

双层硼烯纳米带的量子输运研究*

胡海涛¹⁾ 郭爱敏^{1)†}

1) (中南大学物理与电子学院, 长沙 410083)

(2022 年 7 月 1 日收到; 2022 年 7 月 17 日收到修改稿)

硼烯是继石墨烯以来很有潜力的新型二维材料, 本文采用格林函数方法结合 Landauer-Büttiker 公式, 着重研究了电极-中心区连接方式、层间跃迁和在位能无序对双层硼烯纳米带电荷输运的影响, 计算了双层硼烯纳米带的色散关系、透射谱以及电流-电压曲线. 计算结果表明: 双层硼烯纳米带均呈现金属行为, 该现象与电极-中心区连接方式、层间跃迁以及无序均无关, 定性解释了双层硼烯为金属的实验结果. 当左右电极为单层硼烯时, 体系透射谱不存在量子化电导平台, 相应的电流小于左右电极均为双层硼烯纳米带的情况. 电流与层间跃迁的关系依赖电极-中心区连接方式. 当左右电极为双层硼烯时, 随层间跃迁的增大, 电流先增大后减小; 当左右电极不相同, 随层间跃迁的增大, 电流先迅速增大而后达到饱和; 当左右电极为上(下)层硼烯时, 随层间跃迁的增大, 电流振荡下降(上升). 最后发现双层硼烯纳米带的输运性能随无序强度的增大而减弱.

关键词: 硼烯纳米带, 量子输运, 格林函数, 电流-电压曲线**PACS:** 73.23.-b, 73.43.Cd, 73.23.Ad**DOI:** 10.7498/aps.71.20221304

1 引言

自 2004 年英国科学家 Novoselov 等^[1]首次从多层石墨体系成功剥离出单层石墨烯, 二维材料迅速进入科学家的视野. 由于石墨烯具有六角蜂窝结构和狄拉克锥, 其表现出许多新奇的力学^[2]、热学、电学^[3]和磁学性能, 引起了巨大关注, 在电子器件等领域有着广阔的应用前景^[4]. 单层石墨烯中不存在能隙, 通过外加电场可以实现带隙的调控, 使其具有更好的应用价值. 单种元素形成的二维材料结构相对简单, 而随着研究的进一步深入, 越来越多的二维材料也相继被发现, 包括硅烯^[5]、锗烯^[6]、硼烯^[7]等, 这些二维材料和石墨烯一样具有各种优异性质, 如: 超导性、拓扑性等, 有望在各种器件中发挥重要作用. 其中, 硅作为碳最近邻的元素之一, 因为具有 sp^3 轨道杂化的倾向, 所以虽然在实验室可

以合成出硅烯, 但是其结构仍然不稳定^[8]; 而锗烯由于最近邻原子间距较大, 也比较难以制备. 此外, 二维硅烯和锗烯都趋于形成翘曲结构而非平面结构^[9].

硼作为元素周期表中的第 5 号元素, 具有很强的成键能力, 其复杂的成键方式可以形成硼的各种同素异形体, 同时硼也是碳的最近邻元素之一, 吸引了很多科学家的注意. 对硼原子平面小团簇的研究, 为二维硼的存在提供了实验证据^[10]. 早期对硼烯的理论研究, 认为硼烯具有金属^[11]或半导体^[12]性质. 由于自然界不能找到体相硼, 因此无法像石墨烯一样通过机械剥离法制备, 通常采用分子束外延法来生长硼烯, 生长条件较为严苛^[13]. 在超高真空环境下, 2015 年吴克辉课题组^[14]和 Guisinger 课题组^[7]以银为基底分别成功合成两种不同硼烯相, 证实了二维硼烯的稳定性. 此后硼烯陆续在各种金属基底上成功合成, 如: 铝^[15]、金^[16]、铜^[17].

* 国家自然科学基金 (批准号: 11874428) 和中南大学高性能计算平台资助的课题.

† 通信作者. E-mail: aimin.guo@csu.edu.cn

不同金属基底上合成的硼烯结构往往不一样,目前实验上合成的硼烯结构主要有 β_{12} 硼烯和 χ_3 硼烯,不同结构的硼烯具有许多特殊且复杂的物理性质,这些性质引起了广泛的实验和理论研究. Penev 等^[18]对硼烯的电子结构、声子谱和电声子耦合进行第一性原理分析,预测在金属基底上最稳定的硼烯结构具有超导性,并估计超导临界温度 T_C 在 10—20 K 之间; Xiao 等^[19]通过第一性原理计算发现:通过施加应力可以将 T_C 提高到 27.4 K,而通过掺杂 T_C 可达到 34.8 K; Feng 等^[20]基于紧束缚模型提出 β_{12} 硼烯可以像蜂窝晶格一样分解为两个三角形晶格从而容纳狄拉克锥,并运用第一性原理证实其不寻常的电子结构; Lian 等^[21]发现硼烯中的各向异性一维等离子体来源于硼烯中倾斜狄拉克锥的电子跃迁; Hu 等^[22]发现虽然随机分布的线缺陷能急剧减弱硼烯纳米带的电荷输运性能,但是该无序硼烯纳米带仍存在若干共振电导峰.

随着二维材料相关研究的进一步深入,多层二维材料引起了越来越多的关注.通过调控层间跃迁强度或者层间扭转角度,多层二维材料的输运性质将发生显著变化,具有比单层二维材料更加广阔的应用前景.2006年, Ohta 等^[23]以碳化硅为基底制备双层石墨烯,发现通过调控各层载流子浓度可以调控带隙大小.近来,研究发现通过调控双层石墨烯的扭转角和层间耦合,可以诱导产生平带进而实现超导^[24].2022年,吴克辉课题组^[25]和 Hersam 课题组^[26]分别在铜基底上成功合成双层硼烯.利用扫描隧道显微镜结合第一性原理计算,他们发现双层硼烯的热稳定性显著高于单层硼烯,且双层硼烯呈现金属行为^[25].相较于单层硼烯,双层硼烯由于层间键合作用会更加稳定,因而更加适合制作电学器件.本文利用格林函数方法和 Landauer-Büttiker 公式,研究了双层硼烯纳米带的量子输运性质.计算结果表明,双层硼烯纳米带呈现金属行为,其导电性能随层间跃迁的增大先增大后减小.此外,本文还考虑了电极和在位能无序对双层硼烯纳米带量子输运的影响,发现当电极选为单层硼烯时,电流将减小;当左右电极不对称时,电流随层间跃迁的增大先增大后趋于饱和;当左右电极对称时,电流随层间跃迁的增大呈现波动上升或下降趋势.与此同时,双层硼烯纳米带的输运性能随着无序度的增大而减弱.

2 模型与方法

由以上所知,本文将研究双层硼烯纳米带的量子输运性质,该硼烯结构来自吴克辉课题组^[25],如图 1 所示.图 1(a) 为上层硼烯的结构示意图,而图 1(b) 对应下层硼烯,上下两层硼烯通过红色标记的硼原子的共价键作用而形成双层硼烯纳米带,其中每一个晶胞的上层包含 180 个硼原子,而下层包含 186 个硼原子.该双层硼烯纳米带由左电极(与左边绿色线条相连接的半无限长区域)、中心散射区(左右绿色线条间的区域)和右电极(与右边绿色线条相连接的半无限长区域)三部分组成.在单电子紧束缚近似下,体系的哈密顿量表示为^[22]

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i - \sum_{\langle i,j \rangle} t a_i^\dagger a_j - \sum_{\langle i,l \rangle} t_c a_i^\dagger a_l, \quad (1)$$

其中 a_i^\dagger (a_i) 为第 i 个格点的产生(湮灭)算符, ε_i 为

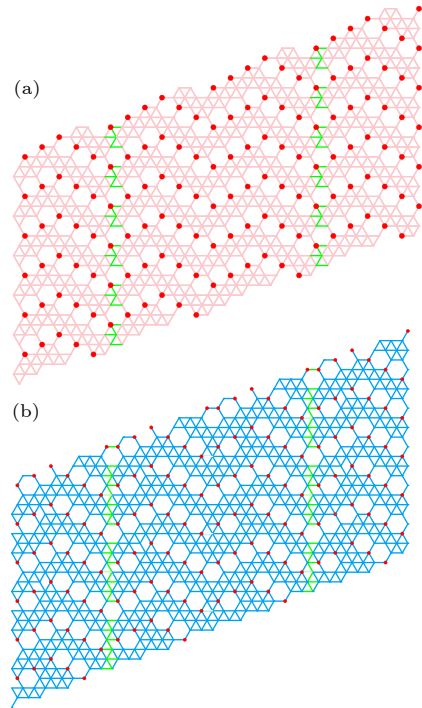


图 1 两端双层硼烯纳米带的结构 (a) 上层硼烯示意图; (b) 下层硼烯示意图; 上下两层硼烯通过红色标记的硼原子连接, 此时中心散射区长度包含 2 个晶胞, 而宽度包含 1 个晶胞

Fig. 1. Structure of a two-terminal bilayer borophene nanoribbon. Schematics of the (a) top and (b) down layers. The boron atoms denoted by the red balls connect to their nearest neighbor ones at the other layer. Here, the size of the central scattering region contains two cells in length and one cell in width.

第 i 个格点的在位能, $t(t_c)$ 为层内(层间)的跃迁积分, $\langle i, j \rangle (\langle i, l \rangle)$ 表示层内(层间)的最近邻跃迁. 在数值计算中, 在位能取 $\varepsilon_i = 0$, 层内跃迁积分 t 为能量单位. 此外, 中心散射区长度取10个晶胞, 宽度取1个晶胞.

采用格林函数方法和 Landauer-Büttiker公式, 体系的电流表示为^[27]

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E, V) [f_L(E, V) - f_R(E, V)] dE, \quad (2)$$

式中, $T(E, V)$ 为透射系数, $f_{L/R}(E, V) = 1/\{1 + \exp[(E \mp eV/2 - E_F)/k_B T]\}$ 为 Fermi-Dirac 分布函数, 其中 E 为入射电子能量, V 为左右电极的偏压, $E_F = 0$ 为费米能级, k_B 为玻尔兹曼常数, T 取室温. 体系的透射系数写为^[27]

$$T(E, V) = \text{Tr} [G_L^r G^r I_R G^a], \quad (3)$$

其中 $G^r = (G^a)^\dagger = 1/[EI - H - \Sigma_L^r - \Sigma_R^r]$ 为推迟格林函数, $\Gamma_{L/R} = i[\Sigma_{L/R}^r - \Sigma_{L/R}^a]$ 为线宽函数和 $\Sigma_{L/R}^r$ 为推迟自能. 当左右电极施加偏压 V 时, 左电极的电势能变为 $\varepsilon_i + eV/2$, 而右电极的电势能变为 $\varepsilon_i - eV/2$, 相应的自能可利用迭代法求解半无限长硼烯纳米带的表面格林函数得到^[28], 然后利用(3)式得到体系的透射系数 $T(E, V)$, 最后利用(2)式求得体系的电流 I . 相应地, 双层硼烯纳米带零温下的电导写为

$$G = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{dI}{dV}. \quad (4)$$

3 结果与讨论

3.1 透射谱、能带及电流-电压曲线

首先考虑左右电极均为双层硼烯纳米带的情况(方案一). 图2(a)给出了无穷长双层硼烯纳米带在费米能级附近的能带结构, 此时层间跃迁取为 $t_c = 0.2t$. 由图2(a)可知, 双层硼烯纳米带在费米面处存在电子态. 为了进一步研究该体系的电荷输运性质, 计算了电导与入射电子能量的关系, 如图2(b)所示. 从图2(b)可知, 双层硼烯纳米带的透射谱呈现量子化的电导平台, 同时费米面处的电导为 $4e^2/h$. 这说明: 1) 双层硼烯纳米带呈现金属行为, 定性解释了双层硼烯为金属的实验结果^[25]; 2) 双层硼烯纳米带在费米能级处有两个电荷输运

通道, 这与图2(a)的费米面与两条能带相交的结果一致. 此外发现该纳米带的电导关于 $E = 0$ 不对称, 这是由粒子-空穴对称破缺引起的. 而当入射电子能量位于 $0.045t$ 附近时, 相应的电导为0, 这和能带图中 $0.045t$ 附近的带隙相对应.

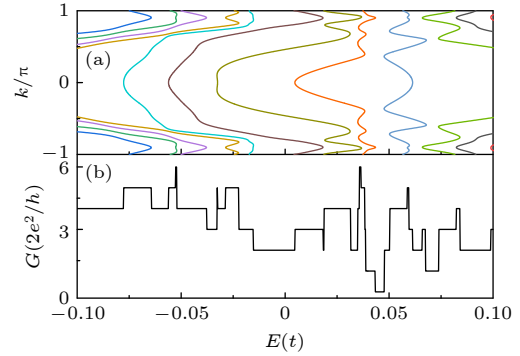


图2 (a) 双层硼烯纳米带的色散关系和(b)相应的电导, 此时左右电极均为半无限长的双层硼烯纳米带, 层间跃迁积分取为 $t_c = 0.2t$

Fig. 2. (a) Dispersion relation of the bilayer borophene nanoribbon around the Fermi energy and (b) the corresponding transmission spectrum. Here, the left and right electrodes are the semi-infinite bilayer borophene nanoribbons and the interlayer hopping integral is set to $t_c = 0.2t$.

为进一步研究层间跃迁积分对双层硼烯纳米带输运性质的影响, 计算了在不同能量范围内, 双层硼烯纳米带在不同层间跃迁积分下的电导与入射电子能量的关系, 如图3所示, 其中层间跃迁积分从 $t_c = 0$ 取到 $t_c = 0.9t$. 计算结果表明, 双层硼烯纳米带的透射谱在不同层间跃迁积分下均呈现量子化的电导平台, 并且费米能量处的电导均不为零, 这说明双层硼烯纳米带具有金属行为. 与此同时, 发现当入射电子能量远离费米面时, 电导将更加振荡, 该振荡现象随层间跃迁积分的增大亦变得更加明显. 特别地, 电导不会随入射电子能量与费米面相对能量差的增大而单调增大, 这与石墨烯完全不同^[29]. 最后, 发现随层间跃迁积分的逐渐增大, 双层硼烯纳米带的电导峰值呈现减小趋势, 但是电导较大的能量区域将先增大后减小. 这是由层间电荷输运与层内电荷输运相互竞争引起的. 当层间跃迁 $t_c = 0$ 时, 双层硼烯纳米带的输运性质由层内电荷输运决定, 相应的电导为两单层硼烯纳米带电导的线性叠加; 而随着层间跃迁的增大, 电子在不同硼烯层跳跃的概率将增大, 而不同硼烯层具有不同的电荷输运性能(将在以下部分讨论), 进而引起层间电荷输运与层内电荷输运的竞争效应.

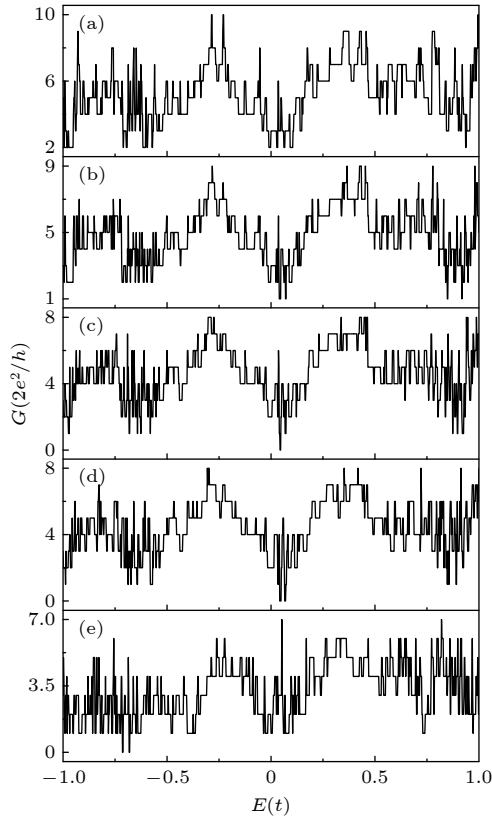


图3 不同层间跃迁下, 双层硼烯纳米带的电导与入射电子能量的关系 (a) $t_c = 0$; (b) $t_c = 0.1t$; (c) $t_c = 0.2t$; (d) $t_c = 0.3t$; (e) $t_c = 0.9t$; 此时左右电极均为半无限长的双层硼烯纳米带

Fig. 3. Energy-dependent conductance G of the bilayer borophene nanoribbon connected to two semi-infinite bilayer ones by considering different interlayer hopping integrals: (a) $t_c = 0$; (b) $t_c = 0.1t$; (c) $t_c = 0.2t$; (d) $t_c = 0.3t$; (e) $t_c = 0.9t$.

为了进一步研究双层硼烯纳米带的电荷输运性质, 直接计算了不同层间跃迁积分时的电流-电压曲线, 如图(4)所示. 从图(4)可知, 双层硼烯纳米带的电流随电压的增大几乎线性增大, 该现象与层间跃迁积分无关, 表明双层硼烯纳米带具有金属行为, 与实验结果完全相符^[25]. 与此同时, 当层间跃迁积分 $t_c = 0, 0.1t, 0.2t$ 和 $0.3t$ 时, 电流差别不大; 而当 $t_c = 0.9t$ 时, 电流强度显著减小. 这是因为当层间跃迁积分与层内跃迁积分相当时, 电子在层间跃迁的概率将变大, 意味着电子遭受输运性能较弱的硼烯层的散射将增强, 进而引起电流的减小. 此外, 还发现当层间跃迁为 $t_c = 0$ 时, 相应电流-电压曲线的振荡幅度将变大, 这是由于此时的电流等于两个单层硼烯纳米带电流的线性叠加, 从而引起振荡幅度的增大.

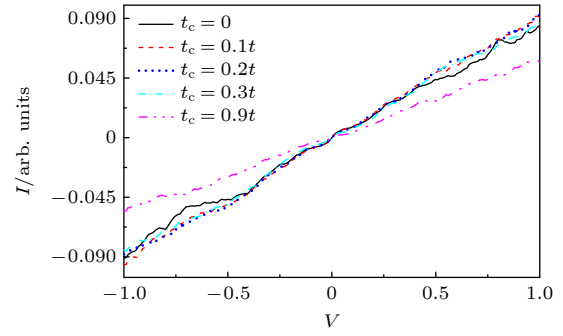


图4 不同层间跃迁下, 双层硼烯纳米带的电流-电压曲线, 此时左右电极均为双层硼烯纳米带, 不同颜色曲线代表不同的层间跃迁积分

Fig. 4. Current-voltage characteristics of the bilayer borophene nanoribbon connected to two semi-infinite bilayer ones by taking into account various interlayer hopping integrals.

3.2 电极对双层硼烯纳米带电荷输运的影响

为了深入理解双层硼烯纳米带的电荷输运性质, 考虑左右电极的影响, 并计算了4种单层硼烯/双层硼烯/单层硼烯结构的输运性质. 这4种三明治结构分别为: 左电极为双层硼烯纳米带的下层, 右电极为纳米带的上层, 如图1所示, 该三明治结构命名为方案二; 方案三则是左右电极均为双层硼烯纳米带的下层; 方案四是左右电极均为纳米带的上层; 对于方案五, 左电极为纳米带的上层, 而右电极为下层.

图5(a1)–(a5)给出了方案二时双层硼烯纳米带的电导与入射电子能量的关系, 而图5(b1)–(b5)则对应方案三, 不同的图对应不同层间跃迁积分. 从图5(a1)可知, 当层间跃迁为 $t_c = 0$ 时, 方案二的电导严格为零, 这是因为此时上下两层硼烯纳米带完全退耦以致电子无法实现层间跃迁, 因此右电极无法探测到从左电极入射的电子. 与此相反, 当 $t_c = 0$ 时, 方案三的透射谱出现量子化电导平台, 如图5(b1)所示, 这是因为此时左右电极均连接在双层硼烯纳米带的下层, 亦即只有下层硼烯纳米带参与电荷输运因而保持空间平移对称性. 当层间跃迁为 $t_c \neq 0$ 时, 方案二和方案三的透射谱均不存在量子化电导平台, 并且电导呈剧烈振荡现象, 这是由整个体系的空间平移对称破缺引起的. 更为重要的是, 不管何种电极连接方式和层间跃迁取何值, 双层硼烯纳米带在费米能量处的电导均不为零, 说明该体系呈现金属行为并具有鲁棒性. 此外, 研究发现方案三的电导随层间跃迁积分的增大呈减小趋势, 而方案二没有类似趋势.

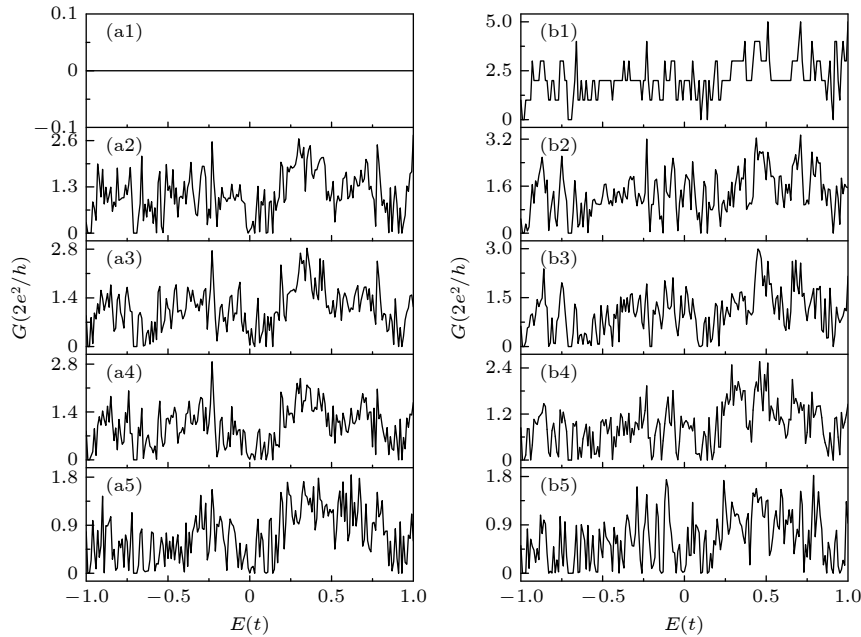


图 5 不同层间跃迁下, 方案二和方案三的电导与入射电子能量的关系 (a1)–(a5) 方案二; (b1)–(b5) 方案三; (a1) (b1) $t_c = 0$; (a2) (b2) $t_c = 0.1t$; (a3) (b3) $t_c = 0.2t$; (a4) (b4) $t_c = 0.3t$; (a5) (b5) $t_c = 0.9t$

Fig. 5. Energy-dependent conductance G of the bilayer borophene nanoribbon by considering different contact and interlay hopping integrals: (a1)–(a5) Correspond to scheme 2 where the left electrode is the semi-infinite down layer in Fig. 2(b) and the right electrode is the semi-infinite up layer in Fig. 2(a); (b1)–(b5) refer to scheme 3 where both electrodes are the semi-infinite down layer in Fig. 2(b). (a1) (b1) $t_c = 0$; (a2) (b2) $t_c = 0.1t$; (a3) (b3) $t_c = 0.2t$; (a4) (b4) $t_c = 0.3t$; (a5) (b5) $t_c = 0.9t$.

随后直接计算了 4 种电极连接方式下, 双层硼烯纳米带的电流-电压曲线, 如图 6 所示. 从图 6 可知, 双层硼烯纳米带的电流随电压几乎呈线性增大趋势, 该现象与电极连接方式以及层间跃迁积分均无关, 说明双层硼烯纳米带的金属性质具有很强的鲁棒性. 当层间跃迁 $t_c = 0$ 时, 由于上下两层硼烯纳米带完全没有耦合以致不存在层间电荷运输, 因此方案二和方案五在 $t_c = 0$ 时的电流严格为零. 与此相反, 方案三和方案四在 $t_c = 0$ 时的电流不为零, 因为此时左右电极同时连接在双层硼烯纳米带的上层或者下层. 此外, 研究发现方案四在 $t_c = 0$ 时的电流大于相应的方案三电流, 这表明上层硼烯纳米带的输运性能优于下层硼烯纳米带.

3.3 层间跃迁对双层硼烯纳米带电荷运输的影响

为了更加直观地讨论层间跃迁对双层硼烯纳米带电荷运输的影响, 计算了 5 种电极连接方式下电流与层间跃迁积分的关系, 如图 7 所示, 其中图 7(a) 对应方案一, 依次类推. 左右电极的电压设为 $V = 1$. 从图 7(a) 可知, 当左右电极均为双层硼烯纳米带时, 电流随层间跃迁积分的增大先增大后

减小. 这是因为当层间跃迁较小时, 电子将从输运性能较弱的下层硼烯跃迁到输运性能较强的上层硼烯, 从而使得电流增大; 而当层间跃迁变大时, 电子在层间跃迁的概率将变大, 因此电子遭受输运性能较弱的下层硼烯的散射将增强进而引起电流的减小. 当左右电极不相同时, 即左电极为上(下)层硼烯, 右电极为下(上)层硼烯, 双层硼烯纳米带的电流随层间跃迁的增大先迅速增大而后达到饱和状态, 如图 7(b) 和 (e) 所示, 这是因为电子主要通过上层硼烯进行输运而上层硼烯的输运性能是有限的. 当左右电极为下层硼烯时, 电流随层间跃迁的增大而振荡上升; 当左右电极为上层硼烯时, 电流则随层间跃迁的增大而振荡下降. 这是由于上层硼烯的输运性能优于下层硼烯, 所以当左右电极为下层硼烯时, 层间跃迁越强, 电子从下层硼烯跳到上层硼烯的概率将增大从而电流增大; 反之当左右电极为上层硼烯时, 电子从上层硼烯跳到下层硼烯的概率随层间跃迁的增大而增大, 从而电流减小.

3.4 无序对双层硼烯纳米带电荷运输的影响

在实验制备过程中, 多种杂质可能随机吸附到双层硼烯上. 为了定性描述杂质对双层硼烯纳米带

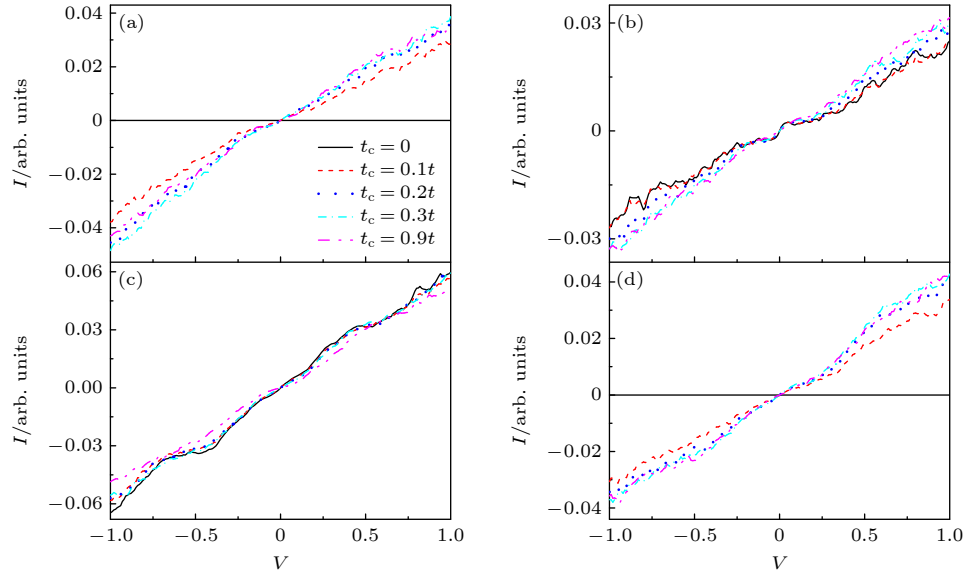


图 6 不同层间跃迁下, 四种方案的电流-电压曲线 (a) 方案二; (b) 方案三; (c) 方案四; (d) 方案五; 图中不同颜色曲线代表不同的层间跃迁积分

Fig. 6. Current-voltage characteristics of the bilayer borophene nanoribbon by considering different contact and interlayer hopping integrals: (a) Scheme 2; (b) scheme 3; (c) scheme 4; (d) scheme 5. Here, scheme 4 corresponds to the case where both electrodes are the semi-infinite up layer, and scheme 5 to the case where the left electrode is the semi-infinite up layer and the right electrode is the semi-infinite down layer. Different curves in each panel denote various interlayer hopping integrals.

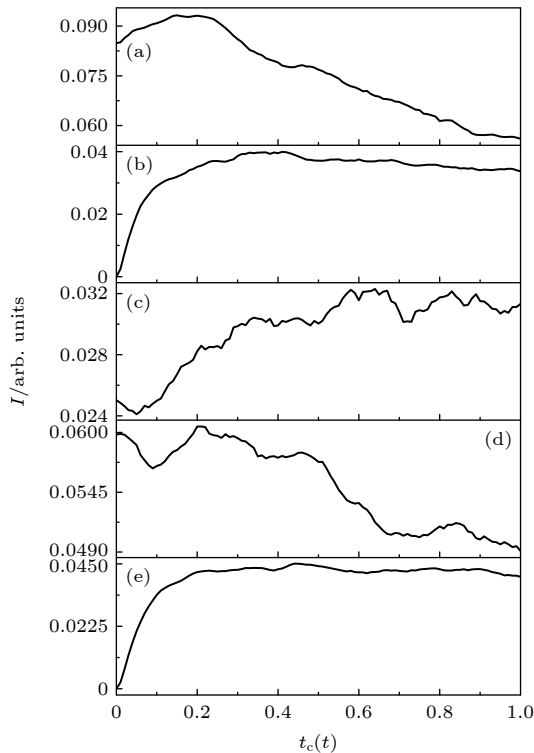


图 7 5 种方案的电流与层间跃迁积分的关系 (a) 方案一; (b) 方案二; (c) 方案三; (d) 方案四; (e) 方案五; 此时左右电极的电压为 $V_{SD} = 1$

Fig. 7. Current at $V_{SD} = 1$ of the bilayer borophene nanoribbon by considering different contact, as a function of the interlayer hopping integral: (a) Scheme 1; (b) scheme 2; (c) scheme 3; (d) scheme 4; (e) scheme 5.

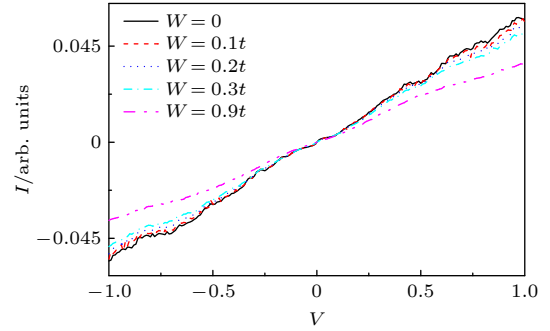


图 8 不同无序度下, 双层硼烯纳米带的电流-电压曲线. 此时左右电极均为双层硼烯纳米带, 层间跃迁积分为 $t_c = 0.9t$, 不同颜色曲线代表不同的无序度

Fig. 8. Current-voltage characteristics of the bilayer borophene nanoribbon connected to two semi-infinite bilayer ones in the presence of on-site energy disorder with disorder strength W . Here, the interlayer hopping integral is $t_c = 0.9t$.

输运性质的影响, 因此考虑最无序的情况 [27,30], 即中间散射区硼原子的在位能在 $[-W/2, W/2]$ 区间内随机均匀取值, 其中 W 称为无序度. 计算了不同无序度下方案一的电流-电压曲线, 如图 8 所示, 其中无序度从 $W = 0.1t$ 至 $W = 0.9t$. 图中不同颜色曲线代表不同的无序度, 而每条曲线均通过求解 100 个无序样本的电流-电压值后取平均得到. 计算结果表明, 双层硼烯纳米带呈现金属行为, 该现象与在位能无序无关. 随着无序强度的增大, 双层硼

烯纳米带的输运性能将逐渐降低. 这是因为当无序度增大时, 电子遭到杂质散射将增强进而引起透射系数的下降.

4 结 论

本文主要基于格林函数方法, 研究了电极、层间跃迁项以及无序对双层硼烯纳米带输运性质的影响, 研究结果表明改变电极的单双层时, 电流大小会有较大的变化, 但无论是何种方案下双层硼烯都表现出金属性, 这和实验结果相符合^[25]; 同时, 研究发现电极为双层硼烯时其导电性会随着层间跃迁项的增强而先增强后减弱, 这是因为当层间跃迁项较小时, 电导较小层的电子有几率跃迁到电导较大层, 从而使得电导增大, 而当层间跃迁项较大时, 电子频繁的层间跃迁会带来较大的散射, 从而使得电阻减小; 当电极为不对称单层硼烯时其导电性会随着层间跃迁项的增强先逐渐增大, 后达到饱和状, 这是由于上层硼烯的导电性明显优于下层硼烯, 而上层硼烯的导电能力是有限的; 而当左右电极都为上层硼烯时, 其导电性会随着层间跃迁项波动下降, 当左右电极都为下层硼烯时, 其导电性则会随着层间跃迁项波动上升, 这都可以用上下层硼烯导电性差异来解释. 此外发现双层硼烯纳米带的输运性能会随着在位能无序的增强而减弱.

参考文献

- [1] 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
- [2] Li L L, Meng F W, Zhou K, Huang Y, Peng Y T 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 086801 (in Chinese) [李亮亮, 孟凡伟, 邹鲲, 黄瑶, 彭倚天 2021 物理学报 **70** 086801]
- [3] Yu Z, Dang Z, Ke X Z, Cui Z 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 248103 (in Chinese) [禹忠, 党忠, 柯熙政, 崔真 2016 物理学报 **65** 248103]
- [4] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [5] Liu G, Lei X L, Wu M S, Xu B, Ouyang C Y 2014 *J. Phys. Condens. Matter* **26** 355007
- [6] Liu G, Liu S B, Xu B, Ouyang C Y, Song H Y, Guan S, Yang S A 2015 *J. Phys. Chem. Lett.* **6** 4936
- [7] Mannix A J, Zhou X F, Kiraly B, Wood J D, Alducin D, Myers B D, Liu X, Fisher B L, Santiago U, Guest J R, Yacaman M J, Ponce A, Oganov A R, Hersam M C, Guisinger N P 2015 *Science* **350** 1513
- [8] Jackson K, Horoi M, Chaudhuri I, Frauenheim T, Shvartsburg A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 013401
- [9] Qin Z H 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 216802 (in Chinese) [秦志辉 2017 物理学报 **66** 216802]
- [10] Zhai H-J, Kiran B, Li J, Wang L S 2003 *Nat. Mater.* **2** 827
- [11] Tang H, Ismail-Beigi S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 115501
- [12] Zhou X F, Dong X, Oganov A R, Zhu Q, Tian Y, Wang H T 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 085502
- [13] Li W H, Chen L, Wu K H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 108104 (in Chinese) [李文辉, 陈岚, 吴克辉 2022 物理学报 **71** 108104]
- [14] Feng B, Zhang J, Zhong Q, Li W, Li S, Li H, Cheng P, Meng S, Chen L, Wu K 2016 *Nat. Chem.* **8** 563
- [15] Li W, Kong L, Chen C, Gou J, Sheng S, Zhang W, Li H, Chen L, Cheng P, Wu K 2018 *Sci. Bull.* **63** 282
- [16] Kiraly B, Liu X, Wang L, Zhang Z, Mannix A J, Fisher B L, Yakobson B I, Hersam M C, Guisinger N P 2019 *ACS Nano* **13** 3816
- [17] Wu R, Drozdov I K, Eltinge S, Zahl P, Ismail-Beigi S, Božović I, Gozar A 2019 *Nat. Nanotechnol.* **14** 44
- [18] Penev E S, Kutana A, Yakobson B I 2016 *Nano Lett.* **16** 2522
- [19] Xiao R C, Shao D-F, Lu W, Lv H, Li J, Sun Y 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 122604
- [20] Feng B J, Sugino O, Liu R-Y, Zhang J, Yukawa R, Kawamura M, Iimori T, Kim H, Hasegawa Y, Li H, Chen L, Wu K, Kumigashira H, Komori F, Chiang T C, Meng S, Matsuda I 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 096401
- [21] Lian C, Hu S Q, Zhang J, Cheng C, Yuan Z, Gao S, Meng S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 116802
- [22] Hu P J, Wang S X, Chen X F, Liang Z R, Fang T F, Guo A M, Xu H, Sun Q F 2022 *npj Comput. Mater.* **8** 131
- [23] Ohta T, Bostwick A, Seyller T, Horn K, Rotenberg E 2006 *Science* **313** 951
- [24] Yankowitz M, Chen S, Polshyn H, Zhang Y, Watanabe K, Taniguchi T, Graf D, Young A F, Dean C R 2019 *Science* **363** 1059
- [25] Chen C, Lv H, Zhang P, Zhuo Z, Wang Y, Ma C, Li W, Wang X, Feng B, Cheng P, Wu X, Wu K, Chen L 2022 *Nat. Chem.* **14** 25
- [26] Liu X, Li Q, Ruan Q, Rahn M S, Yakobson B I, Hersam M C 2022 *Nat. Mater.* **21** 35
- [27] Hu P J, Wang S X, Chen X F, Gao X H, Fang T F, Guo A M, Sun Q F 2022 *Phys. Rev. Appl.* **17** 024074
- [28] Sancho M P L, Sancho J M L, Rubio J 1984 *J. Phys. F Met. Phys.* **14** 1205
- [29] Chen L, Ouyang F, Ma S, Fang T F, Guo A M, Sun Q F 2020 *Phys. Rev. B* **101** 115417
- [30] Jiang Y, Hu L 2007 *Phys. Rev. B* **75** 195343

Quantum transport properties of bilayer borophene nanoribbons^{*}

Hu Hai-Tao¹⁾ Guo Ai-Min^{1)†}

¹⁾ (School of Physics and Electronics, Central South University, Changsha 410083, China)

(Received 1 July 2022; revised manuscript received 17 July 2022)

Abstract

Since British scientists Geim et al. (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) successfully peeled off single-layer graphene from multilayer graphite for the first time in 2004, two-dimensional materials have quickly caught the attention of scientists. Owing to its honeycomb structure, graphene exhibits many novel mechanical, thermal, electrical, and magnetic properties, which have attracted great attention and have broad application prospects in electronic devices and other fields. With the further development of research, more and more two-dimensional materials have been discovered successively, including silicene, germanene, and borylene. These two-dimensional materials have various excellent properties like graphene. Boron is one of the nearest-neighbor elements of carbon, it has proved to be able to form borophene, which has a lot of novel properties, including superconductivity and Dirac fermions. Several polymorphs of monolayer borophene have been synthesized on different metal surfaces, such as Au, Cu, Ag, Ir and Al. Using the nonequilibrium Green's function, we investigate the electronic transport properties of bilayer borophene which was synthesized recently. We first calculate the transmission spectra of different interlayer transition strengths when the electrode has two layers, then we calculate the currents of bilayer borophene under different voltages when the electrode has two layers, which both show bilayer borophene is metallic. With the enhancement of the interlayer transition strength, its conductivity first increases and then decays. We try to change the layer number of electrode. In scheme two, the left electrode is the lower half of the bilayer borophene while the right electrode is the upper half of the bilayer borophene. In scheme three both electrodes are the lower half of the bilayer borophene. In scheme four, both electrodes are the upper half of the bilayer borophene. In scheme five, the left electrode is the upper half of the bilayer borophene while the right electrode is the lower half of the bilayer borophene. We discover that the current decays greatly when the electrode is just one layer. For scheme three and scheme four, both left electrode and right electrode are the lower half of the bilayer borophene or the upper half of the bilayer borophene, the current will rise or decline in volatility. For scheme two or scheme five, the electrode is unsymmetrical, we find that the current will reach a maximum when interlayer transition increases. The reason for the above phenomenon is that the electrical conductivity of the upper half of the bilayer borophene is higher than that of the lower half, which causes the electrons of the lower half of the bilayer borophene to tunnel to the upper half so that the conductivity of bilayer borophene is enhanced when the interlayer transition strength is weak. However, when the interlayer transition strength is great, the frequent interlayer transition of electrons results in large scattering, thus causing its conductivity to decay. Finally, we consider the influence of the on-site disorder on the transport properties of the bilayer borophene, finding that its transport capability will be declined by increasing the disorder strength.

Keywords: borophene nanoribbon, quantum transport, Green's function, current-voltage curve

PACS: 73.23.-b, 73.43.Cd, 73.23.Ad

DOI: 10.7498/aps.71.20221304

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11874428) and the High Performance Computing Center of Central South University.

[†] Corresponding author. E-mail: aimin.guo@csu.edu.cn



双层硼烯纳米带的量子输运研究

胡海涛 郭爱敏

Quantum transport properties of bilayer borophene nanoribbons

Hu Hai-Tao Guo Ai-Min

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 227301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20221304

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221304>

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

硅纳米结构晶体管中与杂质量子点相关的量子输运

Quantum transport relating to impurity quantum dots in silicon nanostructure transistor

物理学报. 2019, 68(8): 087301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190095>

石墨烯p-n结在磁场中的电输运热耗散

Thermal dissipation of electric transport in graphene p-n junctions in magnetic field

物理学报. 2022, 71(12): 127203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220029>

导线非共线的分子器件输运性质的第一性原理研究

First-principles study on transport property of molecular device with non-collinear electrodes

物理学报. 2018, 67(9): 097301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172221>

HgTe/CdTe量子阱中自旋拓扑态的退相干效应

Dephasing effect of quantum spin topological states in HgTe/CdTe quantum well

物理学报. 2019, 68(22): 227301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191072>

硼或氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运性质

Non-collinear magnetism and electronic transport of boron or nitrogen doped zigzag graphene nanoribbon

物理学报. 2019, 68(2): 027101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181754>

六方氮化硼表面石墨烯纳米带生长与物性研究

Synthesis and characterization of graphene nanoribbons on hexagonal boron nitride

物理学报. 2019, 68(16): 168102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191036>