



中国科学院物理研究所

Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences

北京凝聚态物理国家研究中心

BEIJING NATIONAL LABORATORY FOR CONDENSED MATTER PHYSICS

首页 > 新闻动态 > 科研动态

中国科学院物理研究所

北京凝聚态物理国家研究中心

SF6组供稿

第141期

2024年12月13日

晶格占位调控的二维半导体薄膜同族元素掺杂

二维范德华半导体材料由于没有悬挂键，在尺寸减小时仍能保持良好的结构稳定性，有望成为下一代电子和光学器件的候选材料。为了推进二维范德华半导体的器件应用，我们需要发展二维半导体的可控掺杂方法。具有螺旋链结构的Te单晶是一种 p 型半导体，具有出色的热电性、高载流子迁移率、中红外偏振光响应、手性边缘态、自旋极化的能带结构以及磁-电耦合效应等优异性质。相应的Te超薄膜兼具体相特性的同时，其带隙随膜厚可调（0.33~1.0eV），在未来的能量和信息器件中具有很好的应用前景。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心表面物理实验室SF06组近年来在Te超薄膜的生长和表征方面取得了一系列进展，包括实现了单层和少层Te薄膜的分子束外延生长，揭示了Te薄膜带隙随厚度的依赖关系【*Nano Lett.* 17, 4619 (2017)】，通过石墨烯层数调控Te薄膜与衬底之间的电荷转移，在晶格连续的单层Te薄膜中构筑了面内 p - n 结【*Adv. Mater.* 2018, 1802065 (2018)】，表征了Te薄膜特定边缘的准周期缺陷及其带来的一维电子调制，揭示出其边缘缺陷的产生与周期调控方法【*Phys. Rev. B* 103, 235421 (2021)】。最近，SF06组物理所-洪堡大学联合博士后苗光耀博士等人开发了超薄Te表面特定晶格位点同族替位（ Se_{Te} ）的可控制备方法，并结合扫描隧道显微镜/谱（STM&STS），X射线光电子能谱以及密度泛函理论计算对超薄Te表面 Se_{Te} 替位原子的电子性质进行了详细研究。他们发现Se取代表面Te原子的同时保持了体系的螺旋晶体结构，并在导带底附近引入掺杂态。通过控制表面的Se替位原子浓度，他们实现了对超薄Te能带结构的连续调节，将其载流子类型由 p 型调节为 n 型（见图1f）。这与在随机替位的Se-Te合金薄膜中观察到的带隙增大形成对比（图1g）。掺杂机制被进一步揭示为Se和Te不同的电负性导致特定晶格位置的Se-Te取代在表面引入电偶极矩，使电子在表面聚集从而降低了系统的功函数。通过对 S_{Te} 和 P_{As} 系统相似的密度泛函理论计算，他们还展示了该掺杂方法在其他二维半导体材料体系中的通用性，为大量二维单元素半导体的掺杂与功函数调节提供了借鉴。

相关成果以“Doping elemental 2D semiconductor Te through surface Se substitutions”为题发表于*Phys. Rev. Lett.*, 133, 236201(2024)。苗光耀博士为文章第一作者，物理所王伟华副研究员，郭建东研究员为论文通讯作者。SF10组博士生喻泽（已毕业）与刘淼研究员提供了理论计算支持，物理所郭沁林研究员提供了X射线光电子能谱测试的支持。物理所博士生苏诺雨，已毕业博士生黄筱淳，李博，衷惟良参与了此工作。部分计算结果在材料计算数据库atomly上运行获得。该工作受到了中国科学院B类先导专项、国家自然科学基金和物理所-洪堡大学物理学博士后奖学金的资助。

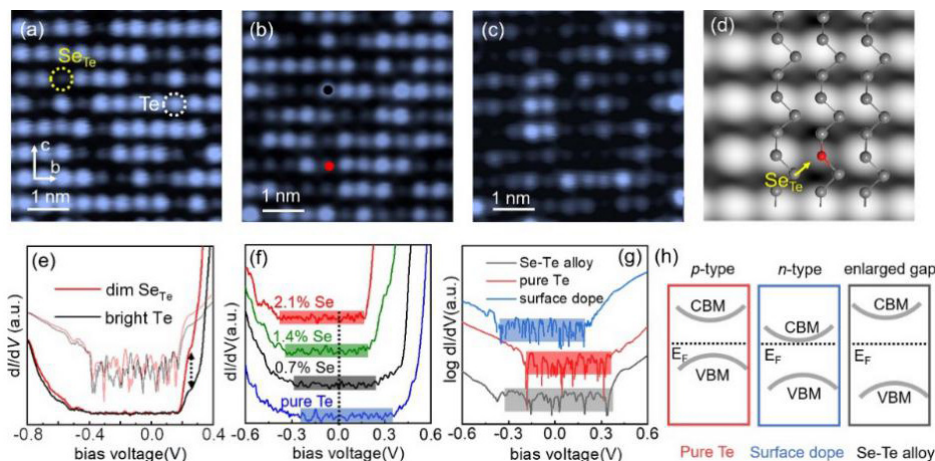


图1. 表面Se_{Te}替位掺杂的Te膜的形貌与电子性质表征。(a) - (c) 随表面Se_{Te}替位浓度增加的Te薄膜上获得的原子分辨的STM图像。(d) 密度泛函理论计算模拟的表面Se_{Te}替位的STM图像。结构模型叠加于图中，红色和灰色的球分别代表Se和Te原子。(e) 在(b)中的黑点和红点位置测量得到的微分电导 (dI/dV) 谱，其对数谱如半透明曲线所示。(f) Te膜的dI/dV谱随表面Se_{Te}替位浓度的演化，其带隙用不同颜色突出显示。所有谱线均测量于厚度4.6nm (约12层) 的Te薄膜，以排除薄膜厚度和衬底掺杂对带隙的影响。(g) 纯Te膜，Se-Te合金薄膜，具有表面Se_{Te}替位的Te薄膜的对数dI/dV谱比较 (厚度均为4.2 nm，约11层)。(h) 表面Se_{Te}原子替位掺杂与Se-Te合金化对于体系电子结构调节的示意图。

[PhysRevLett.133.236201.pdf](#)

[电子所刊](#) [公开课](#) [微信](#) [联系我们](#) [友情链接](#) [所长信箱](#) [违纪违法举报](#)

