

掺杂六角形石墨烯电子输运特性的研究

田文 袁鹏飞 禹卓良 陶斌凯 侯森耀 叶聪 张振华

Electronic properties of doped hexagonal graphene

Tian Wen Yuan Peng-Fei Yu Zhuo-Liang Tao Bin-Kai Hou Sen-Yao Ye Cong Zhang Zhen-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 046102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.046102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.046102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I4>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

双空位掺杂氟化石墨烯的电子性质和磁性

Electronic and magnetic properties of fluorinated graphene sheets with divacancy substitutional doping

物理学报.2014, 63(18): 186101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.186101>

多层石墨烯的表面起伏的分子动力学模拟

Ripples of multilayer graphenes: a molecular dynamics study

物理学报.2014, 63(8): 086102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.086102>

外来原子替代碳的氟化石墨烯的磁性和电子性质

Magnetic and electronic properties of fluorographene sheet with foreign atom substitutions

物理学报.2014, 63(4): 046102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.046102>

周期性纳米洞内边缘氧饱和石墨烯纳米带的电子特性

Electronic properties of graphene nanoribbons with periodical nanoholes passivated by oxygen

物理学报.2013, 62(23): 236102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.236102>

氧化石墨制备温度对石墨烯结构及其锂离子电池性能的影响

Effects of preparation temperature of graphite oxide on the structure of graphite and electrochemical properties of graphene-based lithium-ion batteries

物理学报.2012, 61(15): 156103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.156103>

掺杂六角形石墨烯电子输运特性的研究*

田文 袁鹏飞 禹卓良 陶斌凯 侯森耀 叶聪 张振华†

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114)

(2014年8月21日收到; 2014年10月1日收到修改稿)

锯齿型和扶手椅型六角形石墨烯分别跨接在两 Au 电极上, 构成分子纳器件, 同时考虑对六角形石墨烯分别进行 B, N 和 BN 局部规则掺杂. 利用第一性原理方法, 系统地研究了这些器件的电子输运特性. 计算结果表明: B 及 BN 掺杂到扶手椅型六角形石墨烯, 对其电流有较好的调控效应, 同时发现本征及掺杂后的锯齿型六角形石墨烯均表现为半导体性质, 且 N 及 BN 掺杂时, 表现出明显的负微分电阻现象, 特别是 N 掺杂的情况, 能呈现显著的负微分电阻效应, 这也许对于发展分子开关有重要应用. 通过其透射特性及掺杂诱发的六角形石墨烯电子结构的变化, 对这些结果的内在原因进行了说明.

关键词: 六角形石墨烯, 异质原子掺杂, 电子输运特性, 第一性原理方法

PACS: 61.48.Gh, 73.22.Pr, 73.20.At, 72.80.Vp

DOI: 10.7498/aps.64.046102

1 引言

自 2004 年, Geim 研究小组利用普通的胶带在高定向热解石墨上反复剥离, 成功获得石墨烯以来, 石墨烯及其相关器件的研究受到了广泛关注^[1-4]. 石墨烯是由 sp^2 杂化的碳原子紧密排列而成的蜂窝状晶体结构, 若将石墨烯沿不同方向“裁剪”, 能得到具有不同边缘结构的石墨烯纳米条带, 典型的形状有两种: 扶手椅型石墨烯纳米条带和锯齿型石墨烯纳米条带. 因其结构及量子效应与碳纳米管极为类似, 有人曾预言碳纳米管的所有性质都可通过石墨烯纳米条带得到. 石墨烯除了纳米条带这类衍生物之外, 另一类重要的衍生物就是各种形状的石墨烯量子点^[5-8], 它们能利用标准的纳米毫微光刻 (nanolithography) 技术获得^[9], 在目前, 获得这些纳米结构的最好方法是沿不同的晶向裁剪石墨烯平面^[10]. 由于各种石墨烯量子点结构简单, 物性特别, 已成为重要的研究对象, 特别是锯齿型三角形石墨烯因具有特殊的电子结构和独特的磁特

性^[11-13]而备受关注. 同时, 六角形石墨烯也是受关注较多的石墨烯量子点^[14,15].

利用石墨烯、石墨烯纳米条带及石墨烯量子点构建纳米电子器件, 是富有挑战性的工作, 关键是如何利用一定的方法调控电子结构, 目前普遍使用的方法有: 边修饰^[16]、异质原子掺杂^[17]、引入机械变形^[18]或引入拓扑缺陷^[19]、开凿纳米洞^[20-22]等. 特别是随着对石墨烯掺杂控制技术的提高, 掺杂也日益趋于多样化、有序化. 在众多异质原子掺杂中, 由于硼 (B)、氮 (N) 与碳 (C) 的物理化学性质相近, 且 B, N 替换石墨烯中任一 C 原子只会对其几何结构产生微小影响, 因此石墨烯的 B, N 掺杂是一热门的研究方向. 最近, 实验上已成功制备出大面积原子层厚度的 h-BN-C 的复合结构^[23], 这表明对石墨烯进行 B, N 可控掺杂形成杂化或异质结构的可能性. 对石墨烯与 B, N 的复合结构的研究, 目前主要有: B 或 N 的单独掺杂^[24]; B, N 成片规则掺杂^[25,26]; BN 链掺杂^[27]及 BN 纳米带与石墨烯构成异质结^[28]等. 但迄今为止, 很少看到在六角形石墨烯中掺杂 B, N 后其电子特性的研究报道. 如

* 国家自然科学基金 (批准号: 61371065, 61101009, 61201080, 51302022)、湖南省自然科学基金 (批准号: 14JJ2076)、湖南省高校科技创新团队支持计划、湖南省重点学科建设项目和长沙理工大学创新项目资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lgzhang@sohu.com

前所述, 六角形石墨烯是一种重要的纳米结构, 所以对其通过掺杂来调控电子输运特性进行研究是十分必要的。

本文利用第一性原理方法, 研究了锯齿型和扶手椅型六角形石墨烯分别局部规则掺杂 B, N 和 BN 后的电子输运特性. 计算结果表明, 这些掺杂对六角形石墨烯的电子特性有明显的调控效应, 特别是 N 掺杂锯齿型六角形石墨烯能呈现显著的负微分电阻效应, 这也许在设计分子开关方面有重要应用。

2 计算模型与理论方法

图 1 为我们研究的六角形石墨烯器件模型. 为了避免过多的计算, 同时也不失代表性, 我们选择较小的六角形石墨烯进行研究, 其外边缘用氢 (H) 原子进行饱和以消除悬挂键的存在. 将利用密度泛函理论进行几何优化的六角形石墨烯跨接在两金 (Au)(100) 电极中间, 对称放置以形成三明治结构, Au—C 键长采用典型的实验值 2.0 \AA [29]. 类似的器件构型也可以从其他文献中找到 [30]. 图 1 (a) 为扶手椅型六角形石墨烯器件模型, 虚线方框内分别考虑 4 种情形: 未掺杂 (a1), B 掺杂 (a2), N 掺杂 (a3) 和 BN 分子掺杂 (a4). 图 1 (b) 为锯齿型六角形石墨烯模型, 虚线方框内也分别考虑 4 种情形: 未掺杂 (b1), B 掺杂 (b2), N 掺杂 (b3) 和 BN 分子掺杂 (b4). 这里掺杂只考虑局部规则掺杂, 即对于扶手椅型或锯齿型六角形石墨烯, 以中央碳环的替代性掺杂作为各种掺杂的代表进行研究. 整个体系分为左电极、右电极、中央散射区 (器件区) 三个部分. 电极由两层 Au 原子的电极胞来代表, 并在运输垂直方向上选取 15 \AA 真空胞 (vacuum cell) 以减少或避免模型与相邻“像 (image)”之间的相互作用. 中央散射区由六角形石墨烯及邻近的 Au 原子组成, 包括部分电极原子的目的是为了屏蔽六角形石墨烯对体电极的影响. 在计算电子结构以及输运特性之前, 对整个中心散射区的几何结构进行优化, 使其原子间的残存应力减少到 0.05 eV/\AA 以内。

对六角形石墨烯电子输运特性的计算, 采用基于密度泛函理论和非平衡格林函数的第一性原理方法的 Atomistix ToolKit 软件包 [30–33] 进行. 为了求解 Kohn-Sham 方程, 交换关联势选用广义梯度近似. 同时用局域轨道展开价电子态, 考虑到局域轨道和原子极化的影响, 对不同原子采

用不同的基函数组, 即 H, Au 原子选 SZP (single ζ + polarization) 为基函数组, 对 C, B, N 原子选用 DZP (double ζ + polarization) 为基函数组. 原子实则采用 Trolliar Martins 赝势. 在简约布里渊区采用 $1 \times 1 \times 500$ 的 k 点抽样, 能量截断半径 (Mesh cut-off) 的取值为 150 Ry , 主要控制实空间积分网络划分的大小以及泊松方程的求解. 对整个计算收敛后, 通过器件区的电流可采用类 Landauer 公式 [34]: $I = \frac{2e}{h} \int T(E, V_b) dE$ 进行计算, 其中, e 和 h 分别为电子电量和普朗克常数; T, E 及 V_b 分别为透射系数、电子能量及偏压大小。

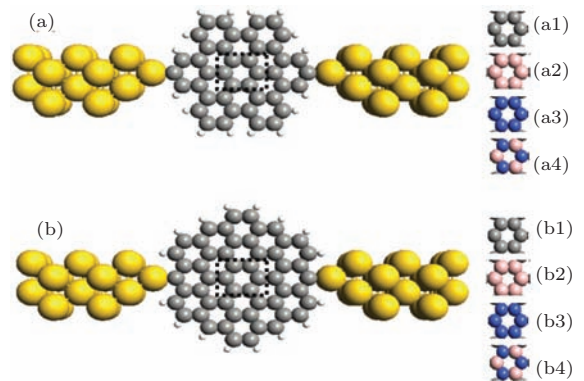
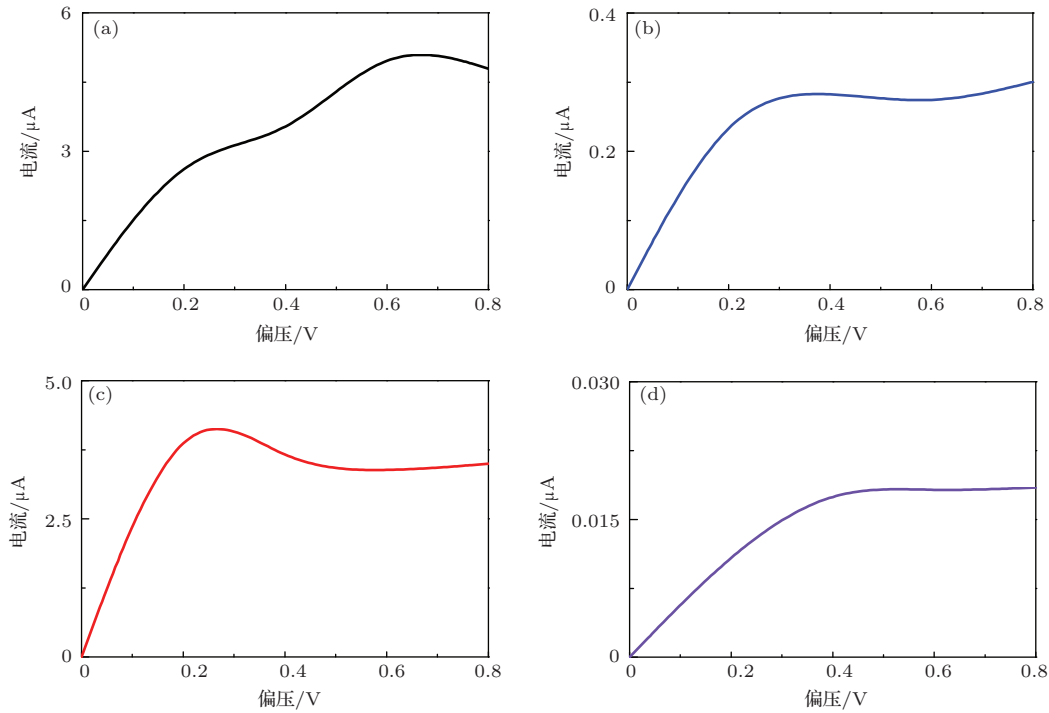


图 1 (a) 扶手椅型六角形石墨烯器件模型, 虚线方框内分别考虑 4 种情况: 未掺杂 (a1), B 掺杂 (a2), N 掺杂 (a3) 和 BN 分子掺杂 (a4); (b) 锯齿型六角形石墨烯器件模型, 虚线方框内也分别考虑 4 种情况: 未掺杂 (b1), B 掺杂 (b2), N 掺杂 (b3) 和 BN 分子掺杂 (b4)

3 计算结果与讨论

3.1 扶手椅型六角形石墨烯的电子输运特性

图 2 所示为当 B, N 和 BN 分别掺杂扶手椅型六角形石墨烯时, 其器件的 I - V 特性. 为了比较, 也给出了完整 (未掺杂) 扶手椅型六角形石墨烯器件的 I - V 特性. 从图 2 可以看出: 1) 掺杂使电流不同程度地变小, B 掺杂使电流下降约 1 个数量级, 而 BN 掺杂使电流下降约 2 个数量级, 这意味 B 及 BN 掺杂都能明显地调控扶手椅型六角形石墨烯的输运特性; 2) 在偏压较低时, 4 种情形的 I - V 曲线几乎都是线性的, 但偏压较高时, 都表现出非线性关系, 特别是掺杂后更为突出, 如明显的“平台” (饱和) 现象; 3) N 掺杂, 扶手椅型六角形石墨烯有较高的零偏压电导, 说明其具有较高的零偏压电子透射特性, 同时, 我们可以看到在 0.2 — 0.4 V 范围内有较明显的负微分电阻现象。

图2 扶手椅型六角形石墨烯的 I - V 特性 (a) 未掺杂; (b) B 掺杂; (c) N 掺杂; (d) BN 掺杂

怎样理解上述的 I - V 特性呢? 一般而言, 掺杂有两种明显的效应: 一是杂质原子导致被掺杂材料的迁移率下降, 这种情况主要发生在杂质原子的大小、物理及化学性质与被掺杂材料的情况相差较大时, 杂质原子掺入后势必导致较大的几何变形及杂质原子周围的键长变化, 从而诱发新的势垒对电子透射产生抑制作用; 二是杂质原子往往有电子给、受体效应, 从而改变被掺杂材料局部的电荷分布及静电势, 导致能带或能级移动. 如前所述, 对于 B, N 或 BN 掺杂六角形石墨烯, 由于杂质原子的大小、物理及化学性质与被掺杂材料的情况相近, 所以几何变形及杂质原子周围的键长变化对电子透射的影响几乎可以忽略不计, 则对电子透射产生的影响, 主要来源于杂质原子的电子给、受体效应.

为了直观地了解和理解上述掺杂及偏压效应, 我们计算了未掺杂及各种掺杂的扶手椅型六角形石墨烯器件的透射谱如图 3 所示, 具体分析如下.

1) 对于未掺杂的六角形石墨烯, 如图 3(a) 所示, 在零偏压时, 费米能级的上、下附近各有 1 个共振隧穿峰, 分别与扶手椅型六角形石墨烯的最低未占据分子轨道 (LUMO) 和最高占据分子轨道 (HOMO) 相对应, 在图中分别表示为“L”和“H”. 费米能级上的透射系数不为零, 即存在非共振隧穿, 所以此时的六角形石墨烯表现为弱金属性质, 电

流随偏压线性增加. 偏压 V 在 0.2—0.6 V 范围内时, 偏压窗 $[-V/2, V/2]$ eV 内的透射系数增加, 按照 Landauer 公式^[34], 电流大小恰为透射系数在偏压窗内对能量的积分, 即电流大小取决于两个因素: 透射系数的大小和偏压窗的宽度, 所以在 0.2—0.6 V 偏压范围, 电流随偏压增加. 当偏压为 0.8 V 时, 偏压窗内的透射系数变小, 电流下降. 显然上面的分析与图 2(a) 中的 I - V 特性完全一致.

2) 对于 B 掺杂, 如图 3(b) 所示, 在零偏压时, 费米能级上方附近有 2 个共振隧穿峰, 分别对应扶手椅型六角形石墨烯 LUMO 及 LUMO+1, 这两个能级是未掺杂情况的 HOMO 及 LUMO 向高能量方向移动所形成, 原因是 B 掺杂后仍为 sp^2 杂化, 但相对 C 原子, π 轨道成为“空穴”, 导致金电极的电子进入“空穴”与 C 原子形成大 π 键, 此时 B 原子附近出现额外的电子, 使得局部静电势升高, 推动系统能级向高能量方向移动. 在 0.2 V 以前, LUMO 处在偏压窗内, 故电流增加较快, 但 0.2 V 后, 大的透射峰均处在偏压窗外, 故电流变化不大.

3) 对于 N 掺杂, 如图 3(c) 所示, 在零偏压时, 在费米能级下方附近有 2 个共振隧穿峰, 分别对应 HOMO-1 及 HOMO, 这两个能级是未掺杂情况的 HOMO 及 LUMO 向低能量方向移动形成的, 原因是 N 掺杂后仍为 sp^2 杂化, 但相对 C 原子, 有多余

的可自由移动的电子, 这些电子移动进入金电极, 此时N原子附近缺少电子, 使得局部静电势能下降, 系统的能级向低能量方向移动. 在0.2 V以前, 偏压窗内有2个透射峰, 故电流增加较快. 此后偏压窗内只有1个透射峰, 导致电流变小, 从而出现负微分电阻现象. 0.6 V后, 透射略有增强.

4) 对于BN掺杂, 如图3(d)所示, 在零偏压时, 费米能级附近没有共振隧穿峰, 这也许有两个来

源: 一是B掺杂及N掺杂是电学性质相反的掺杂; 二是B, N, C三者存在复杂的相互作用. 在0.4 V以前, 偏压窗内非共振隧穿比较强, 所以电流随偏压增加较快. 0.4 V后, 偏压窗内非共振隧穿减弱但偏压窗宽度增加, 互相补偿的结果使电流几乎不变, 出现“平台”现象. 所以, 这些未掺杂及各种掺杂的扶手椅型六角形石墨烯器件的透射及电子结构特性清楚地解释了它们的*I-V*特性.

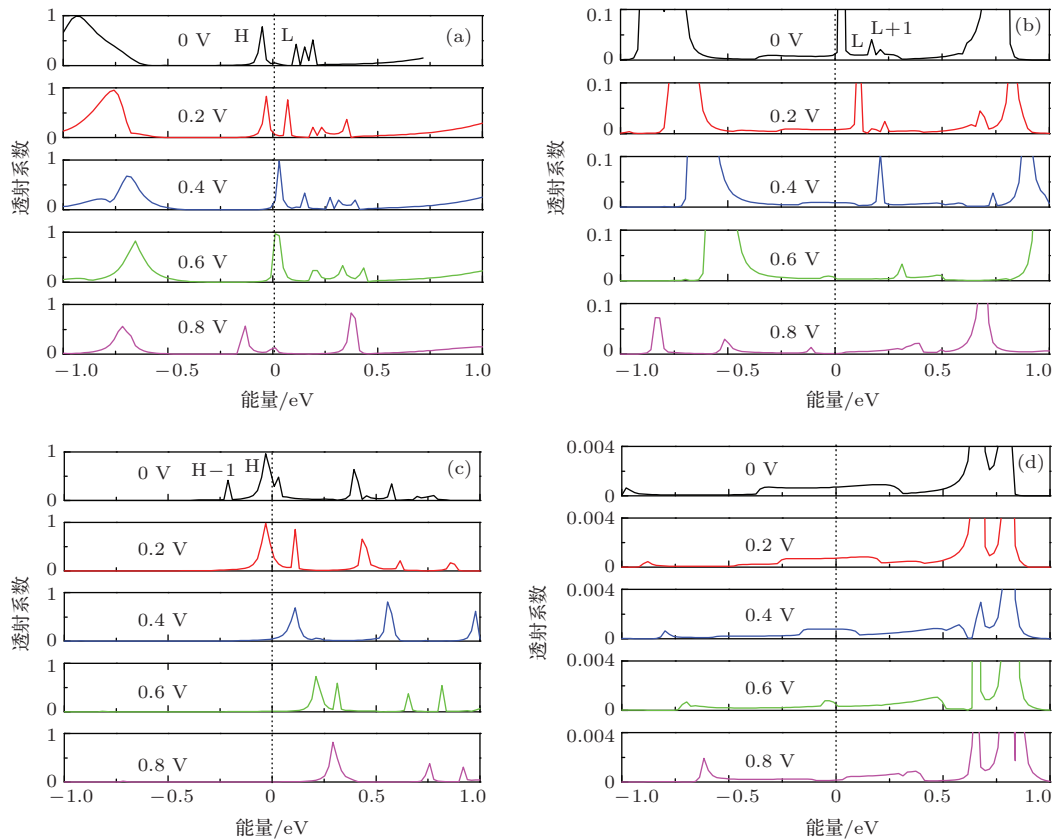


图3 扶手椅型六角形石墨烯在不同偏压下的透射谱 (a) 未掺杂; (b) B掺杂; (c) N掺杂; (d) BN掺杂

3.2 锯齿型六角形石墨烯的电子输运特性

B, N和BN分别掺杂锯齿型六角形石墨烯, 对应器件的*I-V*特性如图4所示, 为了比较, 也给出了完整(未掺杂)锯齿型六角形石墨烯器件的*I-V*特性. 从图4可以看出: 1) B掺杂对电流几乎没有影响, N及BN掺杂对电流有一定的影响, 但比对扶手椅型六角形石墨烯掺杂的影响小很多; 2) 在偏压很低时, 4种情形的电流几乎都为零, 即零偏压电导几乎为零, 这说明不管锯齿型六角形石墨烯是否掺杂, 均表现为半导体性质; 3) N及BN掺杂后均有明显的负微分电阻现象, 尤为突出的是N掺杂.

为了理解上述*I-V*特性, 我们计算了未掺杂及各种掺杂的锯齿型六角形石墨烯器件的透射谱如图5所示, 具体分析如下.

1) 对于未掺杂的锯齿型六角形石墨烯, 如图5(a)所示, 在零偏压时, 费米能级的上、下附近各有1个共振隧穿峰, 它们与该六角形石墨烯的LUMO和HOMO相对应, 在图中分别表示为“L”和“H”, 且LUMO和HOMO之间的透射系数为零, 所以未掺杂的六角形石墨烯表现出半导体性质. 在0.2—0.6 V范围内, 偏压窗内的透射系数变化不大, 故电流变化也不大. 仅在0.8 V, 偏压窗内的透射系数明显增大, 导致电流陡升.

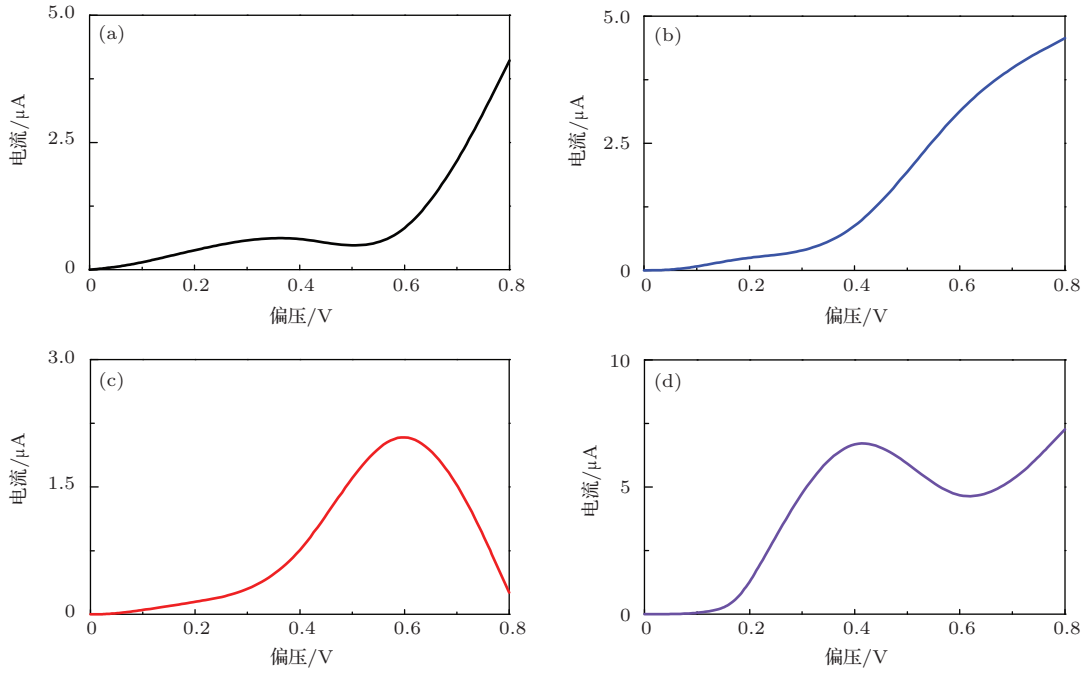


图4 锯齿型六角形石墨烯的 I - V 特性 (a) 未掺杂; (b) B 掺杂; (c) N 掺杂; (d) BN 掺杂

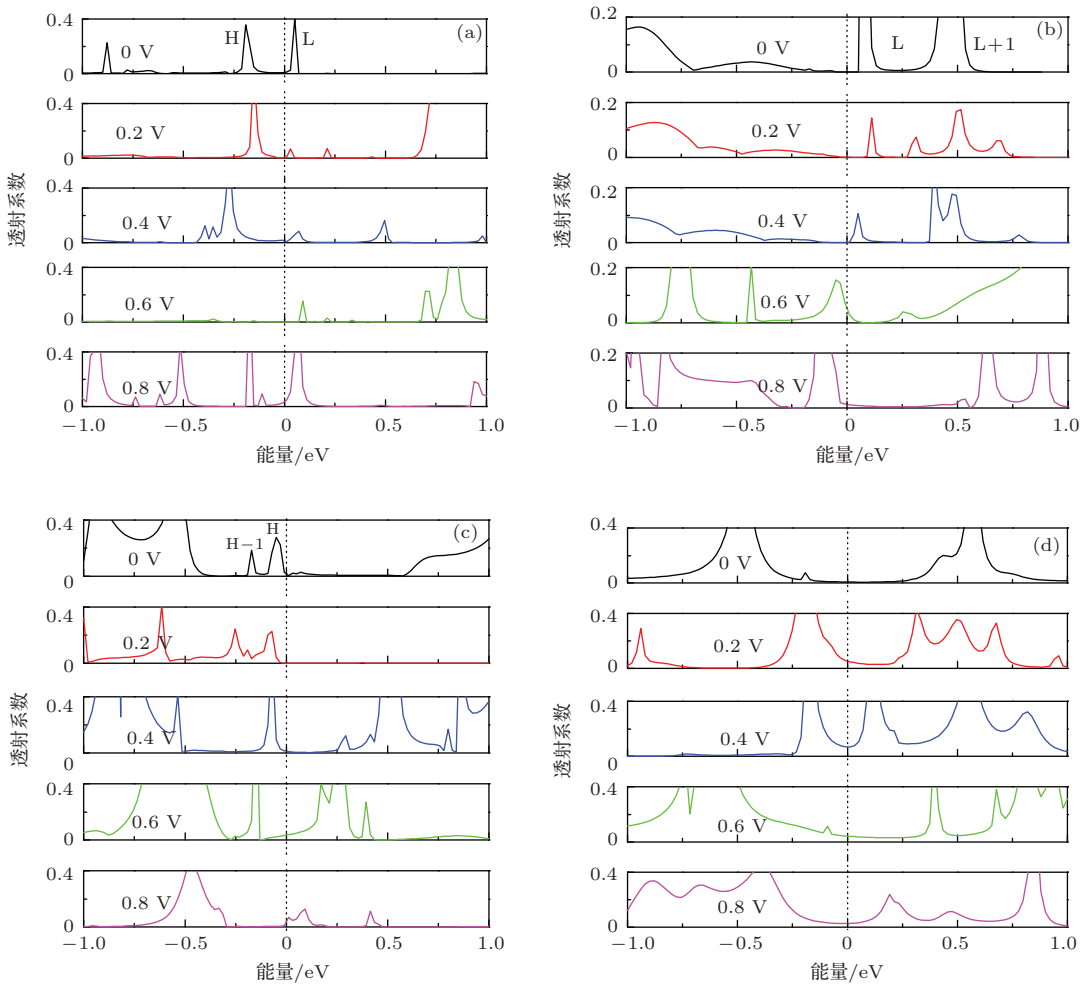


图5 锯齿型六角形石墨烯在不同偏压下的透射谱 (a) 未掺杂; (b) B 掺杂; (c) N 掺杂; (d) BN 掺杂

2) 对于B掺杂, 如图5(b)所示, 在零偏压时, 很类似B掺杂扶手椅型六角形石墨烯的情形, 费米能级上方附近有2个共振透射峰, 它们对应LUMO及LUMO+1, 这两个能级是未掺杂情况的HOMO及LUMO向高能量方向移动形成的, 原因与B掺杂导致额外电子进入六角形石墨烯有关, 如前所述. 此外, 费米能级上无透射系数, 故很小偏压时电流几乎为零. 0.2 V后, 偏压窗内的透射系数不断增大, 故电流单调增加.

3) 对于N掺杂, 如图5(c)所示, 在零偏压时, 类似N掺杂扶手椅型六角形石墨烯的情形, 在费米能级附近有2个隧穿透射峰, 分别对应HOMO-1及HOMO, 这两个能级是未掺杂情况的HOMO及LUMO向低能量方向移动形成的, 原因与N掺杂导致电子移出六角形石墨烯有关, 如前所述. 在0.2—0.6 V之间, 偏压窗内的透射系数不断增大, 故电流单调增加, 但在0.8 V时, 透射系数陡降, 自然使电流突降, 非常明显的负微分电阻现象可期.

4) 对于BN掺杂, 如图5(d)所示, 在零偏压时, 费米能级附近出现宽的透射能隙, 导致小偏压的零电流. 偏压大于0.2 V后, 偏压窗内透射系数增大与变小交替改变, 所以负微分电阻现象也可期. 所以, 这些未掺杂及各种掺杂的锯齿型六角形石墨烯

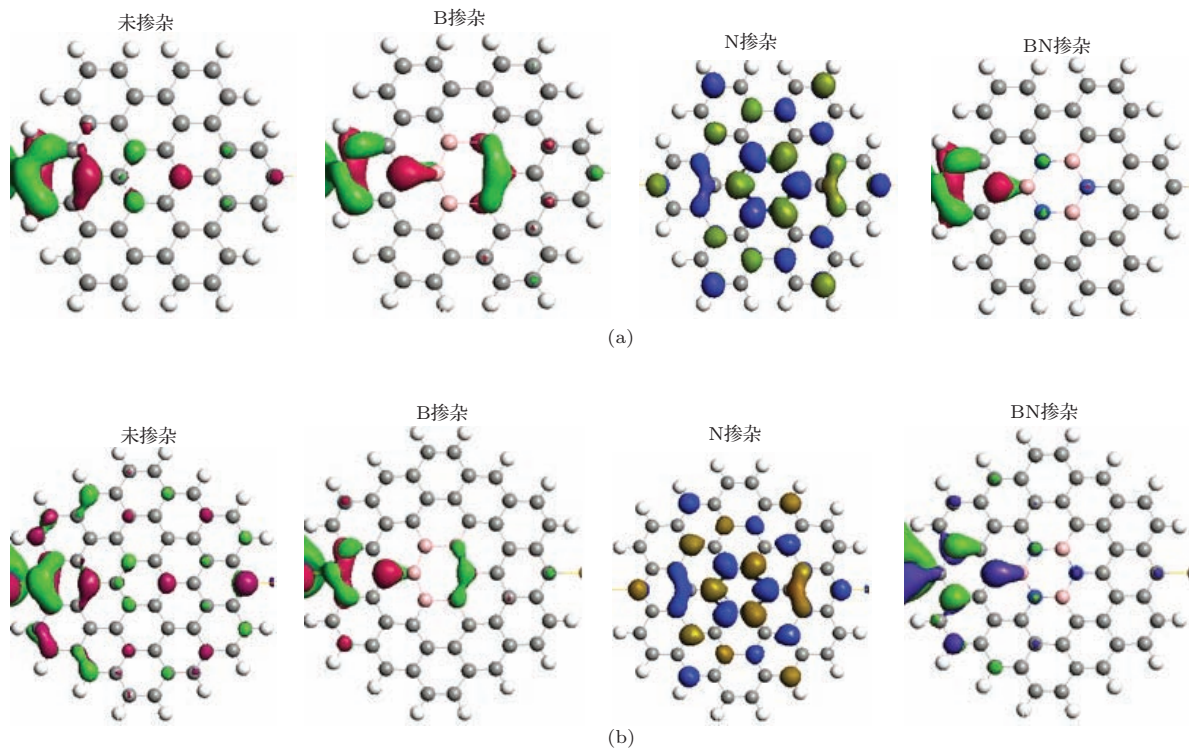
器件透射及电子结构特性与它们的*I-V*特性完全一致. 我们还计算了零偏压时费米能级处六角形石墨烯的透射本征态, 具体结果见附录A.

4 结 论

采用基于密度泛函理论和非平衡格林函数的第一性原理方法, 本文系统地研究了对六角形石墨烯进行B、N或BN局部有序掺杂后的电子输运特性, 重点研究了*I-V*特性与掺杂、电子透射及电子结构的关系. 研究表明: B及BN掺杂扶手椅型六角形石墨烯, 对其电流有较好的调控效应; 而N及BN掺杂到锯齿型六角形石墨烯, 有明显的负微分电阻现象, 特别是N掺杂的情形. 通过其透射特性及掺杂诱发的六角形石墨烯电子结构的变化, 对这些结果的内在原因进行了清楚的说明.

附录A 零偏压时费米能级处六角形石墨烯的透射本征态

我们计算了零偏压时费米能级处六角形石墨烯的透射本征态, 如图A1所示(为简单起见, 略去了电极). 可以看出, 不同边缘结构的石墨烯纳米片具有不同掺杂时, 其电子透射是不同的.



图A1 零偏压时费米能级处六角形石墨烯的透射本征态 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型

参考文献

- [1] Wang J J, Zhu M Y, Outlaw R A, Zhao X, Manos D M, Holloway B C 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1265
- [2] Zhang L, Wang J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 087202
- [3] 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
- [4] Wang X M, Liu H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047102 (in Chinese) [王雪梅, 刘红 2011 物理学报 **60** 047102]
- [5] Wang W L, Meng S, Kaxiras E 2008 *Nano Lett.* **8** 241
- [6] Yazyev O V, Wang W L, Meng S, Kaxiras E 2008 *Nano Lett.* **8** 766
- [7] Ezawa M 2007 *Phys. Rev. B* **76** 45415
- [8] Rossier J F, Palacios J J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 177204
- [9] Wu X, Brown N, Naud C, Mayou D, Li T, Hass J, Marchenkov A N, Conrad E H, First P N, de Heer W A 2006 *Science* **312** 1191
- [10] Campos L C, Manfrinato V R, Yamagishi J D S, Kong J, Herrero P J 2009 *Nano Lett.* **9** 2600
- [11] Li J, Zhang Z H, Zhang J J, Deng X Q 2012 *Org. Electron.* **13** 2257
- [12] Hod O, Barone V, Scuseria G E 2008 *Phys. Rev. B* **77** 035411
- [13] Wang W L, Yazyev O, Meng S, Kaxiras E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 157201
- [14] Bahamon D A, Pereira A L C, Schulz P A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 125414
- [15] Zhang Z Z, Chang K, Peeters F M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235411
- [16] Kan E, Li Z, Yang J, Hou J G 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 4224
- [17] Oswald W, Wu Z G 2012 *Phys. Rev. B* **85** 115431
- [18] Tang G P, Zhou J C, Zhang Z H, Deng X Q, Fan Z Q 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 023104
- [19] Lin X, Ni J 2011 *Phys. Rev. B* **84** 075461
- [20] Liu W, Wang Z F, Shi Q W, Yang J, Liu F 2009 *Phys. Rev. B* **80** 233405
- [21] Zeng Y C, Tian W, Zhang Z H 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 236102 (in Chinese) [曾永昌, 田文, 张振华 2013 物理学报 **62** 236102]
- [22] Tian W, Zeng Y C, Zhang Z H 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 074307
- [23] Ci L J, Song L, Jin C H, Jariwala D, Wu D, Li Y, Srivastava A, Wang Z F, Storr K, Balicas L, Liu F, Ajayan P M 2010 *Nat. Mater.* **9** 430
- [24] Martins T B, Miwa R H, Antônio J R, Fazzio A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 196803
- [25] Xu B, Lu Y H, Feng Y P, Lin J Y 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 073711
- [26] Arun K M, Swapan K P 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 10842
- [27] Wang D, Zhang Z H, Deng X Q, Fan Z Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 207101 (in Chinese) [王鼎, 张振华, 邓小清, 范志强 2013 物理学报 **62** 207101]
- [28] Dubois S M M, Declerck X, Charlier J C, Payne M C 2013 *ACS Nano* **7** 4578
- [29] Cheng Z L, Skouta R, Vazquez H, Widawsky J R, Schneebeli S, Chen W, Hybertsen M S, Breslow R, Venkataraman L 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 353
- [30] Sheng W, Ning Z Y, Yang Z Q, Guo H 2010 *Nanotechnology* **21** 385201
- [31] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [32] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejon P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [33] Zeng J, Chen K Q 2012 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** 8032
- [34] Landauer R 1970 *Philos. Mag.* **21** 863

Electronic properties of doped hexagonal graphene*

Tian Wen Yuan Peng-Fei Yu Zhuo-Liang Tao Bin-Kai Hou Sen-Yao
Ye Cong Zhang Zhen-Hua[†]

(School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 21 August 2014; revised manuscript received 1 October 2014)

Abstract

Zigzag- and armchair-edged hexagonal graphenes are sandwiched between two Au electrodes to construct molecular nanodevices, and the effects of the orderly and locally doped with B, N, and BN for such graphene nanoflakes are considered, respectively. Based on the first-principles method, the electronic transport properties of these devices are investigated systematically. Our calculated results show that the using of B and BN to dope armchair-edged hexagonal graphenes can modulate the electronic transport properties significantly. Intrinsic and doped zigzag-hexagonal graphenes presents a semiconducting behavior, and when it is doped with N and BN, there appears a negative differential resistance (NDR) phenomenon, especially for N-doping, and a very obvious NDR can be observed in zigzag-edged hexagonal graphene: this might be important for developing molecular switches. The underlying causes for these findings are clearly elucidated by the transmission features and the doping-induced changes in electronic properties of a hexagonal graphene.

Keywords: hexagonal graphene, heteroatom doping, electronic transport property, first-principles method

PACS: 61.48.Gh, 73.22.Pr, 73.20.At, 72.80.Vp

DOI: [10.7498/aps.64.046102](https://doi.org/10.7498/aps.64.046102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61371065, 61101009, 61201080, 51302022), the Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant No. 14JJ2076), the Aid Program for Science and Technology Innovative Research Team of Institution of Higher Education of Hunan Province, China, the Construct Program of the Key Discipline in Hunan Province, China, and the Innovation Foundation of Changsha University of Science and Technology, China.

[†] Corresponding author. E-mail: lgzzhang@sohu.com