

锯齿型 GeSe 纳米带的边缘态对整流效应的调控研究

王芳^{a,b}, 张亚君^a, 郭彩霞^{a,c}, 王天兴^d, 郝首亮^a

(河南师范大学 a.电子与电气工程学院;b.河南省光电传感集成应用重点实验室;

c.增材智能制造河南省工程实验室;d.物理学院,河南 新乡 453007)

摘要:锯齿型硒化锗(ZGeSeNR)是准一维纳米结构的材料,由于其具有特殊的维度特性及优异的电子特性而成为研究热点.本研究使用密度泛函理论和非平衡格林函数结合的方法,系统地研究了边缘结构对锯齿形硒化锗纳米带的电子结构及输运性质的影响.能带结构图显示边缘裸露的 ZGeSeNR、P 和 S 原子钝化边缘的 ZGeSeNR 具有导电的金属性质,用 F, Cl, H 原子和 OH⁻ 根离子钝化处理边缘后的 ZGeSeNR 则表现出半导体性质.基于不同边缘结构的 ZGeSeNR 构建金属-半导体界面的两电极器件模型,计算出的器件电压-电流曲线证实了边缘态对整流效应的调控作用.特别是裸露-H 原子钝化的锯齿型 GeSe 纳米带(H-ZGeSeNR)器件中的整流比可达到 8.7×10^5 .改变该器件结构中散射区内钝化原子的数目来调控制流特性,最高可得到 1.1×10^7 的整流比.研究结果对设计 ZGeSeNR 纳米整流器提供了重要参考.

关键词: ZGeSe 纳米带;边缘钝化;整流效应;电子输运

中图分类号: O488

文献标志码: A

文章编号: 1000-2367(2024)01-0108-08

自单层石墨烯于 2004 年首次被发现后^[1],单层二维材料由于具有独特的电子特性受到了人们的广泛关注.单层石墨烯是使用透明胶带从石墨中剥离出来的,独特的二维平面结构赋予石墨烯半整数量子霍尔效应并且通过理论计算和电子器件可以获得的超高载流子迁移率、高导热系数、高比表面积和最高的机械强度等优良性能.石墨烯很快风靡材料科学^[2].对二维材料来说,它不仅具有卓越的晶体结构,而且因为原子厚度的原因二维纳米材料还表现出许多优异的电子特性,如整流效应^[3]、负微分电阻效应^[4-5]、开关效应^[6-7]、场效应特性^[8]、自选滤波特性^[9]、气敏性能^[10-11]等.这些电子特性当中,整流效应被广泛应用于实际工作当中,其中包括逻辑电路以及分子存储器.虽然在 PN 结^[12]、场效应晶体管^[13]和各种分子器件^[14]中均可以观察到整流效应,但是由于 PN 结的整流器的大尺寸^[14]、场效应晶体管的低工作速度^[15]和分子二极管的高发热^[16]都限制了器件向小尺寸发展的趋势.而二维材料的原子尺度和优异的电子特性^[17],更适合制作小尺寸的整流器.然而,石墨烯的零带隙^[18]、磷烯和硅烯的不稳定性^[19]、过渡金属二卤代元的低载流子迁移率^[20]等限制了这些材料在纳米电子器件中的应用.

半导体材料 GeSe 作为黑磷的等电子类似物^[21],具有更稳定的几何结构和各向异性的电子性质.作为一种层状材料,GeSe 由沿着 z 轴的弱范德瓦耳斯力相互分隔的双层板构成.特别地,GeSe 存在两种非等效的平

收稿日期: 2022-12-01; **修回日期:** 2023-01-17.

基金项目: 国家自然科学基金(62075057;62075058);河南省青年自然科学基金(212300410185);河南省高等学校重点科研项目(21A510005).

作者简介: 王芳(1972-),女,河南新乡人,河南师范大学教授,博士,博士生导师,研究方向为光纤传感,E-mail:ffdd1012@163.com.

通信作者: 张亚君(2000-),女,河南驻马店人,河南师范大学硕士研究生,研究方向为低维半导体材料输运性质,E-mail:zyj2925@163.com.

引用本文: 王芳,张亚君,郭彩霞,等.锯齿型 GeSe 纳米带的边缘态对整流效应的调控研究[J].河南师范大学学报(自然科学版),2024,52(1):108-115.(Wang Fang,Zhang Yajun,Guo Caixia,et al.Regulation of the rectification effect of the edge states of zigzag GeSe nanoribbons[J].Journal of Henan Normal University(Natural Science Edition),2024,52(1):108-115.DOI:10.16366/j.cnki.1000-2367.2022.12.01.0002.)

面内晶体方向:扶手椅和之字形.目前,学者基于 GeSe 各向异性的物理特性提供了许多光电性能调控的新方法,如掺杂^[22]、边缘钝化等.边缘修饰是将端基附加到平面上来调节能带结构的.尤其在二维纳米材料中只有很少的原子层,因此,平面内附着基团极易影响电荷分布及电子离域,从而达到改变带隙的目的.钝化是一种调整其单层电子结构和输运特性的有效方法,常见的钝化基团有—OH, —H, —O, 卤素和有机基团等.针对不同二维纳米材料在基团可调性及实现方式是不同的.石墨烯结构非常稳定,可以在苛刻的条件下进行化学修饰,如强氧化剂制备氧化石墨烯、强氧化腐蚀性试剂制备氟化石墨烯.然而,硅烯和锗烯是极其不稳定的.因此,它们是由 CaSi₂ 和 CaGe₂ 与离子液体反应后进行改性,形成稳定的硅烷、锗烷等衍生物.对于单边钝化硒化锗来说,可通过钝化来改变其电子特性,调节其负微分电阻等参数^[23].因此,通过有效的边缘钝化的方法克服 GeSe 原始材料存在的缺陷,有望给带整流功能装置的设计带来契机.本文搭建了一个一边裸露,一边边缘钝化的单层 GeSe 纳米电子器件模型,来探讨钝化对 GeSe 纳米电子器件电流-电压特性的影响.

1 计算模型和方法

本文的模型如图 1 所示,由左电极、右电极和中心散射区构成.锯齿形纳米带的条带宽度(N)是由锯齿形二聚体链沿垂直于纳米带轴线方向的数量定义(图 1(e)).以 $N=6$ 的锯齿形硒化锗纳米带(ZGeSeNR)为研究对象,研究了宽度为边缘不对称钝化对电子输运性质的影响.纳米带左边不进行边缘修饰,纳米带的右边分别使用 H, Cl, F, OH⁻, P 和 S 边缘钝化.为了简单起见,将左边不进行边缘钝化右边使用 H 原子进行上下钝化的 ZGeSeNR 记为 H-ZGeSeNR, 类似地其余钝化分别记为 Cl-ZGeSeNR, F-ZGeSeNR, OH-ZGeSeNR, P-ZGeSeNR 和 S-ZGeSeNR.左电极和右电极分别由一个可重复的裸露 ZGeSe 和边缘钝化的 ZGeSe 晶胞单元组成.

基于密度泛函理论和非平衡格林函数的 ATK 软件来对模型进行计算.所有原子采用 DZP 基函数来描述,交换关联势采用局域密度近似来进行运算.能带结构和电流在 x , y 和 z 轴方向的布里渊区采样分别用 $1 \times 1 \times 21$ 和 $1 \times 1 \times 400$ 的网格.为了实现计算时间和精度之间的平衡,将截止等效平面波设置在 150×13.60 eV,在 x 和 y 方向设置了 3 nm 的真空层来避免周期性结构和纳米带层之间的影响.对器件模型的每个原子进行优化,使其最大绝对力小于 0.1 eV/nm,电子自恰迭代能量差收敛到 0.01 eV/nm.电子温度为 300 K.系统中的格林函数 G^R 可由 $(\epsilon^+ S - H)G^R(E) = I$, 得出,其中, H 为体系哈密顿矩阵, S 为电极与散射区的重叠矩阵, I 为单位矩阵,而 $\epsilon^+ = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} E + i\delta$. 电极与散射区的相互作用表现为自能 $\sum_{L/R}^R(E)$, 则延迟格林函数 $G_M^R(E) = [\epsilon^+ S_M - H_M - \sum_L^R(E) - \sum_R^R(E)]^{-1}$. 于是,可以根据 Fisher-Lee's 的关系得出双探针模型系统的电导 $G = (2e^2/h) \text{Tr}[\Gamma_L G_M^{R+} \Gamma_R G_M^R] = (2e^2/h) T(E, V)$, 其中 $\Gamma_{L/R} = i[\sum_L^R(E) - \sum_R^{R+}(E)]$, 称为加宽函数,其中 h 普朗克常量, e 电子量数, $T(E, V)$ 为透射系数.当施加偏压时,采用 Landauer-Büttiker 方程在能量偏置窗口 -0.5 eV 到 $+0.5$ eV 内对传输函数 $T(E, V)$ 进行积分,即可获得计算结构的电流 $I(V_b) = (2e/h) \int T(E, V_b) [f_L(E, V_b) - f_R(E, V_b)] dE$, 其中, V_b 是偏压, $T(E, V_b)$ 为透射系数, $f_L(E, V_b)$ 和 $f_R(E, V_b)$ 为费米-狄拉克分布函数.可根据定义能量 E 的函数 $T(E, V) = \text{Tr}[\Gamma_L(E, V) G_R(E, V) \Gamma_R(E, V) G_A(E, V)]$ 来求解 E , 其中, G_R 和 G_A 表示散射区的延迟和高级格林函数, Γ_L 和 Γ_R 表示左、右电极的耦合矩阵.通过计算形成能(E_f) 来判断边缘钝化后 GeSe 纳米带的稳定性.计算公式如下 $E_f = E_{\text{total}} - E_{\text{bare}} - E_{(N/P/S/Cl/OH/H)}$, 其中, E_{total} 为边缘钝化 GeSe 纳米带的总能量, E_{bare} 为裸露的 GeSe 纳米带的能量, $E_{(N/P/S/Cl/OH/H)}$ 分别为钝化基团 N, P, S, Cl, OH⁻ 和 H 的能量.

2 结果与讨论

为了计算边缘钝化 ZGeSeNRs 的几何稳定性,计算了 F, Cl, OH⁻, H, P 和 S 钝化后纳米带的形成能,如表 1 所示.显然,所有计算的 ZGeSeNRs 的均为负值,表明这些化学键在 ZGeSeNRs 边缘的形成是一个放热

反应,与裸露情况相比,上述双边钝化 ZGeSeNRs 更加稳定.为了研究钝化原子 F,Cl,OH⁻ 和 H 对锯齿形 GeSe 纳米带的影响,对全部结构进行能带计算,结果见图 2.

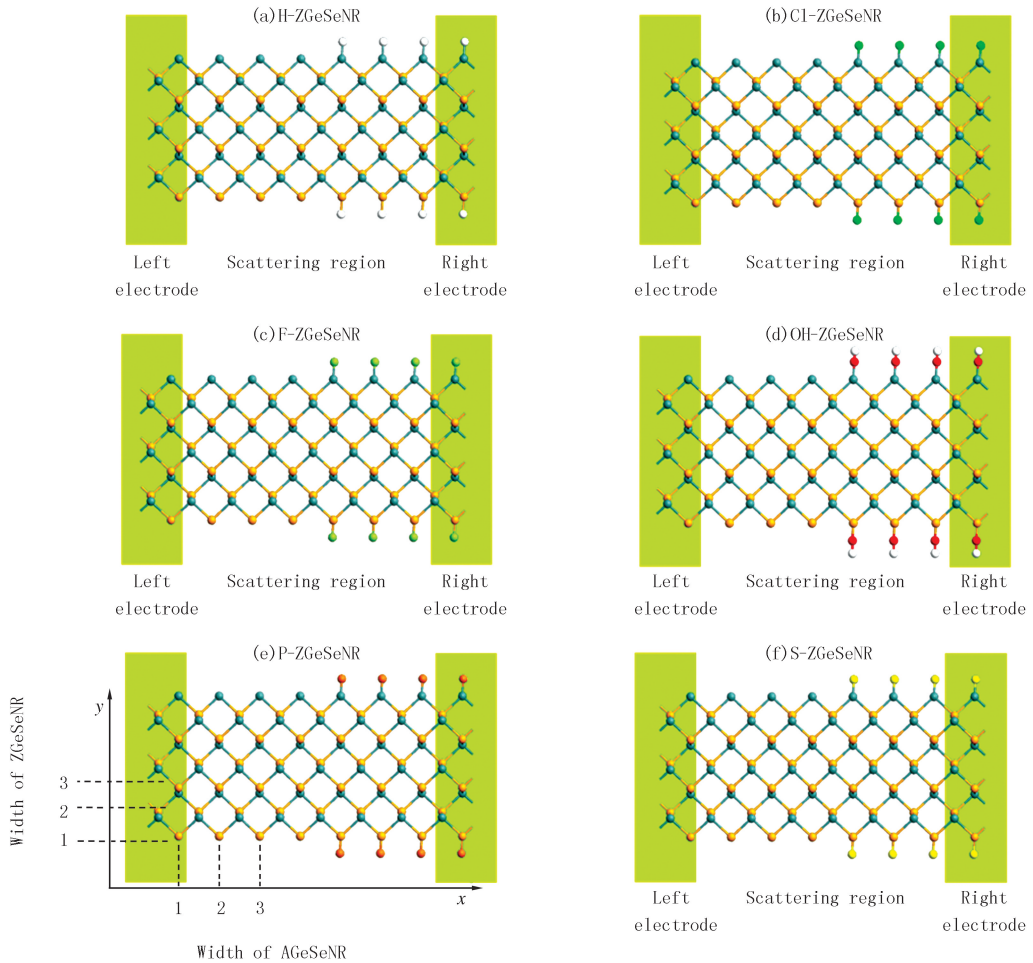


图1 电子输运计算模型

Fig.1 The electronic transport calculation model

表 1 不同边缘钝化的 ZGeSeNR 的 E_f

Tab. 1 E_f of ZGeSeNR with different edge passivation

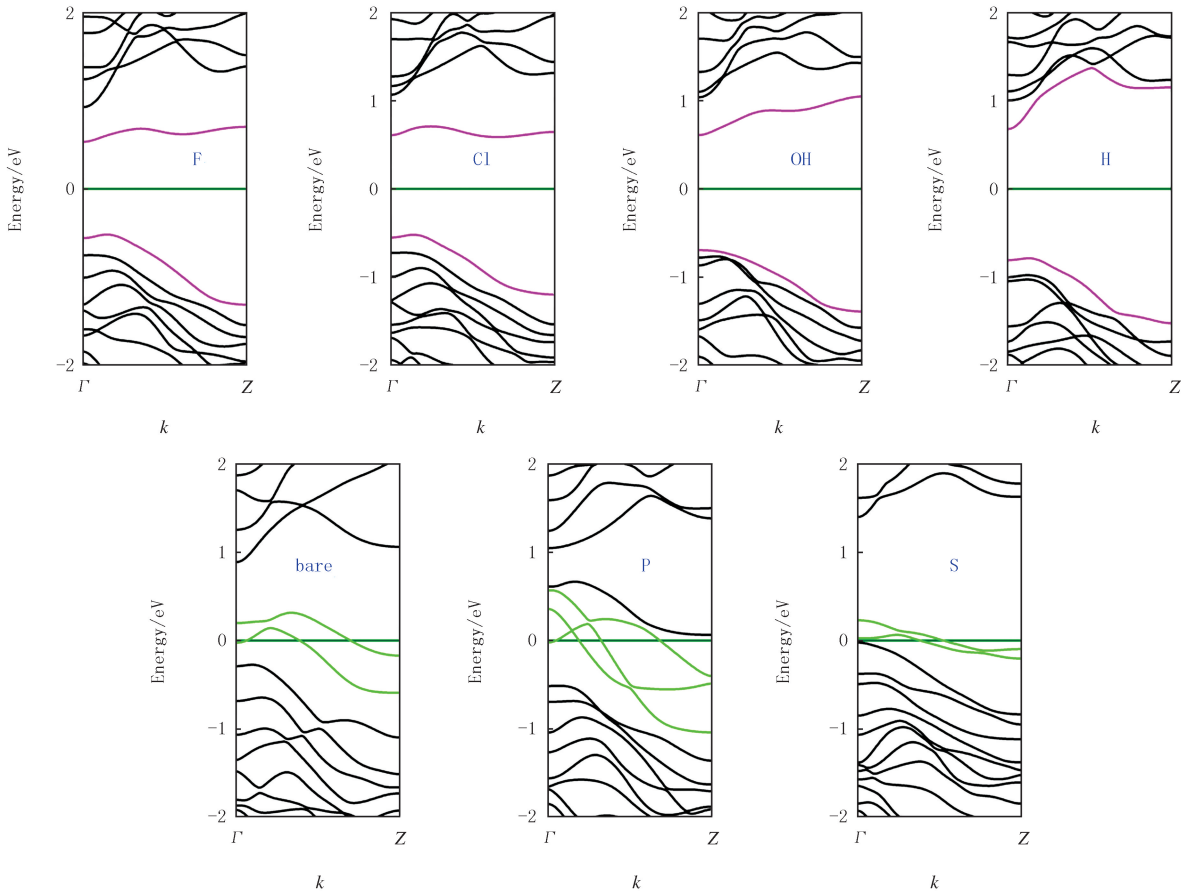
	F	Cl	OH	H	P	S
E_f / eV	-5.04	-3.51	-4.17	-3.77	-6.66	-3.93

对于原始的锯齿形 GeSe 纳米带来说所具有金属性质,可以从图 2 看到存在 2 条穿过费米能级的能带. ZGeSeNR 的边缘原子在 P 和 S 原子分别钝化之后,分别存在 3 条和 2 条能带穿过费米能级的现象,则结果表示 ZGeSeNR 经过 P,S 原子钝化表现出金属性质.然而,当采用 F,Cl,OH⁻ 和 H 来对锯齿形 GeSe 纳米带进行双边钝化后,能带图中出现了间接带隙,转变为半导体性质.其中, H 原子钝化产生的带隙最大,为 1.49 eV.F 和 Cl 原子边缘钝化 ZGeSeNR 产生间接带隙,为 1.09 eV 和 1.16 eV.OH⁻ 钝化的 ZGeSeNR 价带最大值(VBM)和导带最小值(CBM)均位于 Γ 点,具有 1.30 eV 的直接带隙.

2.1 电流-电压特性分析

为了研究对于 ZGeSe 的左侧边缘裸露、右侧分别钝化 H,Cl,F,OH⁻,P 和 S 不同原子对电子输运性质的影响的研究.一般情况下,不对称的界面接触中通常可以出现整流效应.图 3 中的 H,Cl 和 F 原子对纳米带右侧的双边缘钝化产生的 $I-V$ 曲线清晰地展示了偏压作用下电流不对称现象.H-ZGeSeNR 在 $-0.5 \sim 0.3$ V 范围的偏置区内电流几乎被完全抑制,但在施加正向偏压至 $0.3 \sim 0.4$ V 后电流增大.从而清楚地看到了电

流-电压曲线的非对称,产生明显的整流特性.Cl-ZGeSeNR 有与 H-ZGeSeNR 相似的曲线.其次,F-ZGeSeNR 和 OH-ZGeSeNR 在 $-0.5 \sim -0.4$ V 和 $0.4 \sim 0.5$ V 范围内电流增加,在 $-0.4 \sim 0.4$ V 范围内电流趋向于零.而 P-ZGeSeNR 和 S-ZGeSeNR 的曲线则是先增加再减少.当对器件模型施加偏压时, I - V 曲线表现的非对称现象会引起整流效应.整流比(R_R)定义 $R_R(V) = |I(+V)/I(-V)|$ 描述整流效应是否表现良好.为了更好地观察器件的整流特性,分别计算了 H,Cl 和 F 钝化后器件进行整流比计算,如图 3 所示.其中 H-ZGeSeNR 的整流比在 0.4 V 电压下达到了峰值,最大值达到了 8.7×10^5 ,整流效果显著.但是在 Cl-ZGeSeNR 的电流-电压曲线总体的电流大于 H-ZGeSeNR,所以,计算出来的整流比数值不是很大.在 0.4 V 时整流比达到最大值 52.F-ZGeSeNR 的平均 R_R 大于 OH-ZGeSeNR 的平均 R_R ,最大的整流比为 22.而 OH-ZGeSeNR 的最大整流比为 3.由于 P-ZGeSeNR 和 S-ZGeSeNR 的负偏置区电流很大,所以平均 R_R 非常小.因此可以得出这样的结论:钝化原子的种类在锯齿形硒化锗纳米带的整流效应中起着决定性作用,并且纳米带左边裸露、右边钝化原子使硒化锗纳米带呈现半导体性质,构成金属-半导体结,形成肖特基势垒,表现出整流效应.



其中费米能级设置为0.

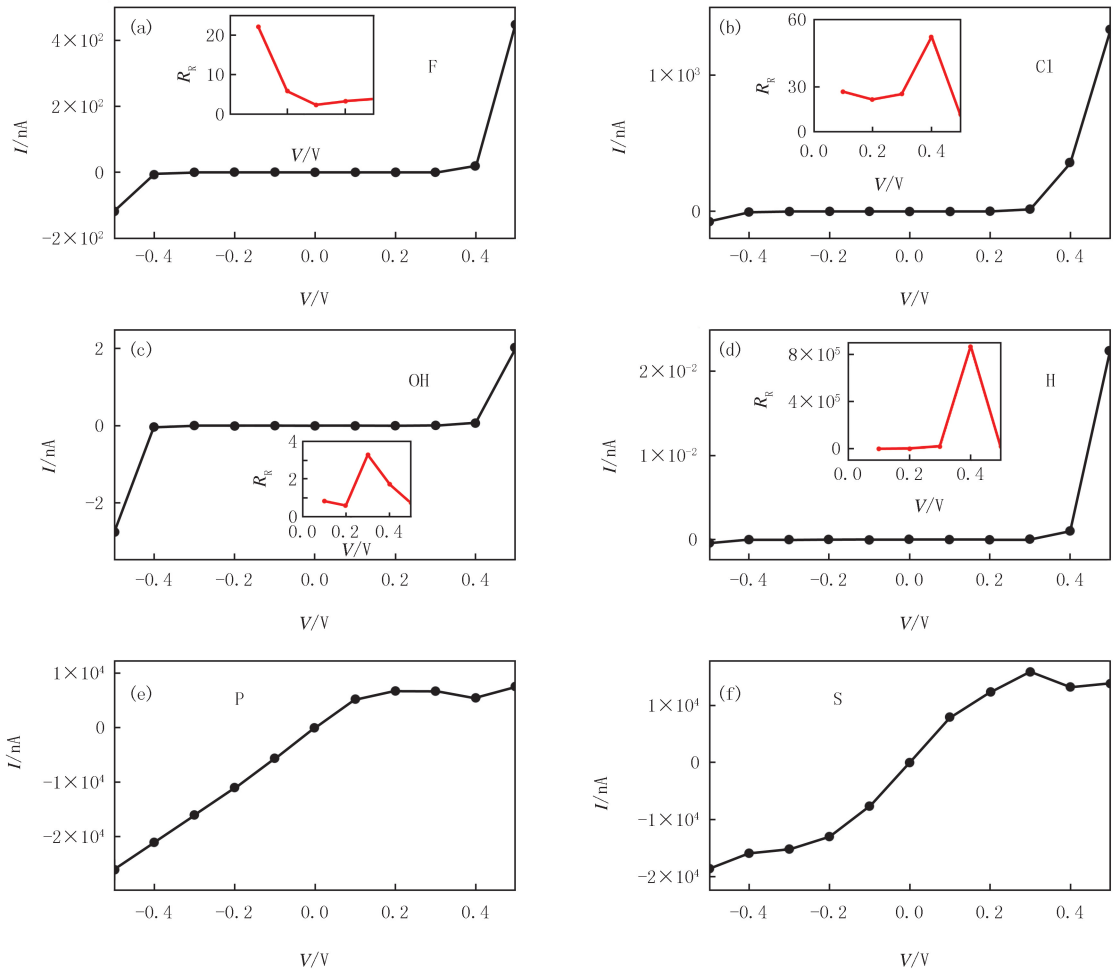
图2 F, Cl, OH-, H, P和S原子钝化以及裸露的ZGeSeNR的能带结构图

Fig.2 Energy band structure of F, Cl, OH-, H, P and S atomic passivation and bare ZGeSeNR

2.2 电子输运机理分析

电子输运和透射谱密切相关,因此分析了透射谱变化规律来研究钝化对电子输运特性的影响.以 Cl-ZGeSeNR 为例说明,图 4 中显示了不同偏压以及 0 V、+0.4 V 和 -0.4 V 偏压时左、右电极能带结构.因钝化和金属-半导体接触所形成的子带都用颜色来标注.这些子带在器件的传导和整流效应的产生是至关重要的.零偏压下,在 -0.3 V 处出现了一个传输峰,在相邻的其他能量区域传输系数基本为 0.但由于在 0 V 的偏压下偏压窗口为 0,则传输峰并不位于传输窗口内,电流为 0.对器件施加 0.4 V 时,左电极能带上移、右电极能带下移,直到出现 0.4 V 的偏压窗口.如图 4(b) 所示,偏压窗口存在透射峰.左右电极由于钝

化和金属-半导体结形成的子带之间存在一个匹配区域,在偏压窗口的范围内出现透射峰.透射峰和偏压窗口出现重叠区域,则有电流值.另外,在 $0.6\sim 0.8$ V 内存在透射峰,但不位于偏压窗口内,因此对电流没有贡献.当施加 -0.4 V 的偏压时,左右电极能带上下移动,出现 0.4 V 的偏置窗口,如图 4(c) 所示.但透射谱在偏压窗口内没有透射峰.在 $0.2\sim 0.3$ V 内有透射峰,但由于不在偏压窗口范围内,则对于电流无贡献.在其他能量的区域透射系数基本为零.器件所产生的电流的大小是与透射谱与偏压窗口的重叠面积密切相关的.因此, -0.4 V 时电流几乎为 0, 0.4 V 的偏压时出现电流,造成不对称行为而引起高性能的整流效应.



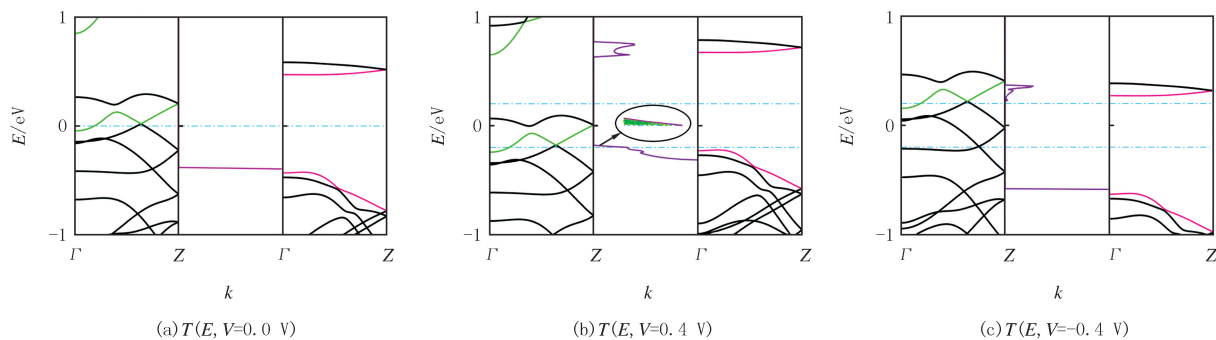
(a) H-ZGeSeNR; (b) Cl-ZGeSeNR; (c) F-ZGeSeNR; (d) OH-ZGeSeNR; (e) P-ZGeSeNR; (f) S-ZGeSeNR.

图3 ZGeSeNR 的 I - V 曲线和对应的整流比

Fig. 3 I - V curves and corresponding RR of ZGeSeNR

2.3 散射区钝化原子数目的变化

为了观测改变散射区钝化原子数目对整流效应的影响,本文以 H-ZGeSeNR 为例进行剖析,对改变散射区的原子数目而得到电流-电压图进行分析.为了简单起见,在钝化上下边缘散射区有 1 个裸露的 Ge 原子和 3 个 H 原子钝化的 Ge 原子的 ZGeSeNR 称为 H-GeSe-M1N3,类似地其余纳米带被简称为 H-GeSe-M2N3, H-GeSe-M3N3, H-GeSe-M3N1, H-GeSe-M3N2, Cl-GeSe-M3N1 和 F-GeSe-M3N1. 图 5(a) 中展示了 H-GeSe-M3N3, H-GeSe-M2N3 和 H-GeSe-M1N3 的电流-电压特性曲线,可以观察到明显的不对称行为,故判断有整流效应.其中, H-GeSe-M3N3 在 0.4 V 时有最大整流比为 8.7×10^5 , H-GeSe-M2N3 和 H-GeSe-M1N3 均在 0.5 V 时有最大整流比,分别为 1.9×10^6 和 1.4×10^6 .



费米能级设置为0, 蓝色虚线表示偏压窗口, 绿色实线红色实线分别表示左右电极单元因钝化和金属-半导体接触所产生的子带, 紫色实线表示透射谱。

图4 左右电极的能带图和对应的透射谱

Fig.4 Relationship between transmission spectrum and band structure of electrode

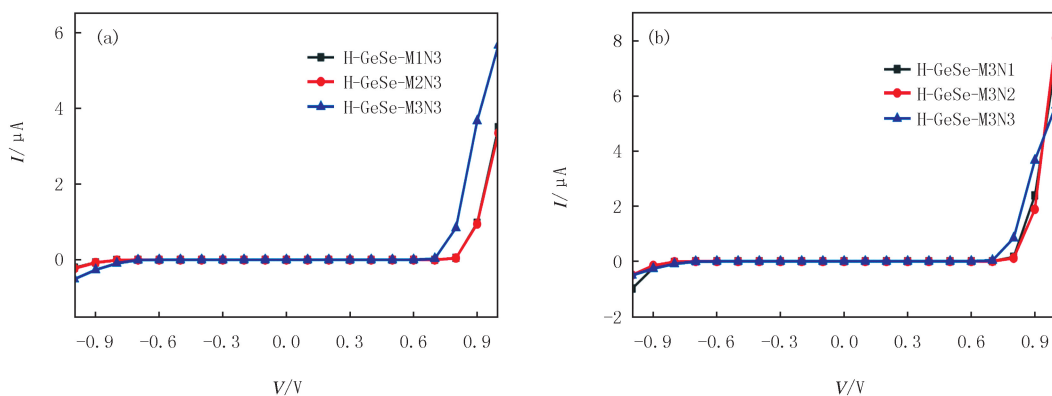


图5 不同散射区的锯齿形GeSe纳米带I-V曲线

Fig.5 I-V curves of ZGeSeNRs with different number of atoms in the scattering region

图 5 (b) 展示了 H-GeSe-M3N3, H-GeSe-M3N2 和 H-GeSe-M3N1 的电流-电压特性曲线, 整流比分别为 8.7×10^5 、 5.1×10^6 和 1.1×10^7 . 可以推测, 散射区两边钝化和非钝化的 Ge 原子的数目不对称能增加电流的不对称性和整流比. 在图 6 中绘制了 Cl-GeSe-M3N1 和 F-GeSe-M3N1 的电流电压图, 整流比分别为 218 和 17.

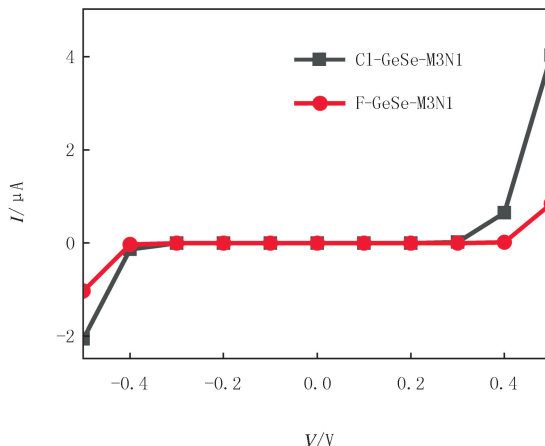


图6 不同散射区的锯齿形GeSe纳米带I-V曲线

Fig.6 I-V curves of ZGeSeNRs with different number of atoms in the scattering region

3 结 论

以钝化 ZGeSeNR 为研究对象, 用密度泛函理论和非平衡格林函数对其能带结构和输运性质进行研究. 其中 F, Cl, H 原子和 OH⁻ 根离子钝化 ZGeSeNR 表现半导体性质, P 和 S 原子钝化边缘的

性质进行研究. 其中 F, Cl, H 原子和 OH⁻ 根离子钝化 ZGeSeNR 表现半导体性质, P 和 S 原子钝化边缘的

ZGeSeNR 具有金属性质.实验结果表明,一边裸露、一边钝化的 ZGeSe 纳米电子器件可以产生整流效果.而且这种结构产生的整流现象受到钝化原子类型和散射区钝化原子的数目的影响.其中,H-GeSe 得到的最大整流比为 1.1×10^7 .该结果为开发具有高整流效应的电子器件提供了研究方向.

参 考 文 献

- [1] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
- [2] 杨卫霞, 林雪玲, 张贺翔, 等. Mo 掺杂 In_2O_3 电子结构和光学性质的第一性原理计算[J]. *河南师范大学学报(自然科学版)*, 2021, 49(4): 47-52.
YANG W X, LIN X L, ZHANG H X, et al. Electronic structures and optical properties of Mo doped In_2O_3 : the first-principles calculations [J]. *Journal of Henan Normal University(Natural Science Edition)*, 2021, 49(4): 47-52.
- [3] HAN Z K, CHANG Y, ZHANG B Y, et al. Ferroelectric modulated rectification and photoelectric properties of PEDOT/PZT/NSTO P-I-N heterojunctions[J]. *Ceramics International*, 2022, 48(16): 24114-24118.
- [4] 柳福提, 张淑华, 程翔, 等. B、N 掺杂 4-ZGNR 电子运输性质的理论计算[J]. *河南师范大学学报(自然科学版)*, 2019, 47(2): 36-40.
LIU F T, ZHANG S H, CHENG X, et al. Theoretical calculation of electronic transport properties of 4-ZGNR doped with B/N atom[J]. *Journal of Henan Normal University(Natural Science Edition)*, 2019, 47(2): 36-40.
- [5] BASTANI P, MOHSENI S M, JAMILPANAH L, et al. Interface-induced negative differential resistance and memristive behavior in Gr/MoSe₂ heterostructure[J]. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2022, 33(9): 6403-6410.
- [6] SOLOMKIN F Y, SAMUNIN A Y, ZAITSEVA N V, et al. Feasibility of using chromium as a switching material for CrSi₂[J]. *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2021, 15(4): 678-682.
- [7] SMITH S, LLINÁS J P, BOKOR J, et al. Negative differential resistance and steep switching in Chevron graphene nanoribbon field-effect transistors[J]. *IEEE Electron Device Letters*, 2018, 39(1): 143-146.
- [8] XIAO Z X. Graphene antidot nanoribbon tunnel field-effect transistor[J]. *Micro & Nano Letters*, 2022, 17(8): 169-174.
- [9] VATANKHAHAN A, MOVLAROOY T. Modulating spintronic properties of nitrogen passivated borophene nanoribbons[J]. *Materials Science and Engineering: B*, 2022, 281: 115744.
- [10] LIU X H, WU L A, YU X A, et al. In-situ growth of graphene films to improve sensing performances[J]. *Materials*, 2022, 15(21): 7814.
- [11] 崔佳宝, 毛婷婷, 陈俊霞, 等. C₃N₄/ZnO 复合材料可见光下的甲醛光电气敏性能[J]. *河南师范大学学报(自然科学版)*, 2020, 48(2): 66-72.
CUI J B, MAO T T, CHEN J X, et al. Visible light induced photoelectric gas-sensing of C₃N₄/ZnO composites for formaldehyde[J]. *Journal of Henan Normal University(Natural Science Edition)*, 2020, 48(2): 66-72.
- [12] BAUMGARTNER C, FUCHS L, COSTA A, et al. Supercurrent rectification and magnetochiral effects in symmetric Josephson junctions [J]. *Nature Nanotechnology*, 2022, 17(1): 39-44.
- [13] GAYDUCHENKO I, XU S G, ALYMOV G, et al. Tunnel field-effect transistors for sensitive terahertz detection[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 543.
- [14] PARK J, BELDING L, YUAN L, et al. Rectification in molecular tunneling junctions based on alkanethiolates with bipyridine-metal complexes[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2021, 143(4): 2156-2163.
- [15] FALINA S, SYAMSUL M, RHAFFOR N A, et al. Ten years progress of electrical detection of heavy metal ions (HMIs) using various field-effect transistor(FET) nanosensors: a review[J]. *Biosensors*, 2021, 11(12): 478.
- [16] ZHAO L F, ROH K, KACMOLI S, et al. Thermal management enables bright and stable perovskite light-emitting diodes[J]. *Advanced Materials*, 2020, 32(25): 2000752.
- [17] TZENG Y, JHAN C Y, WU Y H. Effects of pyrolysis on high-capacity Si-based anode of lithium ion battery with high coulombic efficiency and long cycling life[J]. *Nanomaterials*, 2022, 12(3): 469.
- [18] NOVOSELOV K S, FAL'KO V I, COLOMBO L, et al. A roadmap for graphene[J]. *Nature*, 2012, 490(7419): 192-200.
- [19] YAN S C, SONG H Z, WAN L F, et al. Hydroxyl-assisted phosphorene stabilization with robust device performances[J]. *Nano Letters*, 2020, 20(1): 81-87.
- [20] AHMED S, YI J B. Two-dimensional transition metal dichalcogenides and their charge carrier mobilities in field-effect transistors[J]. *Nano-Micro Letters*, 2017, 9(4): 50.
- [21] GUO C X, HAO S L, WANG F, et al. Tuning the electronic structures and anisotropic transport behaviors of GeSe monolayer by substitutional doping[J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2021, 36(6): 065020.
- [22] ZHAO Y F, LI X Z, LI H H, et al. Modulation of the electronic properties and photocatalytic performance of black phase monolayer GeSe

by noble metal doping[J].New Journal of Chemistry,2021,45(34):15378-15385.

[23] GUO C X,HAO S L,WANG T X.The negative differential resistance behaviors of zigzag GeSe nanoribbons with unilateral edge passivation via hydrogen,fluorine and chlorine[J].Journal of Electronic Materials,2023,52(1):320-326.

Regulation of the rectification effect of the edge states of zigzag GeSe nanoribbons

Wang Fang^{a,b}, Zhang Yajun^a, Guo Caixia^{a,c}, Wang Tianxing^d, Hao Shouliang^a

(a. College of Electronic and Electric Engineering; b. Henan Key Laboratory of Optoelectronic Sensing Integrated Application;
c. Henan Engineering Laboratory of Additive Intelligent Manufacturing; d. School of Physics,
Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

Abstract: Zigzag germanium selenide (ZGeSeNR) nanoribbons are quasi-one-dimensional nanostructured materials that are hotly debated because of their exceptional dimensional properties and excellent electronic properties. In this paper, the effect of edge structure on the electronic structure and transport properties of serrated germanium selenide nanoribbons in a systematic way is investigated by using a combination of density general function theory and nonequilibrium Green's functions. The energy band structure illustrates that ZGeSeNR with bare edges, ZGeSeNR with P and S atoms passivated on the edges have metallic properties that are conductive, while ZGeSeNR with edges passivated with F, Cl, H atoms and OH-ions exhibit semiconducting properties. A two-electrode device model for the metal-semiconductor interface is constructed based on ZGeSeNR with different edge structures, and the calculated voltage-current curves of the device confirm the modulating effect of the edge states on the rectification effect. In particular, rectification ratios of up to 8.7×10^5 can be achieved in sawtooth GeSe nanoribbon (H-ZGeSeNR) devices with bare-H atomic passivation. By varying the number of passivated atoms in the scattering region of the device structure, a rectification ratio of up to 1.1×10^7 can be obtained. This provides an important reference for the design of ZGeSeNR nano-rectifiers.

Keywords: zigzag germanium selenide nanoribbon; edge passivation; rectification; electronic transport

[责任编辑 杨浦 刘洋]