text{Se}, \text{Te}$). The calculated binding energy and formation energy confirm that the geometric stability of AsANT- X is high. With non-metal doping, each of AsANT- X ($X = \text{B}, \text{N}, \text{P}$) acts as a non-magnetic semiconductor, while each of AsANT- X ($X = \text{Si}, \text{Se}, \text{Te}$) behaves as a bipolar magnetic semiconductor, caused by the unpaired electrons occurring between X and As. Furthermore, by doping, the carrier mobility of AsANT- X can be flexibly moved to a wide region, and the carrier polarity and spin polarity in mobility can be observed as well. Especially, AsANT-Si can realize a transition among bipolar magnetic semiconductor, half-semiconductor, magnetic metal, and non-magnetic metal by applying strain, which is useful for designing a mechanical switch to control spin-polarized transport that can reversibly work between magnetism and demagnetism only by applying strain. This study provides a new way for the application of arsenene.

Keywords: armchair arenene nanotube, non-metallic doping, magneto-electronic properties, carrier mobility, strain effect

PACS: 71.15.-m, 73.20.At, 73.63.-b, 73.22.-f

DOI: [10.7498/aps.72.20230644](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230644)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61771076) and the Innovation Foundation for Postgraduate of Hunan Province, China (Grant No. CX20200820).

[†] Corresponding author. E-mail: HanJN@stu.csust.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn



非金属原子掺杂扶手椅型砷烯纳米管的磁电子性质及调控

韩佳凝 黄俊铭 曹胜果 李占海 张振华

Magneto–electronic property and strain regulation for non–metal atom doped armchair arsenene nanotubes

Han Jia-Ning Huang Jun-Ming Cao Sheng-Guo Li Zhan-Hai Zhang Zhen-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 197101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230644

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230644>

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

非金属原子掺杂的GaN纳米管: 电子结构、输运特性及电场调控效应

Non–metallic atom doped GaN nanotubes: Electronic structure, transport properties, and gate voltage regulating effects

物理学报. 2022, 71(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212342>

非金属原子边缘修饰InSe纳米带的磁电子学特性及应变调控

Magneto–electronic properties of InSe nanoribbons terminated with non–metallic atoms and its strain modulation

物理学报. 2019, 68(19): 198503 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190547>

Fe₃GeTe₂纳米带的结构稳定性、磁电子性质及调控效应

Structure stability, magneto–electronic properties, and modulation effects of Fe₃GeTe₂ nanoribbons

物理学报. 2019, 68(20): 208502 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191103>

过渡金属原子掺杂的锯齿型磷烯纳米带的磁电子学特性

Magneto–electronic property in zigzag phosphorene nanoribbons doped with transition metal atom

物理学报. 2021, 70(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201408>

单层CrI₃电荷输运性质和光学性质应变调控的第一性原理研究

First–principles study of strain–tunable charge carrier transport properties and optical properties of CrI₃ monolayer

物理学报. 2022, 71(20): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221019>

柔性基周期性厚度梯度薄膜的应变效应

Strain effects of periodic thickness–gradient films on flexible substrates

物理学报. 2021, 70(1): 016801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201008>