

DOI:10.3969/j.issn.1003-5060.2024.06.007

碳化硅纳米带“品”型器件的第一性原理研究

赵 晗, 宋玲玲, 叶润隆, 韦藏龙

(合肥工业大学 微电子学院, 安徽 合肥 230601)

摘 要:文章基于锯齿形碳化硅纳米带,通过将中间部分结构在空间上进行向上平移,再翻转 180° 形成异质结,保留碳边缘通道,形成“品”型三端异质结器件,并利用密度泛函理论和非平衡格林函数的计算方法,研究该三端器件的电子输运特性。计算结果表明:无论是在铁磁态还是反铁磁态下,一种自旋电子都能从一端电极经由异质结单边通道渡越到另一端电极,实现了 100% 的自旋极化电子输运;当对中心区外加栅压时,电流随着栅压增加而减小,当栅压大于 0.5 V 时,器件内部电子输运通道关闭,2 种自旋电子均不能通过三端器件,表明通过栅极电压可以实现对器件内部电子输运能力的调控;若器件受到外力产生形变,只要形变量小于 6.7%,电子输运能力几乎不改变。研究结果为基于碳化硅纳米带的纯自旋流器件的设计提供了有力的理论依据。

关键词:锯齿边缘碳化硅纳米带;“品”型三端器件;自旋极化;第一性原理计算

中图分类号: O469 **文献标志码:** A **文章编号:** 1003-5060(2024)06-0767-06

First-principles investigations on twist-shaped device based on silicon carbide nanoribbons

ZHAO Han, SONG Lingling, YE Runlong, WEI Canglong

(School of Microelectronics, Hefei University of Technology, Hefei 230601, China)

Abstract: In this paper, the structure is based on zigzag silicon carbide nanoribbons (ZSiCNRs), with the middle section translating upward spatially and then flipping 180° . Thus, a twist-shaped tri-probe heterojunction device would be formed, which reserves the carbon edge channel. According to density functional theory (DFT) and non-equilibrium Green's function (NEGF) calculation method, the electron transport properties of the tri-probe device are investigated. The results indicate that one kind of spin electron can transit from one electrode to the other via the single side channel of the heterojunction in both ferromagnetic (FM) and antiferromagnetic (AFM) states, achieving 100% spin-polarized electron transport. When the gate voltage is applied to the central region, the current decreases with the increase of the gate voltage. When the gate voltage is greater than 0.5 V, the electron transport channel is completely blocked and both spin electrons cannot pass through the tri-probe device, indicating that the electron transport capacity of the device can be regulated by the gate voltage. Furthermore, if the device is deformed by external force, the electron transport capacity is almost unchanged as long as the shape variable is less than 6.7%. The findings provide a strong theoretical basis for the design of pure spin current devices based on silicon carbide nanoribbons.

Key words: zigzag silicon carbide nanoribbons (ZSiCNRs); twist-shaped tri-probe device; spin polarization; first-principles calculations

收稿日期: 2022-03-08; 修回日期: 2022-03-23

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (11974355)

作者简介: 赵 晗 (1995—), 男, 辽宁凌海人, 合肥工业大学硕士生;

宋玲玲 (1980—), 女, 安徽安庆人, 博士, 合肥工业大学副教授, 硕士生导师, 通信作者, E-mail: llsong@hfut.edu.cn.

自旋电子学^[1-3]是一门新兴学科,它利用电子的自旋来存储和传输信息。自旋电子器件设计则将自旋电子学和传统的微电子器件设计相结合,在传统的微电子学器件基础上,利用电子自旋这一内禀属性,将电子的自旋和磁矩作为信息的载体。相较于传统微电子学器件传递信息采用的“高低”电平信号,利用电子自旋作为信息载体则在信息传输的“稳定性、保真性、低能耗”等方面表现出极大的优势。为了充分利用电子自旋这一特性,众多新奇的器件设计方案层出不穷,如纯自旋流器件^[4-5]、自旋磁轨道耦合器件^[6]、自旋霍尔器件^[7]、自旋过滤器件^[8-9]等。

目前已有多种纳米材料在自旋电子器件设计中得以应用,其中较为引人瞩目的有石墨烯^[10]、二硫化钼^[11]、二硒化锡^[12]、黑磷^[13]等一系列的新兴二维材料,这些二维材料在现阶段的纳米器件研究中表现出了极为优异的电学、磁学特性。其中,有一种材料与上述的石墨烯结构相类似,即通过将石墨烯的一种子晶格中的碳原子替换为硅原子,得到二维的碳化硅纳米结构。因为碳和硅元素均位于元素周期表中的第IV主族,所以二维的碳化硅结构与石墨烯结构也有着极其类似的物理学特性。类似于锯齿边缘形(zigzag)和扶手椅形(arm-chair)的石墨烯纳米带,二维碳化硅结构也可以裁剪成准一维的锯齿形碳化硅纳米带(ZSiCNR)和扶手椅形碳化硅纳米带(ASiCNR)。文献^[14]表明,反铁磁态下的ZSiCNR具有半金属性,为直接利用反铁磁态条件下的ZSiCNR实现自旋电子学器件设计提供极好的条件;文献^[15]研究发现,当ZSiCNR的链宽数大于5时,铁磁态和反铁磁态下的ZSiCNR总能差几乎为0,造成ZSiCNR器件设计与应用的困难。

为了解决上述问题,本文基于ZSiCNR设计了“品”型三端的自旋过滤器件模型。该模型在铁磁态和反铁磁态下,当左右电极外加偏压,器件均能够体现出极好的自旋过滤性质;并且通过中心区的栅压,可以实现器件电子输运能力的调控。

1 模型与方法

本文研究的器件结构如图1所示,器件分为左电极、中心散射区、右电极和栅极4个部分。左右电极均为半无限长的6链宽锯齿形碳化硅纳米带(6-ZSiCNR),其中的上边缘为碳原子,对应的下边缘均为硅原子。中心散射区由有限长的6-ZSiCNRs在空间上向上平移,再翻转180°,与左

右电极部分拼接构成。由图1可知,拼接部分形成了“碳—硅—碳—硅”的四聚体结构,其中的碳—硅键键长均为1.79 Å,键角均为90°。栅极结构由中心区部分向上延伸为半无限长的ASiCNR所构成。在中心散射区与实际计算模型中采用的左右电极与栅极之间均预留了3个单胞宽度的6-ZSiCNRs作为缓冲层。器件的边缘原子均由氢原子进行钝化处理来消除悬挂键对纳米带电学性质产生的影响。

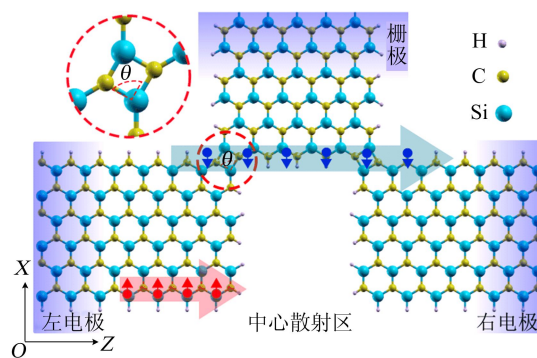


图1 “品”型三端器件模型

本文采用Nanodcal量子输运研究软件进行纳米器件电子输运性质的研究。Nanodcal软件包是结合了非平衡格林函数方法(non-equilibrium Green's function, NEGF)与密度泛函理论(density functional theory, DFT)电子器件量子输运计算的主流软件。计算选用模守恒赝势和双ζ极化(double zeta polarization, DZP)的局域原子轨道基组,实空间网格精度由2176.8 eV的等效平面波截段能确定,体系的交换关联势则采用Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)形式的广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)。为避免模型在周期性体系计算中相互影响,模型在非电子透射方向的真空层均设置为20 Å,对于电极自洽和器件电子输运计算,倒空间k点网格分别设置为1×1×100和1×1×1。

器件在中心散射区的自旋电流特性可以通过Landauer-Büttiker公式^[16-17]进行计算,即

$$I_s = \frac{e}{h} \int T_s(E, V_b) [f_L(E - \mu_L) - f_R(E - \mu_R)] dE \quad (1)$$

其中:下标s表示计算电流的电子自旋极化指标;e为电子电荷;h为普朗克常量; f_L 、 f_R 分别为在化学势 μ_L 、 μ_R 下左、右电极的费米-狄拉克分布函数。

在给定的偏压值下的电子透射系数 $T_s(E)$,

V_b)的计算公式如下:

$$T_s(E, V_b) = \text{Tr}[\Gamma_L G^R \Gamma_R G^A]_s \quad (2)$$

其中: G^R 、 G^A 分别为关于中心散射区的延迟和超前格林函数; Γ_L 、 Γ_R 分别为描述左、右电极与中心散射区之间相互作用的线宽函数。

2 研究结果讨论

2.1 6-ZSiCNR 电子结构

6-ZSiCNR 的能带结构如图 2 所示。无论是铁磁(ferromagnetic, FM)状态还是反铁磁(anti-ferromagnetic, AFM)状态, ZSiCNR 能带结构是相似的,对于 2 种自旋电子的能带来说,大部分的能带曲线是简并的,但在费米能级附近的导带底与价带顶发生了不同的自旋极化(图 2 中编号为 1、2、3、4)。在铁磁态时,穿过费米能级的是来自价带顶自旋向上的 2 号能带和来自导带底自旋向下的 3 号能带,表明铁磁态 ZSiCNR 可导电,具有金属性行为;而在反铁磁态时,穿过费米能级的 2 号能带转变为自旋向下的电子态,表明反铁磁态 ZSiCNR 呈现半金属性。实现具有完全自旋极化特征的半金属性是凝聚态物理和自旋电子学中的重要课题,显然反铁磁态的 ZSiCNR 为设计搭建自旋过滤器件提供了可能。

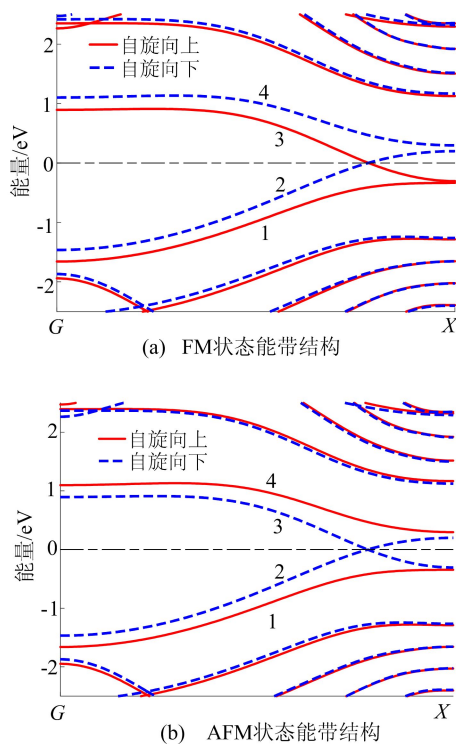


图 2 6-ZSiCNR 在 FM、AFM 状态下的能带结构

6-ZSiCNR 在 FM、AFM 状态下, 2 号、3 号能带在 6 个不同的 k 点(从 G 点到 X 点, 相邻 k 点

间距为 0.1)的电子波函数的空间分布如图 3 所示。从图 3 可以看出,无论是 FM 状态还是 AFM 状态, ZSiCNR 电子波函数的变化规律相同。随着 k 从 G 点到 X 点, 2 号能带上的电子布洛赫态始终分布在硅边缘, 而 3 号能带的电子布洛赫态则始终分布在碳边缘。这表明 ZSiCNR 的电子输运通道主要分布在纳米带的碳边缘或者硅边缘。

然而,计算发现反铁磁状态和铁磁状态下的 ZSiCNR 总能几乎相等,也就是说, ZSiCNR 的反铁磁状态不稳定,未来在实际器件工作中无法保障其稳定的半金属行为。

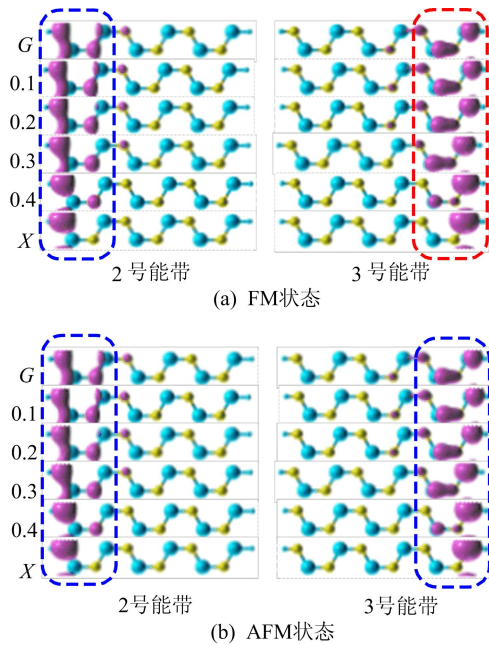


图 3 6-ZSiCNR 在不同状态下 2 号、3 号能带的电子本征态

2.2 器件的电子透射性质讨论

本文采用对 6-ZSiCNR 进行“扭转-拼接”实现“品”型电子器件的设计,器件中左、右电极与“栅端”均通过“碳-硅-碳-硅”四聚体实现链接。这样的链接方式既保证了器件中仅存在一个连续的自旋电子传输通道^[18];同时,“碳-硅-碳-硅”四聚体中相邻碳、硅原子的反铁磁耦合特性^[19-20]又保证器件的传输通道中边缘碳原子磁矩始终保持相同,不随纳米带磁性状态的改变而改变。

本文对 2 种磁性态下器件模型的自旋电子输运能力进行计算,如图 4 所示。计算结果显示,其自旋向下电子在费米能级附近 $[-0.30, 0.25]$ eV 的能量区间内具有几乎为 1 的透射系数,而自旋向上电子的透射系数在相同能量区间内几乎为 0。

自旋极化率 E_{SF} 的计算公式为:

$$E_{SF} = \frac{|T_{UP} - T_{DN}|}{|T_{UP} + T_{DN}|} \times 100\% \quad (3)$$

其中, T_{UP} 、 T_{DN} 为自旋向上和自旋向下电子在费米能级处的透射系数。

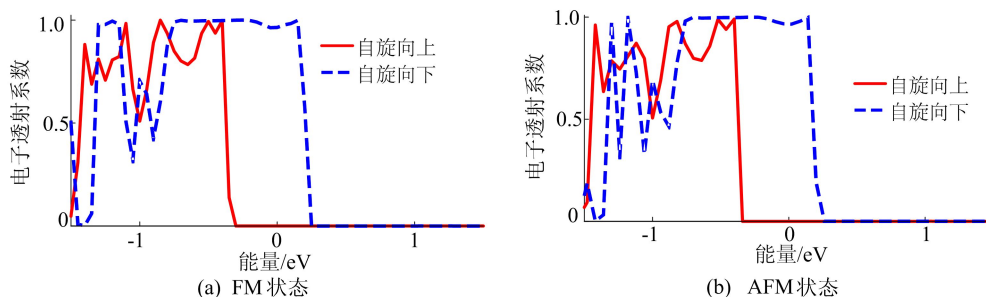


图 4 FM、AFM 状态下电子透射谱

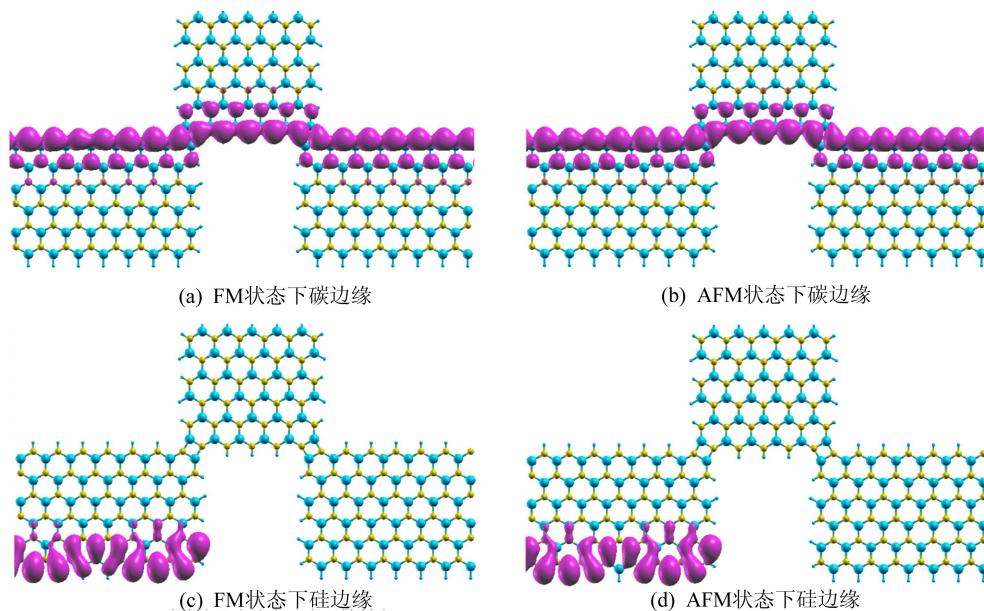


图 5 FM、AFM 状态下在费米能级附近的自旋电子散射态

仅考虑从左电极向右电极的电子透射情况,在铁磁状态下器件模型中的自旋向上电子散射态主要局域在器件一侧的硅边缘处。而自旋向下的电子态则从器件的左端到右端沿着碳边缘延展分布。

在反铁磁状态下,虽然在硅边缘和碳边缘处分布的均为自旋向下的电子态,但是在硅边缘处的电子态依然是局域的,碳边缘处的电子态依然是沿着碳边缘从左到右的延展分布。由上述分析可知,在硅边缘附近分布的电子通道由于器件中心区的扭转操作被隔断,而在碳边缘的电子透射通道并没有被破坏。

因此,即便是在不同磁性状态下,硅边缘的磁性发生了变化,器件依然能够实现相同的自旋过

滤电子运输。

根据式(3)可知,这一器件具有几乎 100% 的自旋极化率,器件在 2 种磁性状态下均能够获得较好的单自旋过滤特性。

本文给出了 2 种磁性状态下器件在费米能级附近的电子散射态分布图,如图 5 所示。

滤电子运输。

2.3 非平衡态下器件的输运性质

为了探究“品”型器件在不同偏压下的自旋过滤稳定性,本文计算其在不同偏压下的电流-电压($I-V$)特性曲线和自旋极化率曲线,如图 6 所示。

对于自旋向下的电子来说,在 $[0, 0.2]$ V 偏压范围内,其透射电流随着偏压值的增大而不断增大。而在 $[0.2, 1.0]$ V 偏压范围内,虽然偏压值仍逐渐增大,但自旋向下电子的透射电流却在 $7 \mu A$ 附近震荡。对于自旋向上的电子,在偏压变化的所有范围内,均没有透射能力。因此,这一器件在全部偏压变化范围内,均能保持极好的自旋极化特性,实现自旋过滤电子运输。

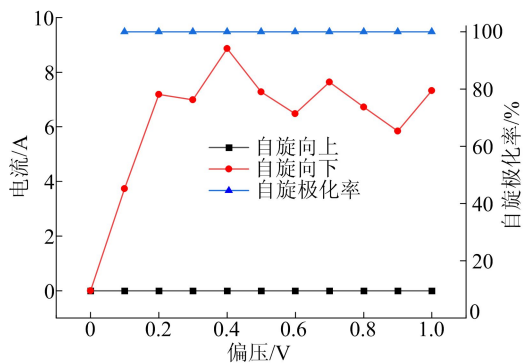


图 6 “品”型器件 I-V 特性曲线和自旋极化率曲线

不同偏压值下器件的自旋极化率 E_{SP} 计算公式为:

$$E_{SP} = \frac{|I_{UP} - I_{DN}|}{|I_{UP} + I_{DN}|} \times 100\% \quad (4)$$

其中: I_{UP} 、 I_{DN} 为自旋向上和自旋向下电子在对应偏压范围内的透射电流值。

根据式(4)可知,在全部偏压变化范围内,器件的自旋极化率曲线基本保持不变,呈现出几乎 100% 的自旋极化率。这表明偏压变化对该器件实现自旋过滤电子运输的影响不大,器件自旋过滤特性的鲁棒性较好。

为了避免选取过大偏压可能对器件电子输运特性产生的其他未知影响,本文在以下计算中选取了器件自旋过滤性质较为稳定的 0.1 V 偏压作为基础偏压进行讨论。本文计算“品”型器件在偏压为 0.1 V 的条件下,栅极电压从 0 变化到 1.0 V 的 I-V 特性曲线如图 7 所示。

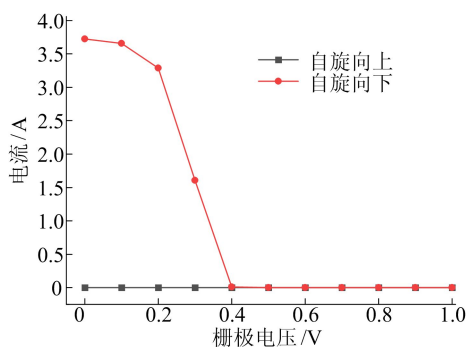


图 7 “品”型器件 0.1 V 偏压条件下栅极电压与内部电流关系

由图 7 可知,在栅极电压从 0 增加到 0.2 V 时,器件均保持着较好的单自旋过滤的导通特性,自旋向下的电流略有减小,自旋向上的电流始终为 0。但当栅压从 0.2 V 增加到 0.5 V 时,器件从左电极到右电极的自旋向下电流则逐渐降低到 0,在栅压从 0.5 V 增大到 1.0 V 时,器件内 2 种

自旋的电流均始终为 0,表明器件栅极电压可以实现对器件电子输运能力进行调控,实现自旋量子器件的开关设计。

2.4 器件的稳定性能分析

由于这一器件的结构是通过“扭转-拼接”操作中心区部分的有限长 ZSiCNR 后形成的,如果拼接处的“碳-硅-碳-硅”四聚体的结构发生变化,那么有可能会对器件的电子透射特性产生较大的影响。考虑到“碳-硅”键键长基本固定这一条件,这一四边形实际可以等效为菱形,变化后的内部角度可以通过菱形几何性质来确定。因此,仅选取并描述下顶角(图中已给出标记 θ)的角度变化即可清楚描述对“碳-硅-碳-硅”四聚体结构的调整情况。本文给出“碳-硅-碳-硅”四聚体下顶角从 80° 变化到 100° 在平衡态下的电子透射系数关系,如图 8 所示。从图 8 可以看出,当下顶角为 89° 时,器件的电子输运性能最好;当角度增大或是减小后,其电子输运性能有所下降;当角度大于 96° 后,器件自旋向下电子的透射系数下降严重。这表明器件形变(角度变化量)超过 6.7% 时,会降低这一器件中电子透射的能力,从而影响器件电学性能。

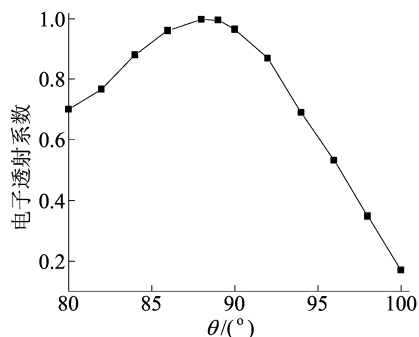


图 8 角度变化与自旋向下电子透射系数关系

3 结 论

本文对将锯齿形碳化硅纳米带中间部分结构在空间上向上平移、再翻转 180° 并与左右电极拼接所构成的“品”型三端异质结器件模型的电子输运特性进行计算。计算结果表明,无论是在铁磁状态还是反铁磁状态下,“品”型三端器件在碳边缘处的通道由于“扭转-拼接”而保留,同时“碳-硅-碳-硅”四聚体结构也保证了碳边缘处磁矩的连续性,而在硅边缘处的通道则由于扭转操作被隔断,这使得器件能够呈现出几乎 100% 自旋极化的电子输运特性。在外加 0~1.0 V 偏压的

条件下,器件内部的自旋极化电流先增大,在偏压大于 0.2 V 后自旋极化电流分布在 $7 \mu\text{A}$ 左右,并且仍能够保持几乎 100% 的自旋极化率。在 0.1 V 偏压的条件下,当外加栅极电压在 0~0.5 V 之间时,器件内电流随着栅极电压的增大而减小。当外加栅极电压大于 0.5 V,三端器件内电流截止,实现了栅极电压对器件电子输运能力的调控。同时,当器件中“碳—硅—碳—硅”四聚体内部角度变化量(压力形变)小于 6.7%,器件内部的电子透射能力几乎不受影响,表明“品”型器件具有一定的结构及电学稳定性。上述研究为未来自旋电子学器件领域中自旋过滤相关器件设计提供了有力的理论依据。

[参 考 文 献]

- [1] WOLF S A, AWSCHALOM D D, BUHRMAN R A, et al. Spintronics; a spin-based electronics vision for the future [J]. *Science*, 2001, 294(5546): 1488-1495.
- [2] HAN W, OTANI Y C, MAEKAWA S. Quantum materials for spin and charge conversion [J]. *Quantum Materials*, 2018, 3(1): 1-16.
- [3] 于笑潇, 资剑, 王兵, 等. 自旋电子学研究的现状与趋势[J]. *科技中国*, 2018(5): 7-10.
- [4] JIANG P, TAO X, HAO H, et al. Tuning a zigzag SiC nanoribbon as a thermal spin current generator[J]. *2D Materials*, 2017, 4(3): 035001.
- [5] 陈兴, 赵晗, 张艳, 等. 具有连续反量子点的石墨烯纳米带中纯自旋流的实现[J]. *物理学报*, 2021, 70(19): 321-328.
- [6] KARUBE S, TEZUKA N, KOHDA M, et al. Anomalous spin-orbit field via the Rashba-Edelstein effect at the W/Pt interface [J]. *Physical Review Applied*, 2020, 13(2): 024009.
- [7] PAI C F, LIU L, LI Y, et al. Spin transfer torque devices utilizing the giant spin Hall effect of tungsten [J]. *Applied Physics Letters*, 2012, 101(12): 122404.
- [8] SONG T, CAI X, TU M W Y, et al. Giant tunneling magnetoresistance in spin-filter van der Waals heterostructures [J]. *Science*, 2018, 360(6394): 1214-1218.
- [9] STEPHEN G M, LANE C, BUDA G, et al. Electrical and magnetic properties of thin films of the spin-filter material CrVTiAl [J]. *Physical Review B*, 2019, 99(22): 224207.
- [10] NETO A H C, GUINEA F, PERES N M R, et al. The electronic properties of graphene [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2009, 81(1): 109.
- [11] MAK K F, LEE C, HONE J, et al. Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor [J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105(13): 136805.
- [12] WU X, XIONG L, FENG Y, et al. The half-metallicity and the spin filtering, NDR and spin Seebeck effects in 2D Ag-doped SnSe₂ monolayer [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2019, 150(6): 064701.
- [13] ZHANG L, CHEN J, ZHENG X, et al. Gate-tunable large spin polarization in a few-layer black phosphorus-based spintronic device [J]. *Nanoscale*, 2019, 11(24): 11872-11878.
- [14] SUN L, LI Y, LI Z, et al. Electronic structures of SiC nanoribbons [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2008, 129(17): 174114.
- [15] LOU P, LEE J Y. Band structures of narrow zigzag silicon carbon nanoribbons [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2009, 113(29): 12637-12640.
- [16] BUTTIKER M, IMRY Y, LANDAUER R, et al. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings [J]. *Physical Review B*, 1985, 31(10): 6207.
- [17] DATTA S. *Electronic transport in mesoscopic systems* [M]. Cambridge, Eng.: Cambridge University Press, 1997.
- [18] ZHENG X, CHEN X, ZHANG L, et al. Perfect spin and valley polarized quantum transport in twisted SiC nanoribbons [J]. *2D Materials*, 2017, 4(2): 025013.
- [19] BREY L, FERTIG H A, SARMA S D. Diluted graphene antiferromagnet [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 99(11): 116802.
- [20] CHAN J A, MONTANARI B, GALE J D, et al. Magnetic properties of polymerized C₆₀: the influence of defects and hydrogen [J]. *Physical Review B*, 2004, 70(4): 041403.

(责任编辑 张 镗)

(上接第 752 页)

- [11] VIARD R, TALBI A, GHOUILA-HOURI C, et al. Magneto-mechanical micro-valve for active flow control [J]. *Sensors and Actuators A(Physical)*, 2020, 316: 112387.
- [12] TOUNSI N, MESTIRI R, KEIRSBULCK L, et al. Experimental study of flow control on bluff body using piezoelectric actuators [J]. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, 2016, 9(2): 828-838.
- [13] 王靖宇, 耿亚, 林惠政, 等. 基于等离子体流动控制的方背式汽车模型减阻研究 [J]. *汽车工程*, 2020, 42(6): 753-758.
- [14] DUCLOUX O, TALBI A, GIMENO L, et al. Self-oscillation mode due to fluid-structure interaction in a micromechanical valve [J]. *Applied Physics Letters*, 2007, 91(3): 034101.
- [15] 师汉民, 黄其柏. *机械振动系统分析、建模、测试、对策: 下* [M]. 3 版. 武汉: 华中科技大学出版社, 2019: 260-268.
- [16] 李晓龙. *固液界面相互作用对微尺度流动与传热影响规律的研究* [D]. 长沙: 国防科技大学, 2019.
- [17] WANG B X, YANG Z G, ZHU H. Active flow control on the 25° Ahmed body using a new unsteady jet [J]. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2019, 79: 108459.

(责任编辑 胡亚敏)