

GaN/VSe₂ 范德瓦耳斯异质结 电接触特性及调控效应*

汤家鑫[†] 李占海 邓小清 张振华[‡]

(长沙理工大学, 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114)

(2023 年 2 月 13 日收到; 2023 年 5 月 24 日收到修改稿)

降低金属-半导体界面的肖特基势垒并实现欧姆接触对于研发高性能肖特基场效应管非常重要. 鉴于实验上已成功制备 GaN 及 1T-VSe₂ 单层, 本文理论构建 GaN/1T-VSe₂ 异质结模型, 并利用基于密度泛函理论的第一性原理研究了其稳定性、肖特基势垒特性及其调控效应. 计算的形成焓及淬火分子动力学模拟表明构建的异质结是稳定的. 研究表明: 本征异质结为 p 型肖特基接触, 同时发现施加拉伸或压缩应变, 异质结始终保持 p 型肖特基接触不变, 没有出现欧姆接触. 而施加外电场则不同, 具有明显的调控效应, 较高的正向电场能使异质结从肖特基接触转变为欧姆接触, 较高的反向电场能导致 p 型肖特基接触转变为 n 型肖特基接触. 特别是实施化学掺杂, 异质结较容易实现由肖特基接触到欧姆接触的转变, 例如引入 B 原子能使 GaN/1T-VSe₂ 异质结实现典型的欧姆接触, 而 C 和 F 原子掺杂, 能使 GaN/1T-VSe₂ 异质结实现准欧姆接触. 这些研究对该异质结的实际应用提供了理论参考, 特别是对于研发新型高性能纳米场效应管具有重要意义.

关键词: 范德瓦耳斯异质结, 肖特基势垒, 欧姆接触, 物理调控, 化学掺杂**PACS:** 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv, 73.30.+y**DOI:** 10.7498/aps.72.20230191

1 引言

近年来, 传统半导体器件的发展遇到瓶颈, 这源于人们对高性能电子器件的追求, 高性能电子器件需要高性能的芯片, 即单位面积上晶体管数量增加, 单个器件尺寸减小. 然而, 对于传统硅基晶体管, 当沟道长度低于几纳米时, 引发的量子效应往往导致器件失效^[1,2]. 因此, 寻找基于新型材料的晶体管研发已迫在眉睫. 事实上, 很久以前科研人员就开始对二维材料进行理论研究, 直到通过机械剥离法成功制备了二维石墨烯, 吸引了更多人尝试用实验的方法制备二维材料, 同时理论上也对二维材

料的性质进行更多的计算和预测, 使得二维材料的研究成为科技前沿^[3,4]. 由于二维材料具有特殊的结构和性能, 所以目前已成为热门研究及学术新前沿. 例如最简单的单原子二维材料, 包括石墨烯、硅烯和磷烯^[5-8]等, 以及二维 III-V 族化合物材料如 h-BN, AlN, GaAs^[9-11]等, 还有近几年来研究得很火的二维过渡金属卤化物 (TMDCs)^[12,13]、二维碳氮化合物 (MXene)^[14,15]等, 均拥有各自的特性优势, 并在电子器件、光电子器件、催化剂以及各种传感器方面具有应用潜力^[16-18].

为了使二维材料具有更丰富的性质并扩展它们的应用范围, 人们常常将两种或多种不同二维材料经过堆叠的方式构成范德瓦耳斯力连接的异质

* 国家自然科学基金 (批准号: 61771076)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2021JJ30733) 和长沙理工大学研究生科研创新项目 (批准号: CXCLY2022146) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: csustjxt@163.com

[‡] 通信作者. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn

结,即范德瓦耳斯异质结,这种异质结既能很好地保留原有材料的性质,又能产生新的物理性质.例如,当半导体性与金属性二维材料接触构成范德瓦耳斯异质结时,由于两种二维材料功函数的差异,则在接触界面上形成能带的“钉扎效应(FLP)”,从而形成肖特基势垒^[19].对于电子器件来说,界面肖特基势垒的存在增大了接触电阻,导致器件载流子的传输效率和性能降低^[20,21].因此,着力降低肖特基势垒高度(H_{SB})^[22]对于提高电子器件性能是非常必要的.当然金属与半导体之间也可以形成另一种接触方式:欧姆接触^[23],其是 $H_{SB} = 0$ eV时半导体与金属的接触方式,也是发展高性能器件要着力达到的目标.

GaN是典型的III-V族元素化合物,具有较高电子迁移率,与碳化硅(SiC)、氧化锌(ZnO)一并被称为第3代半导体^[24,25],具有广泛的应用前景.受石墨烯成功制备的启发,Freeman等^[26]和Sahin等^[27]通过第一性原理预测二维GaN可以稳定存在^[26,27].此后,Balushi等^[28]在2016年首次成功通过迁移增强封装生长技术,并利用外延石墨烯合成了单层GaN.单层GaN的成功制备表明其研发纳米级电子器件并实际应用的可能性.另一方面,基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算表明:对于单层GaN可以通过引入空位、掺杂、吸附、施加应变以及外电场等方式有效调控其物理性质^[29-33].最近,通过分子束外延的方法成功合成了单层1T-VSe₂,研究发现,单层1T-VSe₂具有许多独特的物理性质,如铁磁性^[34-36],且1T-VSe₂的电导率高达 10^6 S/m,适用于电极材料^[37].Hu等^[38]以1T-VSe₂为基底与多种二维过渡金属卤化物结合构建了系列TMDCs/1T-VSe₂垂直范德瓦耳斯异质结,并成功实现了由肖特基接触到欧姆接触的转变.

为了扩展单层GaN和1T-VSe₂的应用范围,特别是更贴近纳米器件的实际应用,构建二维GaN/1T-VSe₂范德瓦耳斯异质结,对这种金属-半导体型异质结,界面将产生新的物理特性,考虑通过适当调控,探索其在场效应器件中的可能应用.GaN仅一个原子厚度,以其做为沟道材料,1T-VSe₂做为电极,预期GaN/1T-VSe₂异质结对于研发小尺度超薄器件具有明显优势.本文利用DFT重点研究了GaN/1T-VSe₂异质结的界面接触性质,并通过改变层间耦合、施加电场、化学掺杂等方法对其性能进行调控.研究发现,在拉伸或压缩

应变作用下,异质结始终保持p型肖特基接触不变,而施加较高的正向电场能使异质结从肖特基接触转变为欧姆接触.特别是引入化学掺杂,较容易实现异质结由肖特基接触到欧姆接触的转变.

2 计算方法

模型的几何优化、结构稳定性的评估及电子特性的计算均采用基于DFT的第一性原理方法,且在Atomistix ToolKit(ATK)软件包中实现^[39],这种方法已被广泛应用于研究纳米结构^[40-44].在计算中选择广义梯度近似(GGA)的Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)形式作为交换关联势.本研究没有考虑DFT+U计算,因目前研究认为对于1T-VSe₂利用PBE计算有足够的合理性^[45,46].特别是1T-VSe₂是金属,不涉及带隙大小的问题.我们选择原子轨道线性组合(LCAO)展开价电子波函数,用PseudoDojo赝势描述原子实与价电子间的相互作用,并使用能描述长程范德瓦耳斯相互作用的DFT-D3函数处理范德瓦耳斯修正^[47].第一布里渊区的K点以 Γ 点为中心,在 x , y 和 z 方向上分别选为9,9和1,且采用周期性边界条件.为了达到计算效率与精度平衡,能量截断能设为150 Ry,用以控制实空间积分网格区间的尺寸以及泊松方程的求解.在所有研究的模型中,在 z 方向设置一个大于20 Å(1 Å = 10^{-10} m)的真空层,以消除异质结与“像”之间的相互作用.几何结构优化标准为作用在每个原子上的力小于0.01 eV/Å,晶格内应力小于0.01 GPa.所有的电子特性计算及稳定性都在几何结构优化之后进行,自洽场能量收敛标准设为 10^{-5} eV.为了简单起见,在所有计算结果中,系统的费米能级设置为零.

3 计算结果与分析

3.1 结构与稳定性

GaN单层为类似于石墨烯的六元环结构,在每个六元环中,N原子和Ga原子交替分布,通过sp²杂化彼此成键,在几何优化后结构的晶格常数和Ga—N键长分别为3.236 Å和1.87 Å,这与之前DFT研究的结果3.260 Å和1.880 Å非常一致^[39].图1(a)为 2×2 GaN单层的原子结构,计算出的GaN单层的能带如图1(b)所示,价带最高点(VBM)和

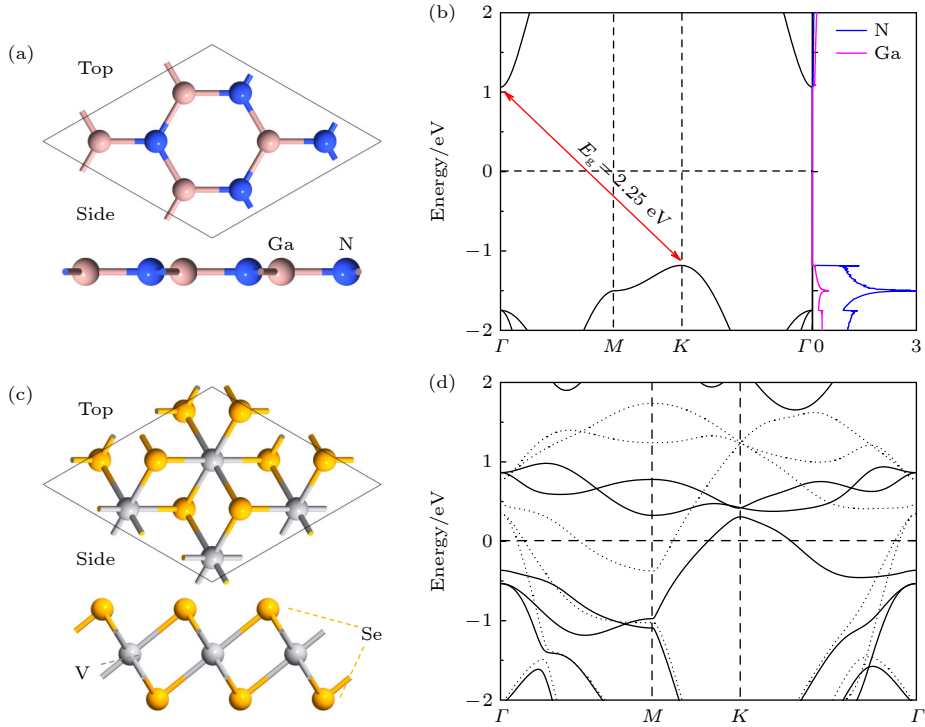


图 1 (a) GaN 单层原子结构正视图 and 侧视图; (b) GaN 单层能带结构和 DOS; (c) 1T-VSe₂ 单层原子结构正视图 and 侧视图; (d) 1T-VSe₂ 单层能带结构, 其中黑色实线和虚线分别表示电子上旋和下旋能带结构

Fig. 1. (a) Top and side views of GaN monolayer atomic structure; (b) band structure and DOS of GaN monolayer; (c) top and side views of 1T-VSe₂ monolayer atomic structure; (d) band structure of 1T-VSe₂ monolayer, in which the black solid line and dotted line represent the electronic α -spin and β -spin band structure, respectively.

导带最低点 (CBM) 分别出现在高对称布里渊区点 K 和点 Γ 上, 表明单层 GaN 是间接带隙半导体, 其带隙为 2.25 eV, 非常接近以前的计算结果: 2.24 eV^[48] 和 2.19 eV^[49]. 图 1(b) 还呈现 GaN 单层的态密度 (DOS), 可以清楚看到, 在费米能级附近, GaN 价带主要由 N 原子贡献, 而导带由 Ga 及 N 原子共同贡献. 1T-VSe₂ 单层的原子结构如图 1(c) 所示, 显然它是由 3 个次原子层构成的三明治结构, 上层和下层都是 Se 原子, 中间是 V 原子, 其单胞的晶格常数为 3.347 Å, 这与文献 [50, 51] 报道的理论值 3.344 Å 和实验值 3.356 Å 相一致. 图 1(d) 呈现 1T-VSe₂ 的能带结构, 可以看出 1T-VSe₂ 为金属, 并且出现了能带分裂, 表明该结构具有磁性, 这也与之前的计算相符合 [52].

将 1×1 的 GaN 单胞与 1×1 的 1T-VSe₂ 单胞堆叠, 形成 GaN/1T-VSe₂ 异质结单胞, 为了避免 GaN 层受到机械应变的影响, 在优化过程中将其固定, 仅对 1T-VSe₂ 单层施加应变, 平均绝对应变通过应变张量计算 [53], 即按 $\epsilon^{av} = (\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{12})/3$ 计算获得. 其中 ϵ_{11} , ϵ_{22} 和 ϵ_{12} 分别表示二维应变张量矩阵的分量, 在异质结单胞中绝对应变尽可能小

的条件下, GaN/1T-VSe₂ 异质结中晶格失配引起的最大平均绝对应变为 2.21%, 该数据表明应变对结构的影响很小. 充分弛豫后的异质结晶格常数为 3.23 Å. 根据两个单层间原子的不同位置, 在构成异质结时, 考虑了 5 种不同的堆叠方式, 以 GaN 层的 N 原子分别与 1T-VSe₂ 层中的 V 原子、上层 Se 原子、下层 Se 原子、V—Se 键中间以及空位对齐, 并记为 S1—S5, 如图 2(a)—(e) 所示. 对每一种堆叠方式, 计算总能量随层间距的变化, 找到最低能量构型, 5 种堆叠方式的最低能量的相对值 ΔE 见图 2(f), 定义为 $\Delta E = E(X) - E(V)$, 其中 $E(X)$ 为每种堆叠方式的最低能量, $E(V)$ 表示 N 原子正对 V 原子时的最低能量, 即 S1 堆叠时最低能量. 从图 2(f) 可以看出, S1 堆叠时, ΔE 最小, 这就说明 5 种堆叠方式中, S1 堆叠方式的异质结最稳定, 下面的计算均采用这种结构作为代表研究其电子结构及电接触类型的调控效应.

S1 堆叠形成的异质结, 最低能量对应的层间距为 3.06 Å, 如图 3(a) 所示, 显然这个距离明显大于两单层相邻原子间的共价键半径之和, 因此我们设计的结构是在界面上没有化学键的范德瓦耳斯

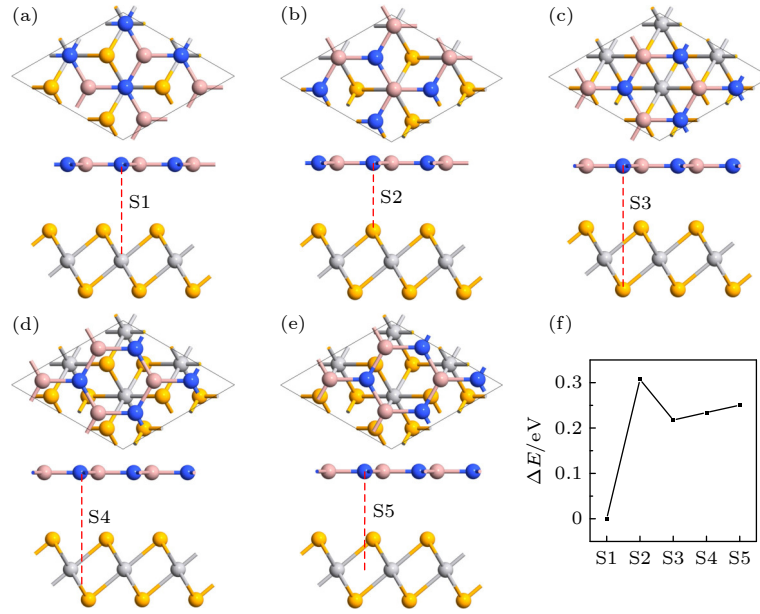


图2 GaN与1T-VSe₂单层形成异质结时不同堆叠方式, GaN层的N原子分别对齐1T-VSe₂层的(a) V原子, (b) 上层Se原子, (c) 下层Se原子, (d) V-Se键中间, 以及(e) 空位, 并记为S1—S5. (f) 5种堆叠方式的最低能量的相对值 ΔE

Fig. 2. Different stacking configurations for GaN and 1T-VSe₂ monolayers integrated to form heterojunctions. The N atom in top GaN layer is just aligned with the (a) V atom, (b) upper Se atoms, (c) lower Se atom, (d) middle of V—Se bond, and (e) hollow site in bottom 1T-VSe₂ layer, which are marked as S1—S5, respectively. (f) Relative value of the lowest energy ΔE , for five stacking configurations.

异质结, 由于层间的弱相互作用, 单层结构的电子性质得到了很好的保留. 为了评估这个异质结的稳定性, 计算形成焓 ΔH 定义为

$$\Delta H = \frac{E_T - (E_G + E_V)}{A}, \quad (1)$$

其中 E_T 表示异质结的总能量, E_G 和 E_V 分别表示孤立GaN单层和1T-VSe₂单层的能量, A 表示异质结的面积, 显然若 ΔH 为负值, 则表示该反应为放热反应, 则形成的异质结稳定; 反之, 若 ΔH 为正值, 则该反应为吸热反应, 则形成的异质结不稳定. 计算表明, S1异质结的形成焓为 $-136.58 \text{ meV}/\text{\AA}^2$, 表明该异质结在能量上具有较好的稳定性^[54].

为了进一步检验异质结的热稳定性, 对几何优化后的异质结S1进行Forcite淬火分子动力学模拟. 考虑4个淬火循环过程, 每个淬火循环初始温度和 midpoint 最高温度分别设置为300 K和500 K, 即升温到500 K后再淬火到室温, 温度间隔取10 K, 总模拟时间为8 ps. 淬火后的结构如图3(b)所示, 淬火导致GaN单层中的原子出现了一些小位移, 但是整体的结构并没有受到影响, 未出现原子的重构现象, 表明该结构具有良好的热稳定性. 总之, 计算的形成能及淬火分子动力学模拟表明S1异质结的结构稳定性较高.

3.2 异质结电子结构

图3(c)为异质结S1的能带结构及投影DOS, 能带图中黑色部分表示1T-VSe₂层对能带的贡献, 红色部分表示GaN层对能带的贡献; DOS图中灰色部分表示总DOS, 红色部分表示GaN的投影态密度(PDOS). 可以看出, 异质结的能带来源于各单层的叠加, 单层固有电子性质得到了较好的保留, 从而进一步证明异质结层间相互作用是弱的范德瓦耳斯力, GaN层能带结构相对单层情况有明显的整体上移, 这是因为两种材料功函数的差异所导致, 功函数 $W = E_0 - E_F$, 其中 E_0 表示真空能级, E_F 表示费米能级, 计算获得GaN单层的功函数为4.32 eV, 1T-VSe₂单层的功函数为5.86 eV. 所以, 当两种材料接触之后, GaN单层的电子转移到1T-VSe₂单层, 导致GaN单层费米能级下移, 相当于对该单层进行p型掺杂, 因此GaN层能带相对于异质结的费米能级(两种材料的公共费米能级)上移, 但依然保持半导体的性质.

图3(d)给出异质结沿垂直(z)方向的平均静电势, 可以看出由于电荷局域分布不同, 静电势的空间分布是一个多势垒(势阱)结构, 对应原子平面, 势阱可以禁锢电子. 特别是在界面处有一个明显的空间势垒, 对应范德瓦耳斯间隙, 以阻碍电荷

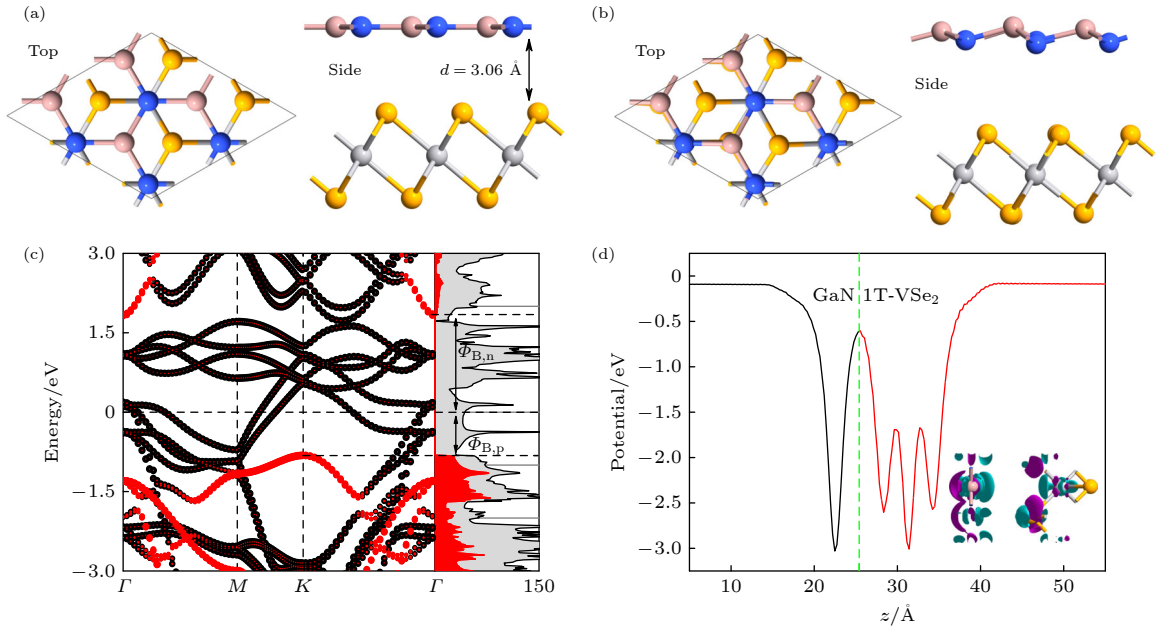


图 3 (a) 本征异质结 S1 的正视图 and 侧视图; (b) 进行淬火处理后异质结 S1 的正视图 and 侧视图; (c) 异质结 S1 的能带结构以及 DOS 图, 红色和黑色分别表示 GaN 和 1T-VSe₂ 单层对能带的贡献, 灰色部分表示总 DOS, 红色部分表示 GaN 的 PDOS; (d) 异质结 S1 沿垂直方向的平均静电势以及空间电荷差密度, 其中青色表示失去电子, 紫色表示得到电子, 等值面为 $0.001 e \cdot \text{Å}^{-3}$

Fig. 3. (a) Top and side views for intrinsic heterojunction S1; (b) top and side views for heterojunction S1 after quenching treatment; (c) band structure and DOS of the heterojunction S1, red and black lines denote the respective contribution of GaN and 1T-VSe₂ monolayers to the energy band structure, the gray part indicates the total density of states, and the red part indicates the PDOS of GaN; (d) the average electrostatic potential and space charge density difference in the vertical direction of heterojunction S1, where cyan represents the loss of electrons, and purple represents the gain of electrons, the isosurface is set to $0.001 e \cdot \text{Å}^{-3}$.

转移. 为了进一步说明异质结的电荷转移情况, 计算了异质结的空间电荷密度差 $\Delta\rho$, 其定义为

$$\Delta\rho(x, y, z) = \rho_H(x, y, z) - \rho_G(x, y, z) - \rho_V(x, y, z), \quad (2)$$

其中 ρ_H 为异质结的电荷密度分布, ρ_G 和 ρ_V 分别为 GaN 和单层 1T-VSe₂ 单层的电荷密度分布, 计算结果见图 3(d) 的插图. 可以看出在 GaN 层电子耗尽, 在 1T-VSe₂ 层电子累积, 与之前的分析完全一致.

由于范德瓦耳斯相互作用很弱, 所以异质结的 n 型或 p 型肖特基势垒高度 (H_{SB}) 可通过基于金属/半导体界面的 Schottky-Mott 规则^[55,56] 加以计算:

$$\begin{aligned} \Phi_{B,n} &= E_{CBM} - E_F, \\ \Phi_{B,p} &= E_F - E_{VBM}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $\Phi_{B,n}$, $\Phi_{B,p}$ 分别为金属-半导体异质结中电子与空穴的 H_{SB} , E_{CBM} 和 E_{VBM} 分别表示半导体单层的 CBM 处和 VBM 处的能量. 显然满足: $\Phi_{B,n} + \Phi_{B,p} = E_{CBM} - E_{VBM} = E_g$, 其中 E_g 为半导体带隙. 若 H_{SB} 满足 $\Phi_{B,n} < \Phi_{B,p}$ 或 $\Phi_{B,n} > \Phi_{B,p}$, 则对应 n 或 p 型肖特基接触. 若 $\Phi_{B,n}$ 或 $\Phi_{B,p} \leq 0$, 便形成

了欧姆接触^[57]. 对于本征异质结 S1 的 $\Phi_{B,n}$ 及 $\Phi_{B,p}$, 如图 3(c) 所示, 它们是 $\Phi_{B,n} = 1.81 \text{ eV}$, $\Phi_{B,p} = 0.82 \text{ eV}$, 即 $\Phi_{B,n} > \Phi_{B,p}$, 因此本征异质结 S1 为肖特基势垒高度为 0.82 eV 的 p 型肖特基接触.

3.3 异质结肖特基势垒高度与电接触类型的调控

3.3.1 物理方法调控效应

首先, 考虑异质结的垂直应变效应, 包括压缩应变和拉伸应变, 如图 4(a) 所示, 即在 z 轴方向上施加应力, 从而改变异质结层间距, 进而改变界面耦合强度. 图 4(b) 为本文计算的异质结 S1 的带隙 E_g 及肖特基势垒高度 ($\Phi_{B,p}$ 和 $\Phi_{B,n}$) 随层间距 d 的变化情况, 其中绿色虚线表示本征异质结的层间距 $d_0 = 3.06 \text{ Å}$. 从图中可以看出, GaN 层的带隙也随着异质结层间距的增大而变小. 同时可以看出, 随着异质结逐渐被拉伸, $\Phi_{B,p}$ 和 $\Phi_{B,n}$ 均逐渐减小, 但 $\Phi_{B,p}$ 减小更快, 当异质结的层间距增大到 $d = 4.5 \text{ Å}$ 后, $\Phi_{B,p}$ 达到了 0.59 eV . 而当异质结被压缩时, 情况正好相反, $\Phi_{B,p}$ 和 $\Phi_{B,n}$ 均逐渐增大. 但无

论施加拉伸或压缩应变, 异质结 S1 始终保持 p 型肖特基接触不变.

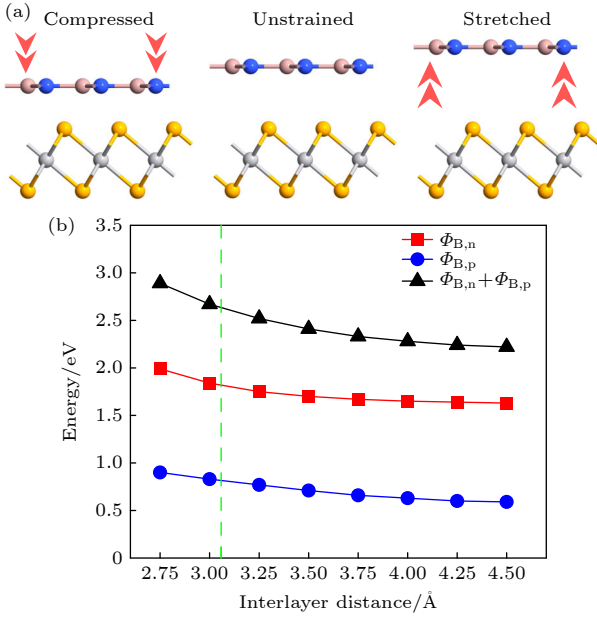


图 4 垂直应变效应 (a) 异质结 S1 施加应变示意图; (b) 异质结的肖特基势垒高度 $\Phi_{B,n}$, $\Phi_{B,p}$ 和 GaN 单层的带隙 E_g 随层间距的变化, 绿色垂直虚线表示本征异质结层间距

Fig. 4. Vertical strain effects: (a) Schematic diagram of applied strain for heterojunction S1; (b) Schottky barrier heights $\Phi_{B,n}$ and $\Phi_{B,p}$, and the band gap E_g for GaN monolayers versus layer spacing, where the green vertical dotted line represents the layer spacing for intrinsic heterostructure.

为了更细节地呈现异质结在不同应变作用下电子特性的变化, 图 5 给出了异质结 S1 在不同层间距下的能带结构, 同时为体现 $\Phi_{B,n}$ 和 $\Phi_{B,p}$ 细节的变化, 用不同颜色进行填充. 可以看出, 改变层间距对异质结带隙及肖特基势垒高度 ($\Phi_{B,p}$ 和 $\Phi_{B,n}$) 的影响比较小, 异质结始终保持肖特基势垒接触, 没有出现欧姆接触, 这可能是因为异质结界面的内建电场很弱, 即使改变层间距, 但对两单层相对静电势能差的影响非常小, 使得 GaN 层的能带结构相对异质结的费米能级不发生明显的上、下移动. 因此有必要探究另一种物理调控, 即外电场效应.

以前的研究表明, 施加外电场是调控异质结电子性质的有效办法 [58,59]. 仍以异质结 S1 为例, 在与异质结平面垂直的方向上通过正、负两极板引入电场, 如图 6(a) 所示, 且定义正电场方向由 1T-VSe₂ 层指向 GaN 层的方向, 反之为负电场方向. 随着电场大小的改变, 异质结的肖特基势垒高度也会随

之变化, 其数据由图 6(b) 给出, 其中红色线对应电子的肖特基势垒高度 $\Phi_{B,n}$, 而蓝色线对应空穴的肖特基势垒高度 $\Phi_{B,p}$. 从图中可以看出, 电场对电子和空穴的肖特基势垒高度有明显影响, 并且随着电场的改变, $\Phi_{B,n}$ 与 $\Phi_{B,p}$ 几乎线性变化.

如前所述, 对于本征异质结 (外电场为 0 时), $\Phi_{B,n} > \Phi_{B,p}$, 即典型的 p 型肖特基接触. 当对异质结施加正向电场的时候, 随着电场强度的增加, $\Phi_{B,n}$ 持续增大, 而 $\Phi_{B,p}$ 持续减小, 虽然异质结保持 p 型肖特基接触不变, 但当电场强度为 0.8 V/Å 时, $\Phi_{B,p}$ 减为 0.15 eV, 即 GaN 的 VBM 非常接近费米能级. 进一步增大电场强度到 1.0 V/Å 时, $\Phi_{B,p}$ 减为 0, 即此时外电场作用使异质结从肖特基接触转变为欧姆接触. 而对于负向电场, 从图 6(b) 可以看出, 当电场强度约为 -0.5 V/Å, 出现了 $\Phi_{B,n} = \Phi_{B,p}$ 的情况. 进一步反向增大电场强度, 出现 $\Phi_{B,n} < \Phi_{B,p}$, 即异质结的接触方式从原来的 p 型肖特基接触转变为 n 型肖特基接触. 此后, 随着电场强度继续反向增加, $\Phi_{B,n}$ 持续减小, 而 $\Phi_{B,p}$ 持续增大, 但在计算的负电场范围内, 未能实现欧姆接触. 同时图 6(b) 也给出了 GaN 层带隙随外电场的变化, 可以看出带隙的大小受电场影响较小, 即随着电场强度反向增大时, GaN 层带隙略有减小, 但随着电场强度正向增大时, 其带隙缓慢增大.

为了更细节地展示外电场效应, 图 7 为异质结在电场下的能带结构变化情况, 并用不同颜色的方框表示 $\Phi_{B,n}$ 和 $\Phi_{B,p}$. 可以看到, GaN 层能带相对 1T-VSe₂ 层能带明显移动, 即随着正向电场的增大, GaN 层能带明显向上移动, VBM (CBM) 不断靠近 (远离) 异质结费米能级, 使得异质结的 $\Phi_{B,n}$ 持续增大, 而 $\Phi_{B,p}$ 持续减小. 而对于反向电场, 随着场强增大, GaN 层能带明显向下移动, VBM (CBM) 不断远离 (靠近) 异质结费米能级, 使得异质结的 $\Phi_{B,n}$ 持续减小, 而 $\Phi_{B,p}$ 持续增大. 如何理解这种变化? 这与外电场作用在两个单层上, 导致附加静电势能有关. 当 GaN 与 1T-VSe₂ 接触形成异质结时, 由于载流子的扩散运动与内建电场下的漂移运动达到平衡后, 使得这两单层有共同的费米能级. 而施加外电场后, 两单层的静电势能差发生改变, 使得两单层有不同的准费米能级. 具体而言, 当施加正方向外加电场时, 即电场从 1T-VSe₂ 层指向 GaN 层, 导致 GaN (1T-VSe₂) 层准费米能级上升 (下降), 所以 GaN 层整个能带结构明显相对

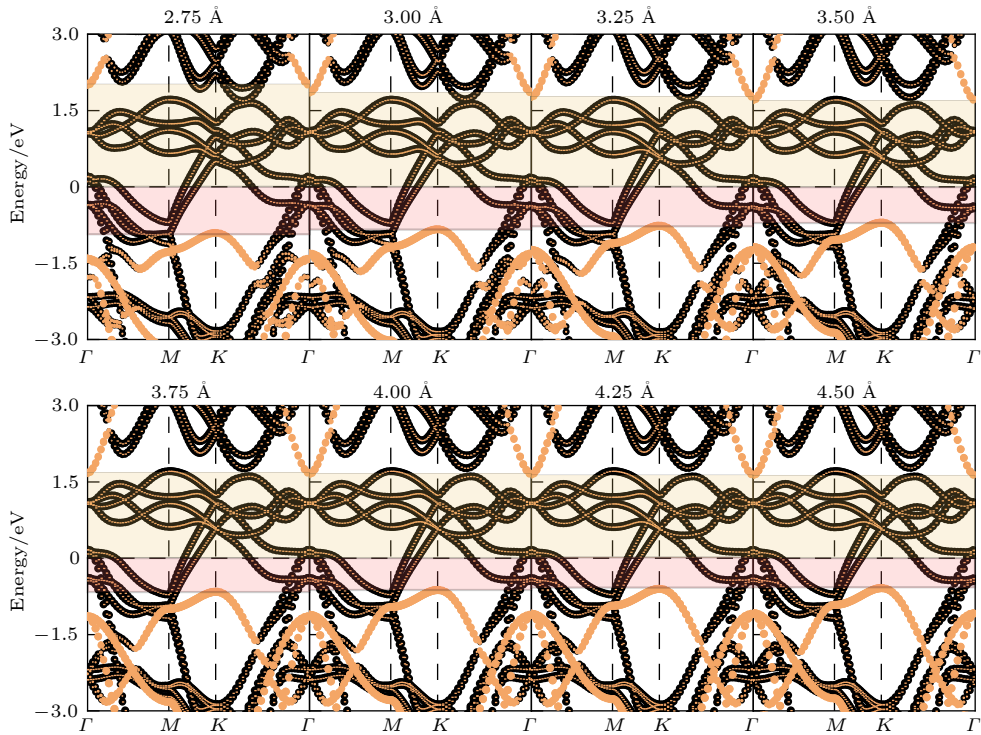


图 5 异质结 S1 的能带结构随层间距的变化细节, 其中黑色表示 1T-VSe₂ 层的贡献, 橙色表示 GaN 层的贡献, 在费米能级附近的上下两个方框分别表示 $\Phi_{B,n}$ 和 $\Phi_{B,p}$

Fig. 5. Detailed variation of energy band structure for heterojunction S1 with the layer spacing, where black represents the contribution of 1T-VSe₂ layer, orange denotes the contribution of GaN layer, and the upper and lower two boxes around the Fermi level indicate $\Phi_{B,n}$ and $\Phi_{B,p}$, respectively.

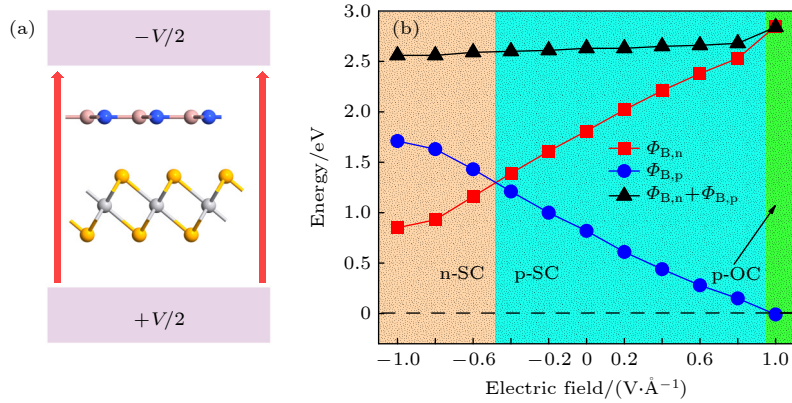


图 6 外加电场效应 (a) 异质结 S1 施加外电场作用示意图; (b) 异质结的肖特基势垒高度 $\Phi_{B,n}$, $\Phi_{B,p}$ 和 GaN 单层的带隙 E_g 随电场的变化

Fig. 6. External electric field effects: (a) Schematic diagram of applying external electric field for heterojunction S1; (b) Schottky barrier height $\Phi_{B,n}$ and $\Phi_{B,p}$, and the band gap E_g of GaN monolayer versus external electric field.

上移, 1T-VSe₂ 层整个能带结构相对下移, 出现 p 型肖特基高度降低, 最后在高电场时 (1.0 V/Å), 实现了从肖特基接触向欧姆接触的过渡. 而施加反向外加电场时, 情况刚好相反, GaN 及 1T-VSe₂ 层准费米能级分别相对下降和上升, 所以 GaN 层能带结构整体下移, 而 1T-VSe₂ 层能带结构整体上移, 故在此过程中, 出现了 p 型肖特基接触向 n 型

肖特基接触转变.

3.3.2 化学掺杂方法调控效应

最后讨论通过化学掺杂的方法对异质结实现肖特基势垒高度及电接触类型的调控. 众所周知, 对于块体材料, 掺杂杂质原子可以有效地改变半导体内的电子浓度, 从而出现 n 型半导体和 p 型半

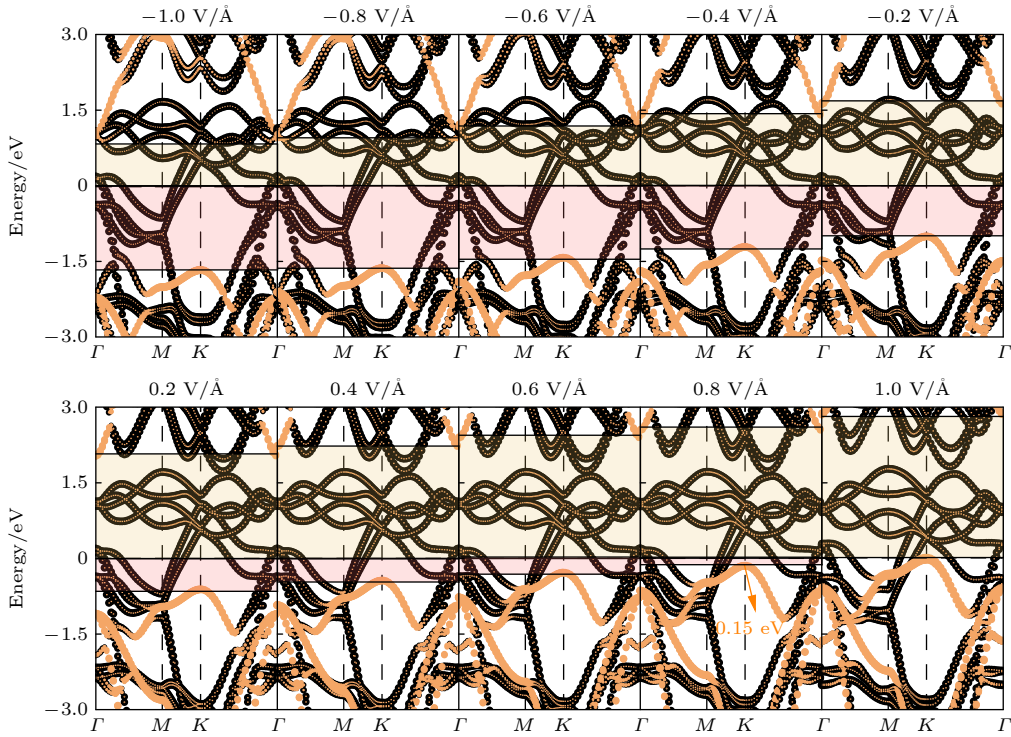


图 7 异质结 S1 的能带结构随外电场变化情况, 其中黑色表示 1T-VSe₂ 层的贡献, 橙色表示 GaN 层的贡献, 上下两个方框分别表示 $\Phi_{B,n}$ 和 $\Phi_{B,p}$

Fig. 7. Energy band structure of heterojunction S1 changes with the external electric field in details, where black represents the contribution of 1T-VSe₂ layer, orange denotes the contribution of GaN layer, and the upper and lower two boxes around the Fermi level indicate $\Phi_{B,n}$ and $\Phi_{B,p}$, respectively.

导体, 所以在实际应用中, 掺杂半导体的适用范围远大于本征半导体, 例如, 为了制作 MOS 管, 当把 GaN 作为沟道材料使用时, 常常需要在块体 GaN 中引入 p 型或 n 型掺杂^[60]. 这一手段对低维材料包括异质结同样适用^[61,62]. 这里考虑引入非金属原子对异质结 S1 中 GaN 单层进行掺杂.

选取 2×2 的 GaN 单胞, 采用替代性掺杂, 即分别采用 B, C, O 及 F 四种非金属原子替代 GaN 单层单胞中的一个 N 原子. 前文提到单层 GaN 结构是 N 原子和 Ga 原子交替成键, 因此每个 N 原子在空间的位置都是一样的, 并且由于晶格适配, 在异质结中每个 N 原子对应的位置也相同, 所以在引入掺杂时无需考虑被替换的 N 原子的具体位置. 将掺杂后 GaN 单层命名为 X-GaN, 其中 X 表示掺杂原子, 对结构进行优化后分别计算 4 种材料的能带, 如图 8(b) 所示. 从图中可以看出, 与本征 GaN 单层类似, B-GaN 和 F-GaN 单层分别为间接带隙半导体, 而 C-GaN 和 O-GaN 单层则为金属, 这是一个很有趣的现象. B, C, N, O, F 五种原子在元素周期表中位于同一周期, 当引入这些杂质

原子后, 相邻原子掺杂 GaN 单层交替出现金属性质和半导体性质, 这种“奇偶效应”^[63] 主要是由于掺杂原子最外层电子数与被取代的 N 原子不同所导致的, 例如, C 及 O 原子掺杂出现孤对电子, 从而使费米能级穿过最高占据轨道, C-GaN 单层以及 O-GaN 单层成为金属. 而 B 及 F 掺杂不出现孤对电子, 从而使费米能级位于最高占据轨道上方, B-GaN 单层以及 F-GaN 单层仍为半导体.

分别将 X-GaN 与 1T-VSe₂ 堆叠形成异质结, 仍以 S1 构型为例, 如图 8(a) 所示, 其中红色原子为掺杂原子, 对于掺杂后的异质结命名为 X-GaN/1T-VSe₂, 其中 $X = B, C, O$ 及 F , 由于掺杂导致 X-GaN 的晶体结构发生变化, 因此重新计算平均绝对应变. 与本征异质结的情况类似, 为了避免 X-GaN 层受到机械应变的影响, 只对 1T-VSe₂ 单层施加应变, 经过计算掺杂后异质晶晶格失配引起的最大平均绝对应变为分别为 0.06% (B-GaN/1T-VSe₂), 1.46% (C-GaN/1T-VSe₂), 1.13% (O-GaN/1T-VSe₂) 及 2.0% (F-GaN/1T-VSe₂), 这些数据说明引入掺杂后对异质结的几何结构没有产生明显

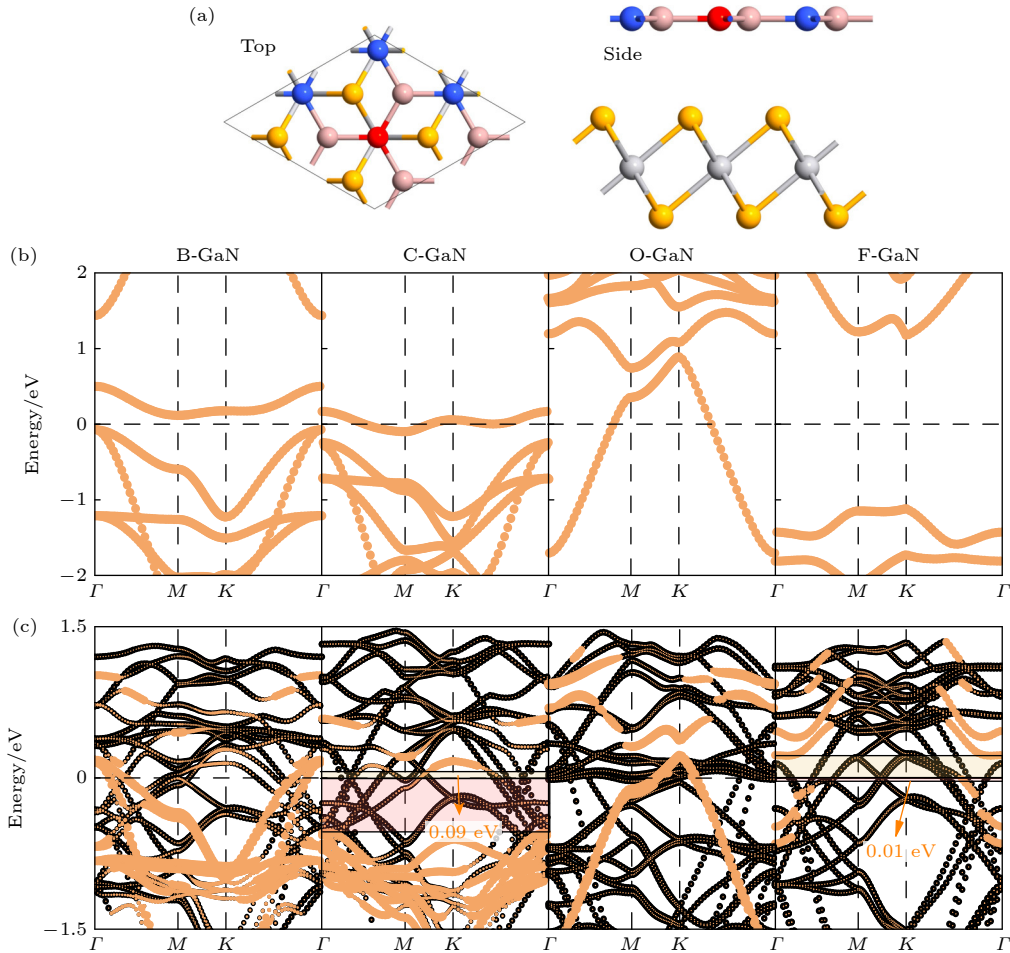


图 8 化学掺杂效应 (a) X-GaN/1T-VSe₂ 异质结的原子结构正视图 and 侧视图; (b) X-GaN 的能带结构; (c) X-GaN/1T-VSe₂ 异质结的能带结构, 其中黑色表示 1T-VSe₂ 层的贡献, 橙色表示 X-GaN 层的贡献, 上下两个方框分别表示 $\Phi_{B,n}$ 和 $\Phi_{B,p}$

Fig. 8. Chemical doping effects: (a) Top and side views of atomic structure for X-GaN/1T-VSe₂ heterostructure; (b) energy band structure of X-GaN; (c) the energy band structure of the X-GaN/1T-VSe₂ heterostructure, where black represents the contribution of 1T-VSe₂ layer, orange denotes the contribution of GaN layer, and the upper and lower two boxes around the Fermi level indicate $\Phi_{B,n}$ and $\Phi_{B,p}$, respectively.

影响. 图 8(c) 为 X-GaN/1T-VSe₂ 异质结的投影能带结构, 由于掺杂异质结选取的单胞大于本征异质结, 所以能带折叠使我们在布里渊区观察到更多的子能带. 对于 B-GaN/1T-VSe₂ 异质结, 虽然 B-GaN 单层保持半导体性质不变, 但能带结构整体上移, 这是对半导体 GaN 层引入 p 型掺杂而导致的, 特别是 VBM 穿过了费米能级, 实现了欧姆接触, 因此该结构具有较大的应用潜力. 而对于 C-GaN/1T-VSe₂, 单层的 C-GaN 表现为金属性, 形成异质结后, 由原来的金属变为半导体, 其 $\Phi_{B,n} = 0.09$ eV, 而 $\Phi_{B,p} = 0.54$ eV, 即 $\Phi_{B,n} \ll \Phi_{B,p}$, 所以该结构为准欧姆接触. 从 O-GaN/1T-VSe₂ 能带图可以看出, 在形成异质结前后, O-GaN 的金属性不变, 即 O-GaN 与 1T-VSe₂ 形成金属-金属接触, 应该说这种

结构对于构建纳米电子器件意义不大. 最后是 F-GaN/1T-VSe₂, F-GaN 在形成异质结前后, 均为半导体, 形成异质结后, F-GaN 能带整体下移, 这与引入 n 型掺杂有关, 同时看到在 F-GaN 单层原带隙里面形成杂化子能带, 使 $\Phi_{B,p}$ 变得很小, 即 $\Phi_{B,p} = 0.01$ eV, 而 $\Phi_{B,n} = 0.22$ eV, 即 $\Phi_{B,n} \gg \Phi_{B,p}$, 所以该结构也为准欧姆接触.

总之, 引入化学掺杂, 异质结较容易实现由肖特基接触到欧姆接触的转变, 例如引入 B 原子使 GaN/1T-VSe₂ 异质结实现典型的欧姆接触, 而 C 和 F 原子掺杂, 使 GaN/1T-VSe₂ 异质结实现准欧姆接触. 这些异质结都具有较高的应用价值, 特别对于研发新型高性能纳米场效应管具有重要意义.

4 结 论

目前, 实验上已成功制备 GaN 及 1T-VSe₂ 单层. 本文理论地构建了 GaN/1T-VSe₂ 异质结模型, 并利用基于 DFT 的第一性原理研究了其稳定性、肖特基势垒特性及其调控效应. 考虑了 5 种不同的堆叠方式构建异质结, 其晶格失配引起的最大平均绝对应变为 2.21%, 并选取能量相对值最低的构型进行研究. 计算的形成功能及淬火分子动力学模拟表明该构型 (异质结) 是稳定的. 本征异质结为肖特基势垒高度为 0.82 eV 的 p 型肖特基接触, 为了扩展其应用, 利用物理及化学掺杂方法对其进行调控, 特别是寻求实现欧姆接触. 研究表明不管施加拉伸或压缩应变, 异质结 S1 始终保持 p 型肖特基接触不变, 没有出现欧姆接触, 这也许是因为异质结界面的内建电场很弱, 即使改变层间距, 但对两单层相对静电势能差的影响非常小, 使得 GaN 层的能带结构相对异质结的费米能级不发生明显的移动. 而外电场则不同, 具有明显的调控效应, 较高的正向电场能使异质结从肖特基接触转变为欧姆接触, 较高的反向电场能导致 p 型肖特基接触转变为 n 型肖特基接触, 但在计算的反向电场范围内, 未能实现欧姆接触. 特别是实施化学掺杂, 异质结较容易实现由肖特基接触到欧姆接触的转变, 例如引入 B 原子使 GaN/1T-VSe₂ 异质结实现典型的欧姆接触, 而 C 和 F 原子掺杂, 使 GaN/1T-VSe₂ 异质结实现准欧姆接触. 这些研究对于研发新型高性能纳米场效应管具有重要意义.

参考文献

- [1] Shokri A, Esrafilian M, Salami N 2020 *Physica E* **119** 113908
- [2] Althib H 2021 *Results Phys.* **22** 103943
- [3] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [4] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [5] Dai X Y, Mitchell I, Kim S, An H, Ding F 2022 *Carbon* **199** 233
- [6] Shu Y, He K J, Xiong R, Cui Z, Yang X H, Xu C, Zheng J J, Wen C L, Wu B, Sa B S 2022 *Appl. Surf. Sci.* **604** 154540
- [7] Galashev A Y, Vorob'ev A S 2022 *Physica E* **138** 115120
- [8] Karim H, Shahnaz, Batool M, Yaqub M, Saleem M, Gilani M A, Tabassum S 2022 *Appl. Surf. Sci.* **596** 153618
- [9] Zhuo Q Z, Liu X J, OU J L, Fu Z T, Xu X Y 2022 *Appl. Surf. Sci.* **598** 153719
- [10] Bi S H, Bi P, Xue M Z 2021 *Comp. Mater. Sci.* **197** 110603
- [11] Xie M Q, Li Y, Liu X H, Li X A 2022 *Appl. Surf. Sci.* **591** 153198
- [12] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [13] Butler S Z, Hollen S M, Cao L, et al. 2013 *ACS Nano* **7** 2898
- [14] Anasori B, Lukatskaya M R, Gogotsi Y 2017 *Nat. Rev. Mater.* **2** 16098
- [15] Naguib M, Kurtoglu M, Presser V, Lu J, Niu J, Min H, Hultman L, Gogotsi Y, Barsoum M W 2011 *Adv. Mater.* **23** 4248
- [16] Song J G, Park J, Lee W, Choi T, Jung H, Lee C W, Hwang S H, Myoung J M, Jung J H, Kim S H, Lansalot-Matras C, Kim H 2013 *ACS Nano* **7** 11333
- [17] Chang H Y, Yogeesh M N, Ghosh R, Rai A, Sanne A, Yang S, Lu N, Banerjee S K, Akinwande D 2016 *Adv. Mater.* **28** 1818
- [18] Choi W B, Choudhary N, Han G H, Park J, Akinwande D, Lee Y H 2017 *Mater. Today* **20** 116
- [19] Kim C, Moon I, Lee D, Choi M S, Ahmed F, Nam S, Cho Y, Shin H J, Park S, Yoo W J 2017 *ACS Nano* **11** 1588
- [20] Song N H, Ling H, Wang Y S, Zhang L Y, Yang Y Y, Jia Y 2019 *J. Solid State Chem.* **269** 513
- [21] Allain A, Kang J H, Banerjee K, Kis A 2015 *Nat. Mater.* **14** 1195
- [22] Tung R T 2014 *Appl. Phys. Rev.* **1** 54
- [23] Popov I, Seifert G, Tomanek D 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 156802
- [24] Chung K, Lee C, Yi G 2010 *Science* **330** 655
- [25] Kobayashi Y, Kumakura K, Akasaka T, Makimoto T 2012 *Nature* **484** 223
- [26] Freeman C L, Claeysens F, Allan N L, Harding J H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 066102
- [27] Ahin H, Cahangirov S, Topsakal M, Bekaroglu E, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155453
- [28] Al Balushi Z Y, Wang K, Ghosh R K, Vilá R A, Eichfeld S M, Caldwell J D, Qin X Y, Lin Y C, DeSario P A, Stone G, Subramanian S, Paul D F, Wallace R M, Datta S, Redwing J M, Robinson J A 2016 *Nat. Mater.* **15** 1166
- [29] Shen P F, Li E L, Zhang L, Zhao H Y, Cui Z, Ma D M 2021 *Superlattice. Microst.* **156** 106930
- [30] Song J, Ding Z, Liu X F, Huang Z C, Li J W, Wei J M, Luo Z J, Wang J H, Guo X 2021 *Comp. Mater. Sci.* **197** 110644
- [31] González-Ariza R, Martínez-Castro O, Moreno-Armenta M G, Gonzalez-Garcia A, Lopez-Perez W, Gonzalez-Hernandez R 2019 *Physica B* **569** 57
- [32] Zhao Q, Xiong Z H, Qin Z Z, Chen L L, Wu N, Li X X 2016 *J. Phys. Chem. Solids* **91** 1
- [33] Cui Z, Wang X, Li E L, Ding Y C, Sun C L, Sun M L 2018 *Nanoscale Res. Lett.* **13** 207
- [34] Bonilla M, Kolekar S, Ma Y J, Diaz H C, Kalappattil V, Das R, Eggers T, Gutierrez H R, Phan M H, Batzill M 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 289
- [35] Chen P, Pai W W, Chan Y H, Madhavan V, Chou M Y, Mo S K, Fedorov A V, Chiang T C 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 196402
- [36] Feng J G, Biswas D, Rajan A, et al. 2018 *Nano Lett.* **18** 4493
- [37] Zhang Z P, Gong Y, Zou X L, Liu P R, Yang P F, Shi J P, Zhao L Y, Zhang Q, Gu L, Zhang Y F 2019 *ACS Nano* **13** 885
- [38] Hu H K, Zhang Z, Ouyang G 2020 *Appl. Surf. Sci.* **517** 146168
- [39] Ma Y D, Dai Y, Guo M, Niu C W, Yua L, Huang B B 2011

- Nanoscale* **3** 2301
- [40] Li Y H, Zhang Z H, Fan Z Q, Zhou R L 2020 *J. Phys. Condens. Matter* **32** 015303
- [41] Zhao T, Fan Z Q, Zhang Z H, Zhou R L 2019 *J. Phys. D Appl. Phys.* **52** 475301
- [42] Hu R, Li Y H, Zhang Z H, Fan Z Q, Sun L 2019 *J. Mater. Chem. C* **7** 7745
- [43] Zhang L, Chen H L, Yi Y, Zhang Z H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 177304 (in Chinese) [张仑, 陈红丽, 义钰, 张振华 2022 物理学报 **71** 177304]
- [44] Hu J K, Zhang Z H, Fan Z Q, Zhou R L 2019 *Nanotechnology* **30** 485703
- [45] Si J G, Lu W J, Wu H Y, Lü H Y, Liang X, Li Q J, Sun Y P 2020 *Phys. Rev. B* **101** 235405
- [46] Ma Y D, Dai Y, Guo M, Niu C W, Zhu Y T, Huang B B 2012 *ACS Nano* **6** 1695
- [47] Grimme S 2006 *J. Comput. Chem.* **27** 1787
- [48] Meng X S, Liu H L, Lin L K, Cheng Y B, Hou X, Zhao S Y, Lu H M, Meng X K 2021 *Appl. Surf. Sci.* **539** 148302
- [49] Xia C X, Peng Y T, Wei S Y, Jia Y 2013 *Acta Mater.* **61** 7720
- [50] Fu H R, Yan B H, Wu S C, Felser C, Chang C R 2016 *New J. Phys.* **18** 113038
- [51] Yadava C S, Rastogi A K 2010 *Solid State Commun.* **150** 648
- [52] Dai J Q, Yuan J, Ke C, Wei Z C 2021 *Appl. Surf. Sci.* **547** 149206
- [53] Pham K, Nguyen C, Nguyen C, Cuong P, Hieu N 2021 *New. J. Chem.* **45** 5509
- [54] Cui Z, Ren K, Zhao Y M, Wang X, Shu H B, Yu J, Tang W C, Sun M L 2019 *Appl. Surf. Sci.* **492** 513
- [55] Vu T V, Hieu N V, Phuc H V, Hieu N N, Bui H D, Idrees M, Amin B, Nguyen C V 2020 *Appl. Surf. Sci.* **507** 145036
- [56] Liu Y H, Li H, Liu F B, Sun S, Zhou G, Qing T, Zhang S H, Lu J 2022 *Solid State Commun.* **348** 114770
- [57] Liu Y, Zhang W D, Lü B H, Ge Y, Zhang R G, Wang B J, Chen Z H, Zhang Q, Sang S B 2022 *Surf. Interfaces* **30** 101823
- [58] Liang Q, Qian G L, Luo X Y, Liang Y C, Xie Q 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 217301 (in Chinese) [梁前, 钱国林, 罗祥燕, 梁永超, 谢泉 2022 物理学报 **71** 217301]
- [59] Zhang F, Jia L Q, Sun X T, Dai X Q, Huang Q X, Li W 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 157302 (in Chinese) [张芳, 贾利群, 孙现亭, 戴宪起, 黄奇祥, 李伟 2020 物理学报 **69** 157302]
- [60] Pérez-Tomás A, Fontserè A 2011 *Solid State Electron.* **56** 201
- [61] Hu J S, Duan W Y, He H, Lü H, Huang C Y, Ma X G 2019 *J. Mater. Chem. C* **7** 7798
- [62] Hao G Q, Zhang R, Zhang W J, Chen N, Ye X J, Li H B 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 017104 (in Chinese) [郝国强, 张瑞, 张文静, 陈娜, 叶晓军, 李红波 2022 物理学报 **71** 017104]
- [63] Tang J X, Fan Z Q, Deng X Q, Zhang Z H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 116101 (in Chinese) [汤家鑫, 范志强, 邓小清, 张振华 2022 物理学报 **71** 116101]

Electrical contact characteristics and regulatory effects of GaN/VSe₂ van der Waals heterojunction*

Tang Jia-Xin[†] Li Zhan-Hai Deng Xiao-Qing Zhang Zhen-Hua[‡]

(Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 13 February 2023; revised manuscript received 24 May 2023)

Abstract

Reducing the Schottky barrier at the metal-semiconductor interface and achieving Ohmic contacts are very important for developing high-performance Schottky field-effect devices. Based on the fact that GaN and 1T-VSe₂ monolayers have been successfully prepared experimentally, we theoretically construct a GaN/1T-VSe₂ heterojunction model and investigate its stability, Schottky barrier property and its modulation effects by using first-principle method. The calculated formation energy and the molecular dynamics simulations show that the constructed heterojunction is very stable, meaning that it can be realized experimentally. The intrinsic heterojunction holds a p-type Schottky contact and always keeps the same p-type Schottky contact when tensile or compressive strain is applied. But when the external electric field is applied, the situation is different. For example, a higher forward electric field can cause the heterojunction to change from a Schottky contact into an Ohmic contact, and a higher reverse electric field can lead to a variation from a p-type Schottky contact to an n-type Schottky contact. In particular, by implementing chemical doping, the transition from Schottky contact to Ohmic contact can be achieved more easily for the heterojunction. For example, the introduction of B atom enables the GaN/1T-VSe₂ heterojunction to realize a typical Ohmic contact, while for C and F atom doping, the GaN/1T-VSe₂ heterojunction can achieve a quasi-Ohmic contact. These studies provide a theoretical reference for the practical application of the suggested heterojunction, and are of very important in designing novel high-performance nano-scale electronic devices.

Keywords: van der Waals heterojunction, Schottky barrier, Ohmic contact, physical regulation, chemical doping

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv, 73.30.+y

DOI: 10.7498/aps.72.20230191

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61771076), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2021JJ30733), and the Scientific Research Innovation Foundation for Postgraduate of Changsha University of Science and Technology, China (Grant No. CXCLY2022146).

[†] Corresponding author. E-mail: csustjxt@163.com

[‡] Corresponding author. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn



GaN/VSe₂范德瓦耳斯异质结电接触特性及调控效应

汤家鑫 李占海 邓小清 张振华

Electrical contact characteristics and regulatory effects of GaN/VSe₂ van der Waals heterojunction

Tang Jia-Xin Li Zhan-Hai Deng Xiao-Qing Zhang Zhen-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 167101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230191

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230191>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

电场对graphene/InSe范德瓦耳斯异质结肖特基势垒的调控

Tuning Schottky barrier in graphene/InSe van der Waals heterostructures by electric field

物理学报. 2020, 69(15): 157302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191987>

As/HfS₂范德瓦耳斯异质结电子光学特性及量子调控效应

Electronic and optical properties and quantum tuning effects of As/HfS₂ van der Waals heterostructure

物理学报. 2022, 71(17): 177304 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220371>

CuPc/MoS₂范德瓦耳斯异质结荧光特性

Photoluminescence properties of CuPc/MoS₂ van der Waals heterostructure

物理学报. 2022, 71(12): 128103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220132>

氧化铋/铯铅氯范德瓦耳斯异质结环境稳定性与光电性质的第一性原理研究

A first-principles study on environmental stability and optoelectronic properties of bismuth oxychloride/ cesium lead chloride van der Waals heterojunctions

物理学报. 2022, 71(19): 197901 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220544>

非对称氧掺杂对石墨烯/二硒化钼异质结肖特基势垒的调控

Regulation and control of Schottky barrier in graphene/MoSe₂ heterojunction by asymmetric oxygen doping

物理学报. 2022, 71(1): 017104 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210238>

应力调控BlueP/XTe₂ (X = Mo, W)范德瓦耳斯异质结电子结构及光学性质理论研究

Tunable electronic structure and optical properties of BlueP/XTe₂ (X = Mo, W) van der Waals heterostructures by strain

物理学报. 2021, 70(6): 067101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201728>