

锯齿形氮化铝纳米带负阻器件电子输运性质研究

黄绛雪, 黄启俊, 何进, 王豪, 常胜

(武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072)

摘要: 低维纳米带材料因为其结构的特异性而呈现出新奇的物理性质. 修饰纳米带的边缘能够调制其电子性质. 本文运用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算方法, 探究了锯齿形氮化铝纳米带(ZAINNR)单边氟化、单边氯化以及单边氢化的电子结构和输运特性. 研究表明: 锯齿型氮化铝纳米带可以通过以上手段实现能带结构的半导体-金属转换. 计算电子输运特性, 我们发现三种边缘修饰的器件均呈现出负微分电阻效应, 其中 AlN-F 器件有最大峰谷电流比(PVCR), 达到了 1.78×10^7 , 是硅烯纳米器件以及黑磷纳米器件的 10^6 倍. 值得一提的是, 相比于 H-AlN-Cove 纳米器件, AlN-F 器件能够在更小的偏压范围内实现高 PVCR. 该结果为锯齿形氮化铝纳米带在低功耗纳米器件中的应用提供了广泛的前景.

关键词: 锯齿形氮化铝纳米带; 电子输运; 负微分电阻效应; 第一性原理

中图分类号: O472

文献标志码: A

DOI: 10.19855/j.1000-0364.2025.022004

Study of electronic transport properties in negative resistance devices based on zigzag aluminum nitride nanoribbons

HUANG Jiang-Xue, HUANG Qi-Jun, HE Jin, WANG Hao, CHANG Sheng

(School of Physics and Technology, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

Abstract: Low-dimensional nanoribbon materials exhibit novel physical properties due to their structural specificities. Modifying the edges of nanoribbons can modulate their electronic properties. In this paper, we investigate the electronic structures and transport properties of zigzag aluminum nitride nanoribbons (ZAINNR) with single-edge fluorination, single-edge chlorination, and single-edge hydrogenation using the fundamental principles based on density functional theory (DFT). It is shown that the semiconductor-to-metal transition of the energy band structure can be achieved by the above methodologies in zigzag aluminum nitride nanoribbons. Calculating the electron transport properties, we found that all three edge-modified devices exhibit negative differential resistance effects, with the AlN-F device having the maximum peak-to-valley current ratio (PVCR) of 1.78×10^7 , which is 10^6 times higher than those of the silicene nanodevice and the black phosphorus nanodevice. It is worth mentioning that the AlN-F device is able to achieve high PVCR in a smaller bias range compared to H-AlN-Cove nanodevice. The results offer a wide range of prospects for the application of serrated aluminum nitride nanoribbons in low-power nanodevices.

Key words: ZAINNR; Electron transport; Negative differential resistance effect; First principles

1 引言

自石墨烯被发现以来, 二维纳米材料因其在

纳米电子学中的前景而受到广泛的关注^[1-3]. 这也引发了研究者探索氮基二维材料的兴趣. 与石墨烯纳米带相比, 此类材料表现出更优异的性能.

收稿日期: 2023-06-28

基金项目: 国家自然科学基金(62074116, 61874079, 81971702); 珞珈青年学者计划

作者简介: 黄绛雪, 女, 湖北襄阳人, 硕士研究生, 主要从事电子科学与技术方向研究.

通信作者: 常胜. E-mail: changsheng@whu.edu.cn; 王豪. E-mail: wanghao@whu.edu.cn

由于氮基材料具有较高的表面积体积比、较高的热稳定性以及高热导率，常用于医学器件、光电子器件以及传感器等^[4-6]。

氮化铝有容易制备，原料丰富、无毒无污染等优点，因此成为近年来的研究热点。Suikong Hark 等人以铝粉和氨为原料，采用气相输运法成功制备了氮化铝纳米片^[7]。此后 Sahin 等人在理论上首次预测了二维氮化铝纳米带的稳定性^[8]。Saurabh Kharwar 等人发现凹边氮化铝纳米带具有金属性，其电子输运呈现出负微分电阻效应^[9]。然而，在实验上制备凹边氮化铝纳米带有一定的难度。因此，研究人员把重点聚焦在边缘修饰的纳米带。这种纳米带在实验上更容易制。Radhakrishnan 等人用全氟聚合物对氮化硼纳米带进行扩展，减小氮化硼纳米带的带隙，得到稳定的氟化氮化硼纳米带^[10]。根据理论研究，边沿修饰可以改变纳米带的电子性质，并使其具有更高的热稳定性和化学稳定性^[11,12]。Lopez 等人研究了氧原子和硫原子修饰锯齿形氮化硼边缘，预测氧原子和硫原子修饰能够改变其电子学性质，使其能带结构转变为金属性^[13]。Ding 等人对氟化硅烯以及氢化硅烯的结构和性能进行了研究，发现施加应力可以调节氟化硅烯的直接带隙的大小，同样施加应力可以使氢化的硅烯间接带隙变成直接带隙^[14]。但实验上制备的硅烯纳米带结构仍不稳定^[15]。氮化铝纳米带的平面结构，使其相较于硅烯纳米带更加稳定。Lu 等人用氧原子修饰扶手椅型氮化铝纳米带实现了能带结构半导体-半金属性的转变^[16]。近年来，研究人员用氢原子和卤素原子修饰纳米带边缘，发现卤素原子修饰比氢原子修饰的氮基纳米带更稳定^[17]。

现阶段，研究人员大多通过双边修饰以及边缘缺陷等方法调制氮化铝纳米带的性质，关于单边修饰的研究鲜有报道。因此本文利用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，探究单边氢化、氟化以及氯化的氮化铝纳米带的电子结构以及电输运性质。

2 模型和方法

本文以宽度为 8 的 ZAINNR 为研究对象，研究单边氟化、单边氯化以及单边氢化锯齿型氮化铝纳米带的电子输运。如图 1 所示，整个器件由左电极、中间散射区、右电极以及过渡区组成。左右电极是半无限长周期性结构，中间散射区包

括若干电极原子作为缓冲层，它使得电极与中心区边界保持物理量的连续。我们用 X 表示修饰 ZAINNR 边缘的原子，X-AlN 表示用 X 原子修饰铝边缘，AlN-X 表示用 X 原子修饰氮边缘。按这种命名方式图 1(a) 中器件可被称为 AlN-X，图 1(b) 中器件可被称为 X-AlN。

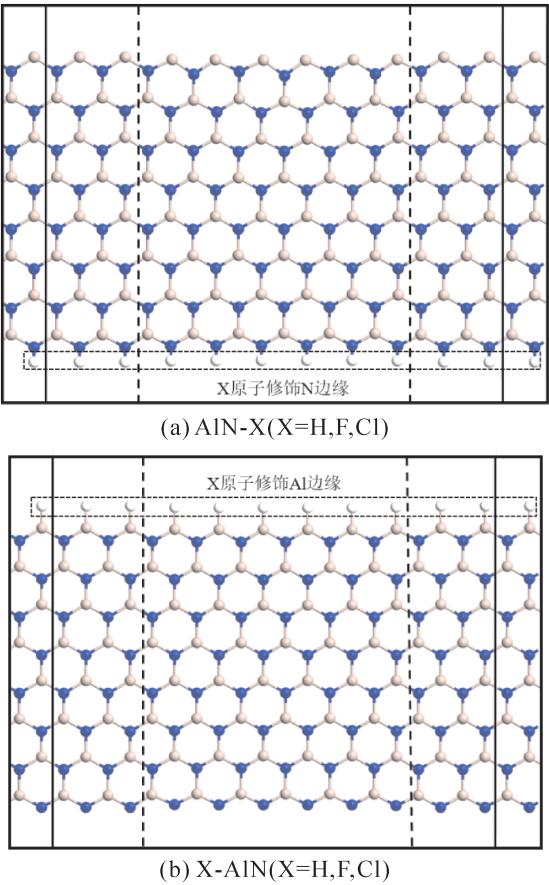


图 1 单边修饰的锯齿形氮化铝纳米带
Fig. 1 Single-sided modified zigzag aluminum nitride nanoribbons

整个计算过程采用基于密度泛函理论和非平衡格林函数的计算程序 Quantum ATK 完成。我们选取(GGA-PBE)来描述电子交换关联泛函，考虑到原子极化的影响，通过对所有原子使用 DZP 基组扩展了波函数。在布里渊区，计算电子输运 K 点采样的选择为 $1 \times 1 \times 50$ ，截断能设置为 70Ry，弛豫计算能量收敛标准为 10^{-5} eV，以达到计算效率和精度的平衡。

通过器件的电流可以由 Landauer 公式计算得到

$$I(V_b) = \frac{2e}{h} \int_{\mu_L}^{\mu_R} [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] T(E) dE \tag{1}$$

式中， e 为电子的电量， h 为普朗克常数， f 为费米

函数, μ_L, μ_R 是左右电极的化学势, $[\mu_L, \mu_R]$ 是电流的能量积分区间, $T(E)$ 为体系的透射系数.

3 结果与讨论

体系的电子结构是研究电子输运特性的基础. 为了便于比较, 我们计算了各个体系的带隙, 发现本征锯齿形氮化铝纳米带有较宽的带隙, 为 3.50 eV, 与先前的研究一致^[9]. 单边的氢化以及氯化都可以让 ZAINNR 实现从半导体到金属的转换.

表 1 边缘修饰氮化铝纳米带的带隙

Structure	E_g
H – AlN – H	3.50 eV
AlN – X (X = H, Cl, F)	Metallic
X – AlN (X = H, Cl, F)	Metallic

为了研究不同原子单边修饰 ZAINNR 电子输运性质, 分别计算了单边氟化、单边氯化以及单边氢化的 IV 曲线. 因为本征 ZAINNR 带隙较大, 电子难以通过纳米带, 从而导致在有限偏压下的通过本征 ZAINNR 电流可以忽略不计, 因此我们没有计算本征 ZAINNR 的电子输运. 我们考虑的偏压范围由 0 到 2V, 这是由于 AlNNR 有较宽的能隙. 由图 2 可知单边修饰的 IV 曲线均表现出负微分电阻现象. AlN – F, Al – Cl, AlN – H 器件的电子输运性质都有相似之处; 同样 AlN – F, Al – Cl, AlN – H 器件也有相似之处. 通过 AlN – F, AlN – Cl, AlN – H 双端器件的电流都在 0.6V 时达到最大值, 通过 AlN – F 器件的电流最大达到 27.94 μ A. 在所加偏压到 1.2V 时, 电流减小到几乎为 0. 偏压增大时, 电流减小. 这表明器件有负微分电阻现象.

为了进一步分析器件负微分电阻现象, 分别计算了其峰谷电流比 (PVCR), 器件的最大电流, 即峰电流 (I_{peak}). 峰电流所对应的偏压为 V_{peak} ; 器件的最小电流, 即谷电流 (I_{valley}), 此时的偏压为 V_{valley} . PVCR 定义为峰电流与谷电流之比, 直接反映了器件负微分电阻现象的强弱.

$$PVCR = I_{peak} / I_{valley} \tag{2}$$

如图 2 所示, AlN – F, Al – Cl, AlN – H 器件的 V_{peak} 都为 0.6V, 所对应的 I_{peak} 分别为 27.94 μ A、26.32 μ A、0.97 μ A; V_{valley} 都为 1.2V, 所对应的 I_{valley} 都接近于 0, 因此 AlN – F 器件的 PVCR

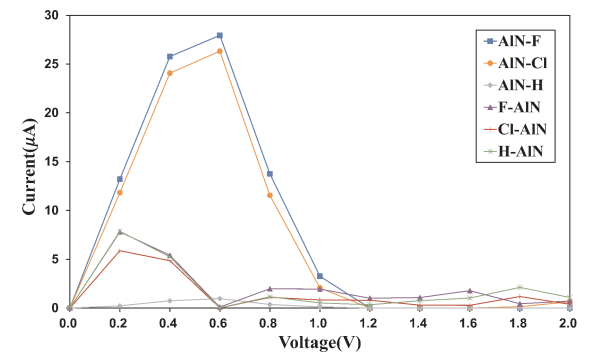


图 2 器件 I – V 曲线
Fig. 2 Current – Voltage (I – V) curves

最大, 为 1.78×10^7 . AlN – Cl, AlN – H 器件的 PVCR 分别为 2.90×10^6 、 6.70×10^5 . 同样的方法我们计算了 F – AlN, Cl – AlN, H – AlN 器件的 PVCR 在表 2, 发现卤素原子单边修饰锯齿型氮化铝纳米带氮边缘时, 得到的 PVCR 更大.

表 2 器件的峰谷电流比

Device	V_{peak}	V_{valley}	PVCR
AlN – F	0.6 V	1.2 V	1.78×10^7
AlN – Cl	0.6 V	1.2 V	2.90×10^6
AlN – H	0.6 V	1.2 V	6.70×10^5
F – AlN	0.2 V	0.6 V	75.37
Cl – AlN	0.2 V	0.6 V	382.88
H – AlN	0.2 V	0.6 V	242.189

电子的输运特性与电子的透射谱密切相关. 为了理解这六种器件的负微分电阻现象, 我们展示了其在 V_{peak} 和 V_{valley} 的透射谱, 其中费米能级设置为 0. 通过双端器件的电流的大小可以通过计算透射曲线在偏压窗口内的积分面积得到^[18]. 图 3 和图 4 分别为不同原子修饰铝原子边缘和氮原子边缘的透射谱.

由图 3 可知, AlN – F, AlN – Cl 器件在偏压为 0.6V 时, 在偏压窗口内有两个投射峰且最大透射系数达到 1, 与能量区间围成的积分面积较大, 因此产生较大的电流. 而 AlN – H 器件在偏压窗口内只有较小的投射峰因此电流较小. 随着偏压的增大, 透射系数减小, 在偏压为 1.2V 时, 三种器件的偏压窗口内的透射系数减小到几乎为 0, 与能量区间围成的面积较小, 产生很小的电流. 因此两个偏压下的电流之比较大, 即 PVCR 较大.

图 4 给出 F – AlN, Cl – AlN, H – AlN 器件在

偏压为 0.2V 时的透射谱，在小偏压窗口内有较小的透射峰，因此电流较小. 当偏压增大到 0.6V 时，透射系数减小到几乎为 0，使得偏压窗口内透射曲线与能量区间的积分几乎为零，电流接近于 0.

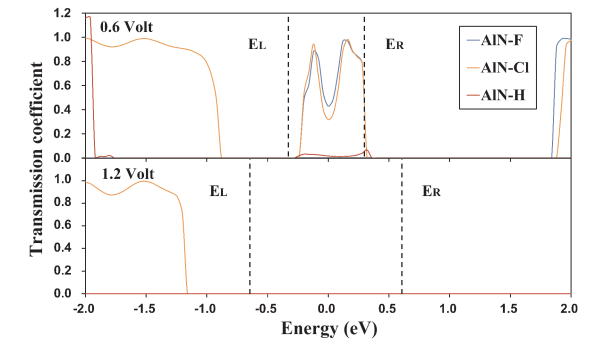


图 3 AlN - F, AlN - Cl, AlN - H 器件在 0.6V 和 1.2V 偏压下的透射谱

Fig. 3 Transmission spectra of AlN - F, AlN - Cl, AlN - H devices at 0.6V and 1.2V

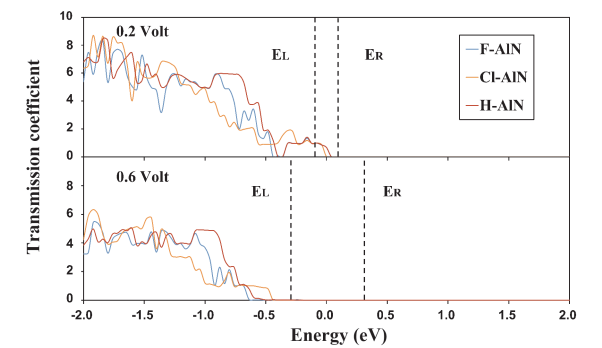


图 4 F - AlN, Cl - AlN, H - AlN 器件在 0.2V 和 0.6V 偏压下的透射谱

Fig. 4 Transmission spectra of F - AlN, Cl - AlN, H - AlN devices at 0.2V and 0.6V

为了进一步分析 AlN - F, AlN - Cl, AlN - H 器件的负微分电阻现象. 图 5 展示了偏压为 0.6V 下, AlN - F, AlN - Cl, AlN - H 三种器件在能量为 0.16 eV 处的透射本征态. 由于在偏压为 1.2V 时, 偏压窗口内的透射系数几乎为零, 该能量区间内器件没有出现本征态分布, 因此我们没有展示 1.2V 时的透射本征态. 图中 AlN - F, AlN - Cl 器件的透射本征态在未修饰的铝原子边缘分布均匀且连续, 这表明入射电子以及波函数能更好地克服接触势垒^[19]从左电极传入右电极, 因此电流较大, 有较大的 *PCVR*. 对于 AlN - H 器件, 透射本征态分布离散且局域于器件左部分, 透射系数很小, 相应的电流较小.

表 3 我们将 AlN - F 器件与现有的纳米带负

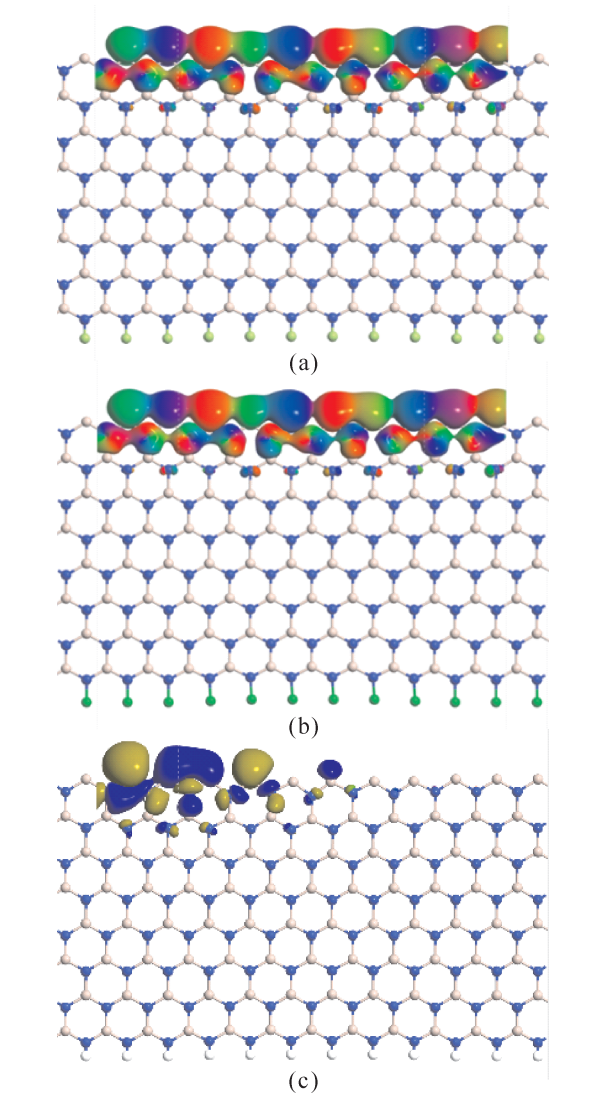


图 5 偏压为 0.6V 下, AlN - F, AlN - Cl, AlN - H 器件的透射本征态

Fig 5 Transmission eigenstates of AlN - F, AlN - Cl, and AlN - H devices at 0.6V

阻器件的 *PVCR* 相比较. 与硅烯纳米带以及黑磷相比, 氮化铝纳米 ZAINNR 具有平面结构, 稳定性更高并且 *PVCR* 是它们的 10^6 倍; 在相同的偏压范围内, AlN - F 器件的 *PVCR* 是磷烯纳米器件的 6×10^2 倍; 与 H - AlN - Cove 器件相比, AlF - F 器件能够在更小的偏压范围内 (0.2 - 0.6V) 实现高 *PVCR*.

4 结 论

本文通过基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 讨论了六种单边修饰的 ZAINNR. 从计算结果可以看出, 单边修饰的 ZAINNR 都是金属性. 由此构建 ZAINNR 双端器件, 从计算结果看出设计器件的 I - V 曲线均有负微分电阻现象. 单边修

表 3 不同器件对比

Table 3 Comparison of different devices

Nanodevices	V_{peak}	V_{valley}	PVCR
Silicene nanoribbon ^[20]	0.3 V	0.7 V	3.09
Black phosphorus ^[21]	0.7 V	0.9 V	9
Phosphorene nanoribbon ^[22]	0.2 V	0.6 V	2.75×10^4
H – AlN – Cove nanodevice ^[9]	0.3 V	1.2 V	1.23×10^7
AlN – F(Our work)	0.2 V	0.6 V	1.78×10^7

饰氮原子边缘时, *PVCR* 更大, 其中 AlN – F 器件的 *PVCR* 达到 1.78×10^7 , 相比于其他纳米器件, AlN – F 器件能在更小偏压范围内实现更高的 *PVCR*. 这一结果为基于 ZAINNR 的负阻器件的设计提供了理论指导, 这对未来基于锯齿形氮化铝纳米带的振荡器、整流器、存储器以及快速开关器件的设计有重要的意义.

致 谢 本文的数值计算仿真得到了武汉大学超级计算中心的支持和帮助.

参考文献:

[1] Ye S Z, Lv Y W, Tang Z R, *et al.* Wave – function symmetry mechanism of quantum – well states in graphene nanoribbon heterojunctions [J]. *Phys. Rev. Appl.*, 2019, 12: 044018.

[2] Wan H, Xiao X B, Ang Y S. Edge doping engineering of high – performance graphene nanoribbon molecular spintronic devices [J]. *Nanomaterials*, 2021, 12: 56.

[3] Zhou F Z, Kang D W. First principle calculations on tuning the charge transport properties of C₃B nanoribbon device by manipulating the edge state [J]. *Physica E*, 2023, 147: 115600.

[4] Kharwar S, Sangeeta S, Neeraj K J. Selective edge – hydrogenated zigzag boron nitride nanoribbons for giant magnetoresistance and rectifying behavior [J]. *IEEE T. Electron. Dev.*, 2021, 68: 5894.

[5] Bacaksiz C, Sahin H, Ozaydin H D, *et al.* Hexagonal AlN: dimensional – crossover – driven band – gap transition [J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 91: 085430.

[6] Wu M H, Wu X J, Pei Y, *et al.* Inorganic nanoribbons with unpassivated zigzag edges: half metallicity and edge reconstruction [J]. *Nano. Res.*, 2010, 4: 233.

[7] Zhang X Z, Liu Z, Hark S K. Synthesis and optical characterization of single – crystalline AlN nanosheets [J].

Solid State Commun., 2007, 143: 317.

[8] Sahin H, Cahangirov S, Topsakal M, *et al.* Monolayer honeycomb structures of group – IV elements and III – V binary compounds: first – principles calculations [J]. *Phys. Rev. B*, 2009, 80: 155453.

[9] Kharwar S, Singh S, Kaushik B K. Hydrogenated cove – edge aluminum nitride nanoribbons for ultrascaled resonant tunneling diode applications: a computational DFT study [J]. *Nanotechnology*, 2023, 34: 245709.

[10] Radhakrishnan S, Das D, Samanta A, *et al.* Fluorinated h – BN as a magnetic semiconductor [J]. *Sci. Adv.*, 2017, 3: e1700842.

[11] Krishna M. S, Singh S. Fluorinated zigzag ZnO nanoribbons for negative differential resistance – based nanoelectronic devices: first – principles investigation [J]. *J. Electron. Mater.*, 2022, 51: 3288.

[12] Ambacher O. Growth and applications of group III – nitrides [J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1998, 31: 2653.

[13] Lopez – Bezanilla A, Huang J S, Terrones humberto, *et al.* Boron nitride nanoribbons become metallic [J]. *Nano Lett.*, 2011, 11: 3267.

[14] Ding Y, Wang Y L. Electronic structures of silicene fluoride and hydride [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2012, 100: 083102.

[15] Jackson K. A, Horoi H, Chaudhuri I, *et al.* Unraveling the shape transformation in silicon clusters [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93: 013401.

[16] Lu D B, Song Y L, Huang X Y, *et al.* Electronic and optical properties of the O – terminated AlN nanoribbons: first – principles study [J]. *Micro. Nanostruct.*, 2016, 91: 31.

[17] Wang Y L, Ding Y, Ni J. Fluorination – induced half – metallicity in zigzag boron nitride nanoribbons: First principles calculations [J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 193407.

[18] Zhang W X, Basaran C, Ragab T. Impact of geometry on transport properties of armchair graphene nanoribbon heterojunction [J]. *Carbon*, 2017, 124: 422.

[19] Ning F, Chen S Z, Zhang Y, *et al.* Interfacial charge transfers and interactions drive rectifying and negative differential resistance behaviors in InAs/graphene van der Waals heterostructure [J]. *Appl. Surf. Sci.*, 2019, 496: 143629.

[20] Singh S, Sarkar A D, Singh B, *et al.* Electronic and transport behavior of doped armchair silicene nanoribbons exhibiting negative differential resistance and its FET performance [J]. *RSC Adv.*, 2017, 7: 12783.

- [21] Srivastava P K, Hassan Y, Gebredingle Y, *et al.* Resonant tunnelling diodes based on twisted black phosphorus homostructures [J]. *Nat. Electron.*, 2021. 4: 269.
- [22] Fotoohi S. Tunable rectification and negative differential resistance induced by asymmetric doping in phosphorene nanoribbon [J]. *Phys. Lett. A*, 2019, 383: 369.