

上海微系统所等在新型碳基二维半导体材料基本物性研究中获进展

以石墨烯为代表的碳基二维材料自发现以来受到了广泛关注。然而，石墨烯的零带隙半导体性质严重限制了其在微电子器件领域的应用。针对该情况，中国科学院上海微系统与信息技术研究所研究人员等自2013年开展新型碳基二维半导体材料的制备研究，2014年1月成功制备了由碳和氮原子构成的类石墨烯蜂窝状无孔有序结构半导体C₃N单层材料（图1），并发现该材料在电子注入后产生的铁磁长程序。C₃N的成功合成弥补了石墨烯无带隙的缺憾，为碳基纳米材料在微电子器件的应用提供了新的选择，并引起广泛关注。然而，相比于目前研究已经比较成熟的石墨烯，C₃N的研究起步较晚，该材料的基本物性研究仍有大量空白有待填补。

研究人员于2016年初步实现AA'及AB'堆垛双层C₃N的制备（图2）。在此基础上，他们与华东师范大学研究员袁清红团队通过近5年努力，借助实验技术与理论研究，在双层C₃N的带隙性质、运输性质等研究领域取得突破，进一步证明双层C₃N在纳米电子学等领域的重要应用潜力。

该工作证明了通过控制堆垛方式实现双层C₃N从半导体到金属性转变的可行性。与本征带隙为1.23 eV的单层C₃N相比，双层C₃N的带隙大致可以分为三种：接近金属性的AA和AA'堆垛、带隙比单层减少将近30%的AB和AB'堆垛、与单层带隙相近的双层摩尔堆垛。上述带隙变化可归因于顶层与底层C₃N间pz轨道耦合下费米能级附近能带的劈裂。在双层之间相互作用势接近的前提下，价带顶和导带底波函数重叠的数目决定了能带劈裂程度，进而影响带隙。其中AA、AA'、AB、AB'等双层C₃N中，两层波函数重叠的数目存在两倍关系，带隙劈裂值为近似两倍关系。而对于双层摩尔旋转条纹结构，上下层原子基本错开，pz轨道的重叠有限，因此其带隙与单层C₃N接近。

更重要的是，研究还发现通过施加外部电场可实现AB'堆垛双层C₃N带隙的调制。实验结果表明，在1.4 V nm⁻¹的外加电场下，AB'堆垛的双层C₃N的带隙下降约0.6 eV，可实现从半导体到金属性的转变（图3）。

上述工作是C₃N材料实验与理论研究的重要突破，为进一步构建新型全碳微电子器件提供了支撑。相关研究成果以Stacking-Induced Bandgap Engineering of 2D-Bilayer C₃N为题在线发表在Nature Electronics上。相关工作得到国家自然科学基金、上海微系统所新微之星项目等的支持。

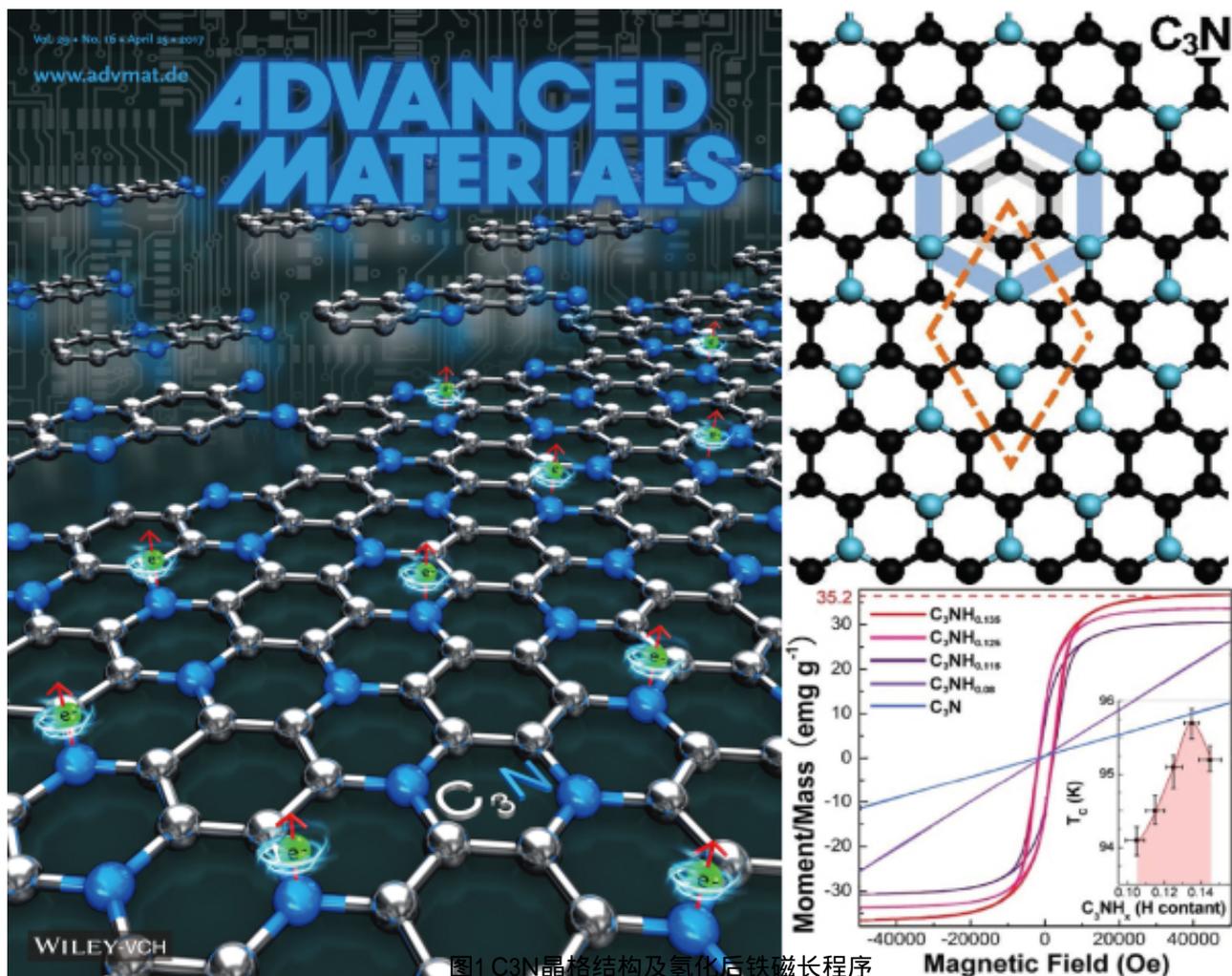


图1 C₃N晶格结构及氧化后铁磁长程序

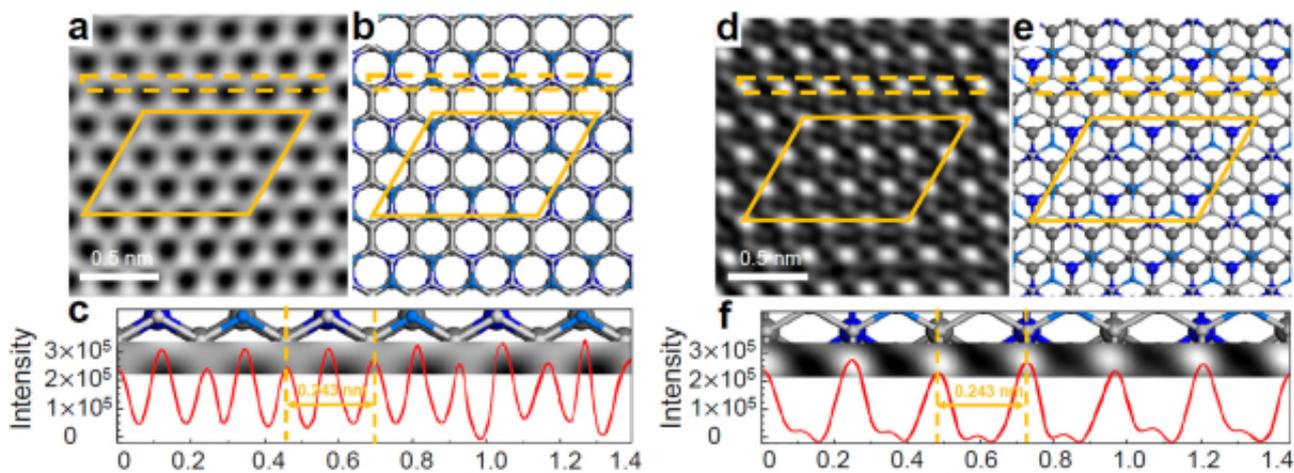


图2 AA' (a-b)及AB' (d-f) 堆垛双层C₃N的HAADF-STEM图像

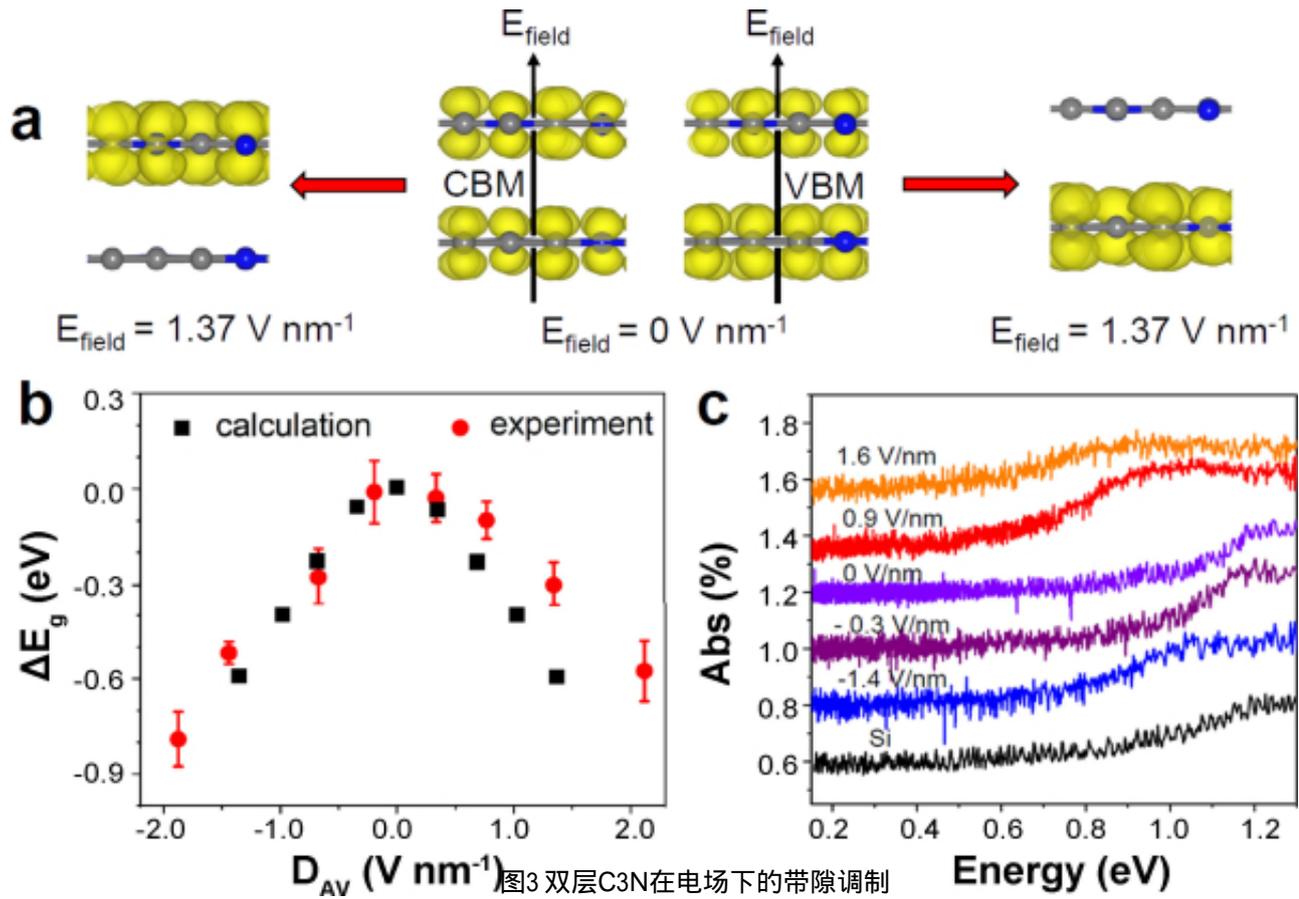


图3 双层C3N在电场下的带隙调制

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/174928.html>