

合肥研究院在二维铁电隧道结研究方面取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6991.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

合肥研究院在二维铁电隧道结研究方面取得进展。近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员郑小宏课题组在二维铁电隧道结的量子输运研究中取得新进展，采用密度泛函理论+非平衡格林函数方法计算了石墨烯/BiP范德瓦尔斯异质结构的二维铁电隧道结的输运性质，实现了623%的电致电阻比率。相关结果以Realizing giant tunneling electroresistance in two-dimensional graphene/BiP ferroelectric tunnel junction为题目发表在Nanoscale上。

铁电隧道结由于存在电致电阻效应而在非易失性存储器中具有重要的应用潜力，目前研究最多的是利用金属或半导体作为两端电极，具有钙钛矿结构的铁电层作为中心散射区的三维铁电隧道结。这类隧道结中，由于两端电极和中心区界面处的电荷累积导致的退极化效应，铁电层不能做得太薄，这导致三维铁电隧道结难以满足器件尺寸最小化的要求。二维材料由于本身就只有原子层厚度，利用二维铁电材料构造铁电隧道结将可以极大地降低铁电隧道结存储器的尺寸，因此受到人们广泛关注。理论学家已经预测了一大批二维铁电材料，例如：第四主族硫化物(SnS, SnSe)、第五主族元素构成的类黑磷结构(BiP)以及类硅烯结构(SbN)等，甚至在实验上已经制备出了具有垂直面内极化的二维铁电材料In₂Se₃。然而，二维铁电隧道结的电致电阻效应如何，是否优于三维铁电隧道结还需深入研究。

为此，郑小宏课题组采用第一性原理密度泛函理论结合非平衡格林函数方法计算了具有二维范德瓦尔斯异质结构(石墨烯/BiP)的二维铁电隧道结的输运性质。结果发现，通过在左电极的石墨烯层中掺入B原子，在右电极的石墨层中掺入N原子，可以获得623%的电致电阻比率(TER)，达到了三维铁电隧道结的电致电阻比率。根据之前的研究工作，三维铁电隧道结的电致电阻比率大概在300%到800%范围内。分析发现，所得的高电致电阻比率来自于左右电极显著不同的屏蔽效应以及由此导致的铁电反转前后隧穿势垒高度的重大变化。结果表明，二维铁电材料在构造二维铁电隧道结、实现巨电致电阻效应以及铁电存储方面具有重要的应用潜力。

该项工作得到国家自然科学基金资助，所有计算均在中科院超算中心合肥分中心完成。

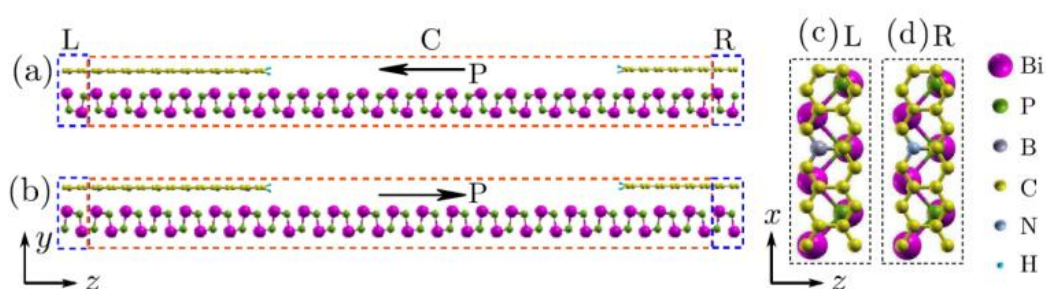


图1.二维石墨烯/BiP铁电隧道结示意图。(a)BiP为左极化情况;(b)BiP为右极化情况。左/右电极是B/N掺杂的石墨烯/BiP范德瓦尔斯垂直异质结构，中间运输通道是单层2D铁电BiP。(c)和(d)分别是左电极(L)和右电极(R)的超单胞俯视图。

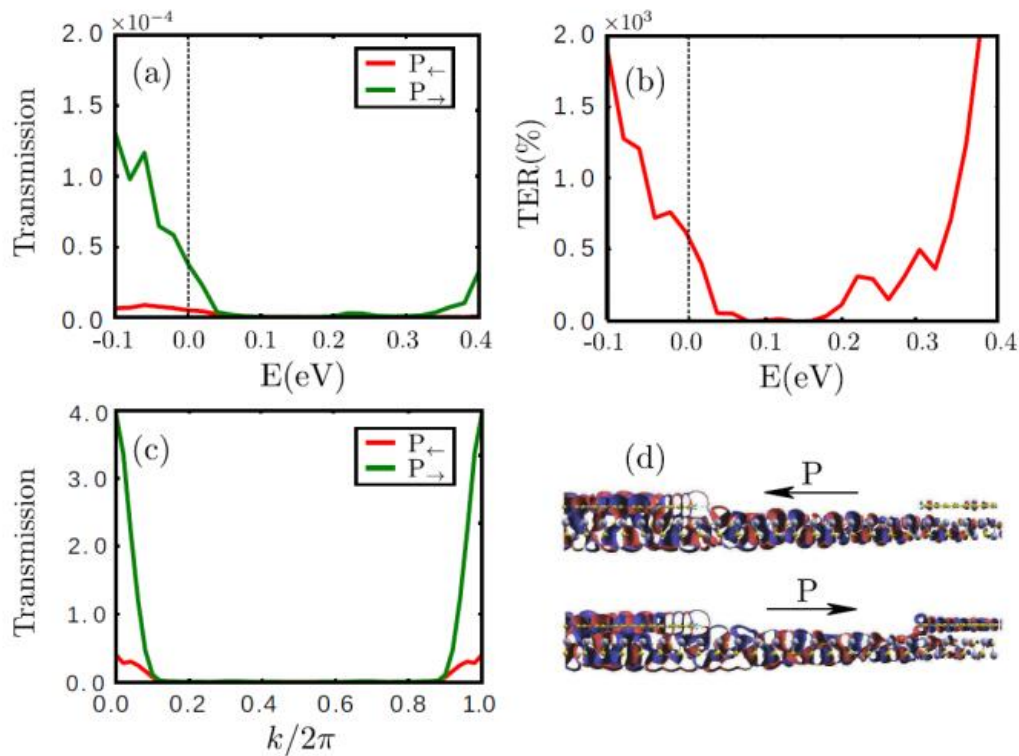


图2. (a)BiP处于两种极化方向下的透射函数;(b)TER比率随能量的关系;(c)费米能级处的透射函数在k空间的分布情况;(d)两种极化方向下散射态分布($E=0$ ， $k=0$)。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发