



## 吕劲课题组及合作者在《物理进展报告》上发表长篇综述文章

最新

2021/05/16 信息来源: 物理学院  
编辑: 悠然 | 责编: 燕元

近年来,二维半导体材料(2DSC)因其优异的电、磁、光、热和机械特性在电子、光电、热电等领域有着广阔的应用前景。二维半导体晶体管,作为电子、光电、热电等应用的基本器件单元,被人们广泛地研究。然而,由于缺乏一个有效和稳定的替代掺杂技术,二维半导体场效应晶体管(2DSC-FET)常常依赖金属电极直接接触来注入合适类型的载流子。而肖特基势垒普遍存在于金属—二维半导体界面中,显著地影响甚至主导大多数2DSC-FET的性能。因此,确定其肖特基势垒高度(SBH)非常重要。在金属—二维半导体界面处无费米能级钉扎(FLP)的理想情况下,SBH可以用肖特基—莫特规则来预测,即金属的功函数分别与2DSC的电离能和亲和能的差值。但是由于界面处金属与2DSC的耦合,导致FLP效应普遍存在,SBH一般会偏离肖特基—莫特规则。如何从理论上准确计算2DSC-FET的界面处的SBH是个很有挑战的问题。

北京大学物理学院吕劲课题组提出一种新方法,通过运用第一性原理量子输运(QTS)方法,并充分考虑晶体管中金属与2DSC的相互作用和费米能钉扎效应来确定2DSC-FET的SBH。该方法突破了先前理论研究中没有充分考虑金属电极与沟道2DSC耦合的局限。研究者对22种以上二维材料(涵盖V族烯,VI族烯,过渡金属二硫化物TMDs,III-VI族,III-V族,IV-VI族化合物)与金属(Au, Pd, Pt, Ag, Sc, Ti, Ni, Cr, Sb, Ir, In, Graphene, Co, Cu, Al, Tl, MXene)在晶体管结构下的肖特基势垒进行了系统研究,结果与实验普遍吻合。相关成果发表于《科学报告》【Scientific Reports 6, 21786 (2016)】、《材料化学》【Chemistry of Materials 28, 2100 (2016)】、《纳米尺度》【Nanoscale, 8, 1179 (2016)】和《纳米研究》【Nano Research 11(2), 707-721 (2018)】。

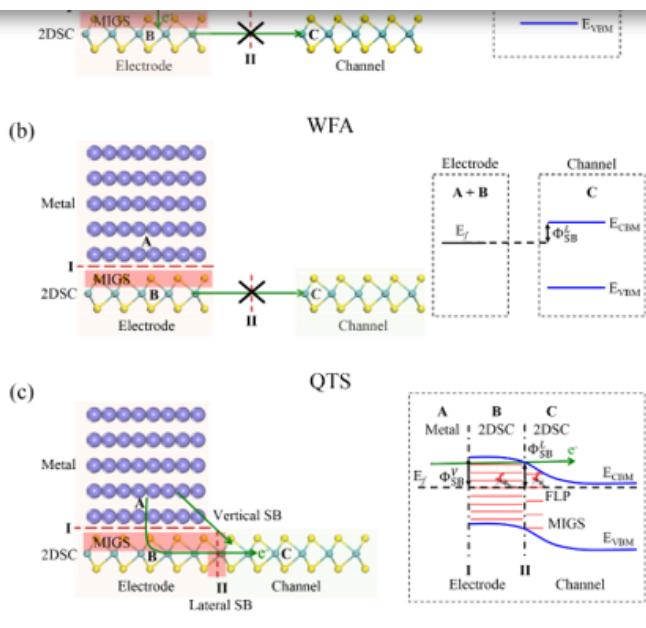
在上述工作的基础上,近日吕劲课题组与中国空间技术研究院钱学森空间技术实验室王洋洋和肖林、北京大学深圳研究生院潘锋课题组和北京邮电大学理学院屈贺如歌合作,在物理学顶级综述期刊《物理进展报告》(Reports on Progress in Physics)撰写了长篇综述文章,系统地介绍了2DSC-FET中SBH的理论预测和实验研究的最新进展,以及为实现低肖特基势垒接触所做的理论和实验工作。目前晶体管使用的大多数电极都是纯顶部接触,顶接触的2DSC-FET有着双界面肖特基势垒模型,如图所示,源区中的金属与2DSC之间的界面表示为界面I,源区和沟道区的2DSC之间的界面表示为界面II,界面I和II处分别对应垂直和水平SBH。该综述比较了理论预测SBH的不同方法,包括能带计算(BSC)、功函数近似(WFA)和第一性原理量子输运模拟(QTS)。BSC和WFA方法忽略了源漏极和2DSC沟道之间的相互作用,没有考虑水平界面处的FLP效应。而在QTS方法中,采用密度泛函理论结合非平衡格林函数对晶体管进行了整体模拟,考虑了界面I和II处的耦合,因此考虑了垂直和水平界面处的FLP效应。综述还对比了不同理论预测方法给出的SBH,并与实验进行比较。QTS方法得到的SBH与实验结果能更好地吻合,证实了使用QTS预测SBH的准确性。最后,该综述从最先进的2DSC-FET电极设计的角度进行了总结和展望。

- 19 2021.05 信息预告 | 学习北京大学“博雅银龄”
- 19 2021.05 我为师生办实事 | 党委创新开展党史
- 19 2021.05 党史学习教育 | “人”——北大、建活动启动仪式暨
- 19 2021.05 “致敬时代,‘你’我护航”第十六举行
- 18 2021.05 北京淋巴瘤国际研

专题



聚焦两会2021



能带计算 (BSC)、功函数近似 (WFA) 和量子输运模拟(QTS)的原理示意图

中国空间技术研究院钱学森空间技术实验室王洋洋副研究员、北京大学物理学院凝聚态物理与材料物理研究所2017级博士研究生刘士琦、2020级博士研究生李秋卉和北京邮电大学理学院屈贺如歌副教授为文章的共同第一作者。北京大学物理学院吕劲研究员、航天五院钱学森空间技术实验室肖林研究员和北京大学深圳研究生院新材料学院潘锋教授为文章的共同通讯作者。这一工作得到国家自然科学基金重大研究计划、科学技术部国家重点研发计划、北京大学人工微结构和介观物理国家重点实验室、教育部中央高校基本科研业务费、中国博士后科学基金会、陕西省自然科学基金基础研究计划项目、陕西省教育厅科研计划项目、北京大学高性能计算平台和北京邮电大学信息光子学与光通信国家重点实验室开放基金等支持。

论文原文链接: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6633/abf1d4>

转载本网文章请注明出处