合肥研究院在垂直面外极化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/8106.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！

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DFT+NEGF方法计算了石墨烯/In_2Se_3
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10^8%的电致电阻比率。相关结果以*Giant tunneling electroresistance in two-dimensional ferroelectric tunnel junctions with out-of-plane ferroelectric polarization* 为题发表在*Physical Review B* 上。铁电隧道结（FTJs）使用铁电材料作为中心隧穿势垒，金属或半导体作为电极，由于其在非易失性存储器件中的潜在应用，已在实验和理论上得到广泛研究。隧穿电致电阻（TER）比率是表征FTJs数据存储性能的一个非常重要的参数。到目前为止，关于如何设计具有很大TER比率的高性能FTJs已有许多研究。但是，大多数注意力仍集中在采用三维（3D）铁电材料薄膜作为隧道势垒的3D FTJs上。众所周知，由于表面上的电荷积累，用于观察自发极化的3D铁电材料的临界厚度存在限制，这与器件小型化的要求相矛盾。因此，如何减小铁电薄膜的临界厚度是高性能FTJs的进一步发展中的关键问题。近年来，铁电材料研究的一个新兴方向是对二维（2D）铁电材料的研究，这为构造具有原子厚度的器件提供了天然的良好选择。如果可以采用2D铁电材料来构造具有大TER比的高性能FTJs，那么它将大大减小FTJs器件的尺度。实际上，在FTJs中2D铁电材料的应用近年来也已经引起科研人员广泛的关注。为此，郑小宏课题组基于具有面外极化的二维铁电材料的两个表面具有不同功函数的特点设计了具有范德瓦尔斯垂直异质结构（石墨烯/In_2Se_3）的2D
FTJs。通过密度泛函理论结
合非平衡格林函数方法计算，获得了1×10^8%的巨大TER比率，这比目前大多数3D
FTJs的TER比率都要高。原因在于In_2Se_3层两个表面的功函数之间存在较大差别（约2.396 eV），而石墨烯的功函数与其中一个表面的功函数接近。因此，当石墨烯与其不同的表面接触时，石墨烯将表现出向In_2Se_3转移或不转移电子，从而使得In_2Se_3
表现出导电和不导电两种不同的状态。相关研究表明，对于具有面外铁电极化的2D铁电材料，可以通过仅考虑功函数来方便地设计高性能2D FTJs。同时也表明，二维铁电材料，特别是具有面外极化的铁电材料，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。

论文链接

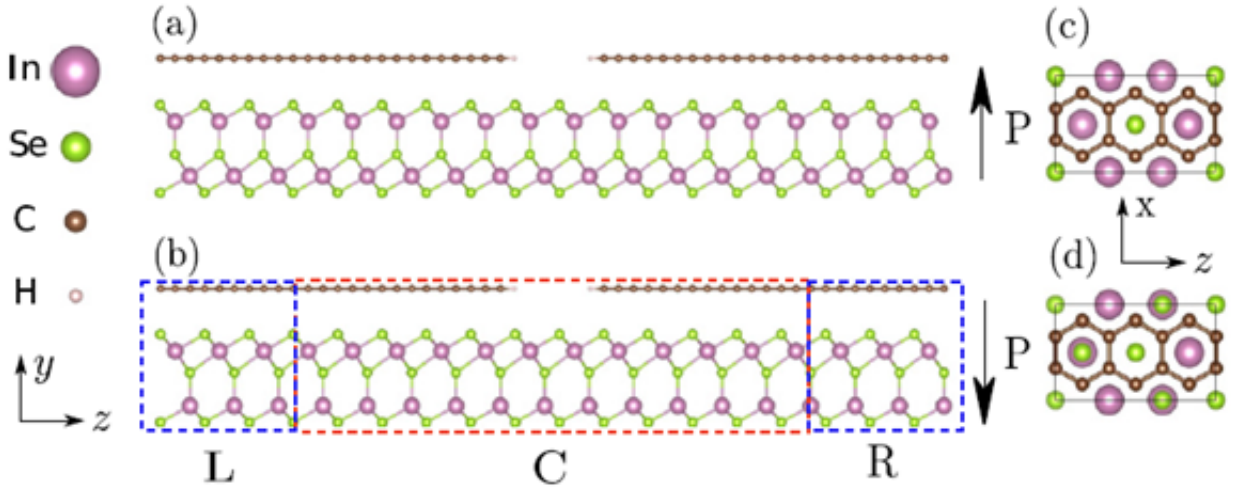


图1.二维石墨烯/In_2Se_3铁电隧道结示意图。(a)In_2Se_3为极化向上情况；(b)In_2Se_3为极化向下情况。左/右电极是石墨烯/In_2Se_3范德瓦尔斯垂直异质结构，中间输运通道是单层2D铁电In_2Se_3层。(c)和(d)分别是左电极(L)和右电极(R)的超单胞俯视图。

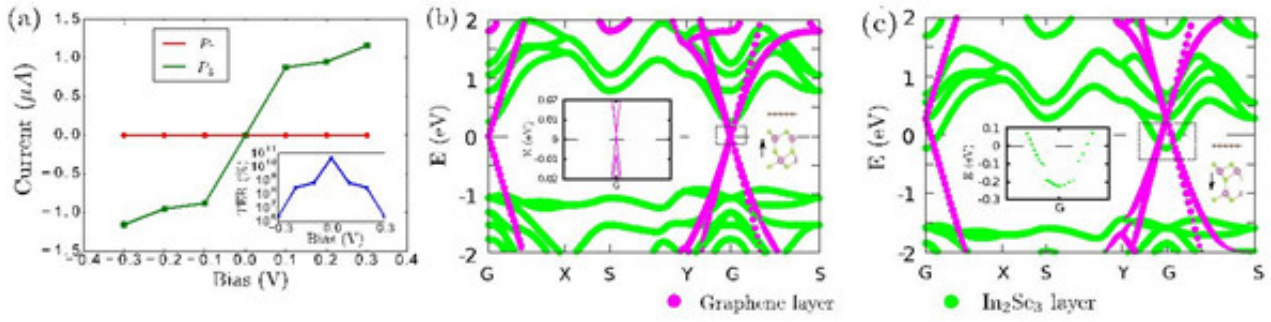


图2.（a）两种铁电极化方向下的I-V曲线，插图为低偏压下的电致电阻比率；（b）铁电极化方向向上时的能带结构；（c）铁电极化方向向下时的能带结构。

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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转发