**物理学院吕劲参与申报“2019年陕西高等学校科学技术奖励”项目公示信息**

**项目名称：二维材料的界面性质和器件的量子输运性能研究**

**完成单位：陕西理工大学、北京大学**

**完成人：潘峰、郭颖、任亚杰、徐永生、孟豪、姚彬彬、吕劲**

**一、项目简介**

此次申报的成果是在陕西省教育厅专项科研计划项目《铋烯的界面性质以及器件的输运性质》（17JK0138）的资助下完成的，属于物理学基础理论的研究范围。

采用第一性原理计算了类石墨烯二维(2D)材料的界面性质。系统的研究了硅烯、锗烯、锡烯、蓝磷烯、黑磷烯、砷烯、铋烯、单层(ML) GaN、ML MoS2等2D材料与金属形成异质结后的界面性质，包括界面原子结构变化、能带结构、电子态密度分布、界面势垒的大小和形成原因分析；构建2D半导体器件原理结构，用零门压零偏压下器件局域态密度分析器件的垂直和水平界面的特性，研究肖特基势垒的大小和对量子输运性质的影响；讨论分析降低或者消除肖特基型接触界面的方法。硅烯、锗烯和锡烯的能带特点为具有狄拉克锥或者类似狄拉克锥结构，可用无质量的狄拉克费米子描述电子特点，本征带隙过小，但是硅烯在氢化和挖孔以后、锡烯在考虑自旋轨道耦合(SOC)效应以后都可以打开明显的带隙；2D半导体材料(蓝磷烯、黑磷烯、砷烯、铋烯、单层(ML) GaN和ML MoS2)是延续摩尔定律将器件尺寸缩小到亚10nm的最佳沟道材料。但是在形成器件时与金属电极易形成肖特基型接触的水平界面，通过插层法（在界面处插入石墨烯或者BN）或者用二维材料(石墨烯)做电极法可以有效的降低或者消除掉肖特基型势垒。

采用量子输运算法模拟研究了二维半导体器件的电子结构和量子输运性质。半氢化硅烯的基态表现为铁磁性半导体，构建了半氢化硅烯FET，器件电流自旋极化过滤效率通过门压控制可达到100%；硅烯纳米网能隙大小由孔大小和孔间硅链数决定，最高可达到0.68 eV，构建了单门硅烯纳米网场效应管，计算了器件的电流转移曲线，结果明显优于其它高级Si FET和碳纳米管器件FETs参数值。

**二、 代表性论文**

[1] **Ying, Guo,** **Feng Pan**, Meng Ye, Yangyang Wang, Yuanyuan Pan, Xiuying Zhang, Jingzhen Li, Han Zhang and **Jing Lu**. Interfacial properties of stanene–metal contacts. *2D Mater.*, 2016. 3, 35020.

[2] **Ying, Guo,** **Feng Pan**,Meng Ye, Xiaotian Sun, Yangyang Wang, Jingzhen Li, Xiuying Zhang, Han Zhang, Yuanyuan Pan, Zhigang Song and **Jing Lu**. Monolayer Bismuthene-Metal Contacts: A Theoretical Study. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2017, 9, 23128.

[3] **Ying Guo**, **Feng Pan**, **Yajie Ren**, **Binbin Yao**, Chuanghua Yang, Meng Ye, Yangyang Wang, Jingzhen Li, Xiuying Zhang, Jiahuan Yan, Jinbo Yangbe and **Jing Lu**. n- and p-type ohmic contacts at monolayer gallium nitride–metal interfaces. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 24239 – 24249.

[4] Yangyang Wang, Jingzhen Li, Junhua Xiong, Yuanyuan Pan, Meng Ye, **Ying Guo**, Han Zhang, Ruge Quhe and **Jing Lu**. Does the Dirac cone of germanene exist on metal substrates? *Phys.Chem.Chem.Phys.,* 2016, 18, 19451.

[5] Yangyang Wang, Meng Ye, Mouyi Weng, Jingzhen Li, Xiuying Zhang, Han Zhang **Ying Guo**, Yuanyuan Pan, Lin Xiao, Junku Liu, Feng Pan, **Jing Lu**. Electrical Contacts in Monolayer Arsenene Devices. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2017, 9, 29273.

[6] Xiuying Zhang, Yuanyuan Pan, Meng Ye, Ruge Quhe, Yangyang Wang, **Ying Guo**, Han Zhang, Yang Dan, Zhigang Song, Jingzhen Li, Jinbo Yang, Wanlin Guo and **Jing Lu**. Three-layer phosphorene-metal interfaces. *Nano Res.*, 2018, 11(2): 707–721

[7] Jingzhen Li, Xiaotian Sun, Chengyong Xu, Xiuying Zhang, Yuanyuan Pan, Meng Ye, Zhigang Song, Ruge Quhe, Yangyang Wang, Han Zhang, **Ying Guo**, Jinbo Yang, Feng Pan and **Jing Lu**. Electrical contacts in monolayer blue phosphorene devices. *Nano Research* 2018, 11(4): 1834–1849.

[8] Han Zhang, Meng Ye, Yangyang Wang, Ruge Quhe, Yuanyuan Pan, **Ying Guo**, Zhigang Song, Jinbo Yang, Wanlin Guo and **Jing Lu**, Magnetoresistance in Co/2D MoS2/Co and Ni/2D MoS2/Ni junctions. *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2016, 18, 16367.

[9] Shiqi Liu, Jingzhen Li, Bowen Shi, Xiuying Zhang, Yuanyuan Pan, Meng Ye, Ruge Quhe, Yangyang Wang, Han Zhang, Jiahuan Yan, Linqiang Xu, **Ying Guo**, Feng Pan, and **Jing Lu**. Gate-tunable interfacial properties of in-plane ML MX2 1T’-2H heterojunctions. *J. Mater. Chem. C*, 2018, 6, 5651-5661.

[10] Yuanyuan Pan, Yangyang Wang, Meng Ye, Ruge Quhe, Hongxia Zhong, Zhigang Song, Xiyou Peng, Dapeng Yu, Jinbo Yang, Junjie Shi and **Jing Lu**. Monolayer Phosphorene-Metal Contacts. *Chem. Mater.* 2016, 28, 2100−2109.

[11]**Feng Pan**, Ruge Quhe, Qi Ge, Jiaxin Zheng, Zeyuan Ni, Yangyang Wang, Zhengxiang Gao, Lu Wang and **Jing Lu**. Gate-induced half-metallicity in semihydrogenated silicene, *Physica E*, 2014, 56:43.

[12]**Feng Pan**, Yangyang Wang, Kaili Jiang, Zeyuan Ni, Jianhua Ma, Jiaxing Zheng, Ruge Quhe, Junjie Shi, Jinbo Yang, Changle Chen and **Jing Lu**. Silicene Nanomesh, Scientific Reports, 2015, 5:9049.

[13] **Yongsheng Xu, Binbin Yao** and Qiliang Cui, Co-doped AlN nanowires with high aspect ratio and high crystal quality. *RSC Adv.*, 2016, 6, 113204.

[14] **Yongsheng Xu, Binbin Yao** and Qiliang Cui. Quantum tunneling of magnetization in GaN:Mn nanoparticles. *RSC Adv.*, 2016, 6, 7521.

[15] **Hao Meng**, Xiuqiang Wu and **Yajie Ren**. Peculiar long-range supercurrent in superconductor-ferromagnet-superconductor junction containing a noncollinear magnetic domain in the ferromagnetic region. *Journal of Applied Physics*, 2015,117, 023903.

**三、主要完成人情况**

1.郭颖：副教授，工作单位，陕西理工大学。项目的总体设计和组织实施。利用第一性原理计算了考虑自旋轨道耦合效应以后锡烯、铋烯与体金属接触的界面特性；研究了ML GaN FET器件的界面性质。参与研究了锗烯、黑磷烯、蓝磷烯、砷烯和ML MoS2等2D材料与金属形成异质结后的界面性质，包括界面原子结构变化、能带结构、电子态密度分布、界面势垒的大小和形成原因分析。代表论文[1-9]为本研究内容的主要成果。

2.潘峰：副教授，工作单位，陕西理工大学。采用第一性原理计算了半氢化硅烯、硅烯纳米网的电子结构，构建了半氢化硅烯自旋过滤器件和硅烯纳米网场效应管，计算了器件的输运性质。代表论文 [11]、[12]为本研究内容的主要成果。

3.任亚杰：教授，工作单位，陕西理工大学。参与完成论文[3]，作为通讯作者与孟豪共同完成论文[15]。

4.徐永生：讲师，工作单位，陕西理工大学。实验研究了氮化镓:锰纳米粒子磁化的量子隧穿效应；发现了一维AlN:Co纳米线优良的光磁特性，这些性能对于扩大AlN基的半导体具有非常大的价值，并且将有利于在自旋电子学中操纵和集成这类器件。代表论文 [13]、[14] 为本研究内容的主要成果。

5.孟豪：副教授，工作单位，陕西理工大学。研究超导-铁磁异质结中电荷流和自旋流随非共线铁磁体的磁矩强度、铁磁层厚度、磁矩偏转角、结构对称性变化的物理过程和规律。代表论文[15]为本研究内容的主要成果。

6.姚彬彬：讲师，工作单位，陕西理工大学。作为通讯作者与徐永生共同完成论文 [13]、[14]为本研究内容的主要成果。

7.吕劲：副教授，工作单位，北京大学。指导课题组提出研究思路和实施办法，作为通讯作者完成论文[1]-[12] 为本研究内容的主要成果。

**四、完成单位**

陕西理工大学作为项目依托单位在该项目策划与立项中给予了大量的支持与帮助。在项目的实施中能积极解决项目组成员遇到的困难，协调职能部门的关系，提供了开展项目研究的技术、仪器设备和人员条件，保证了项目组成员有较为充足的精力投入和研究学习。学校能积极开展项目进展年度检查，督促项目组按计划开展研究工作，指导项目的扩展与延伸研究，对项目进行了科学、合理的组织与管理，这些都是项目得以顺利结题的重要保证。

北京大学作为项目参与单位在该项目策划与立项中给予了大量的支持与帮助，提供了理论计算资源和实验研究平台。项目参与人吕劲对论文的发表提出了思路和解决方案。