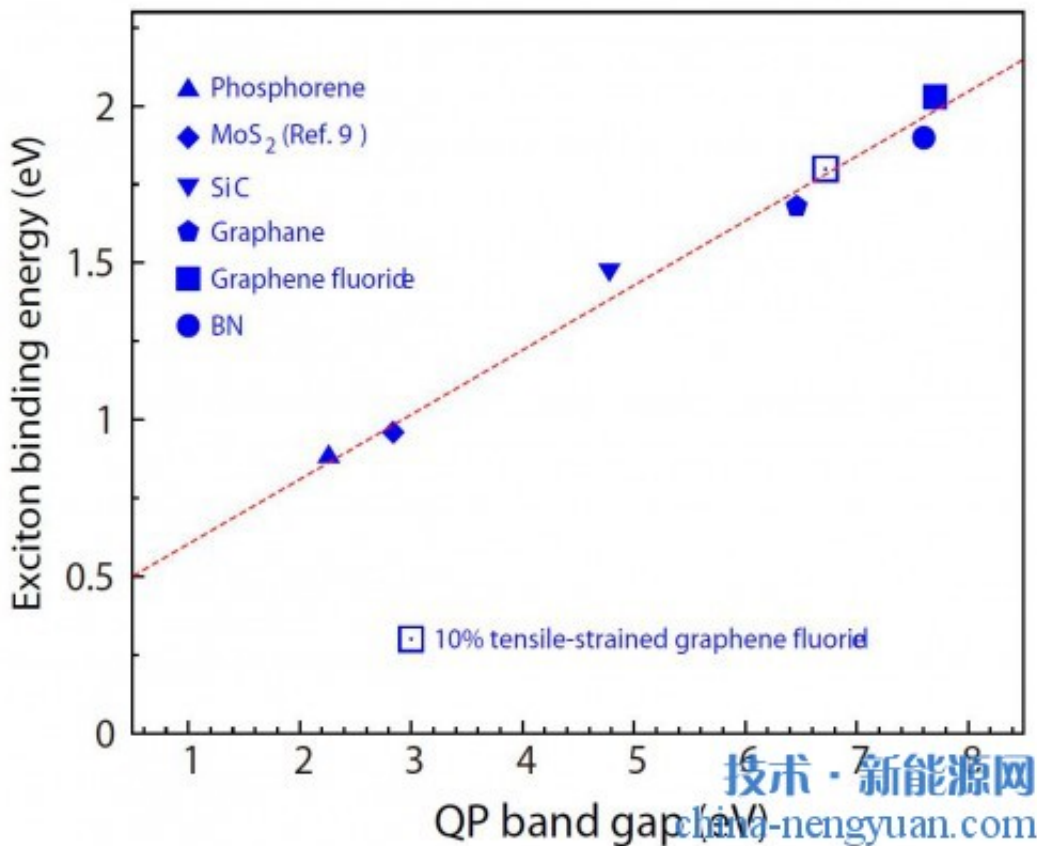


## 中国科大在二维材料激子效应研究中取得新进展



二维半导体体系激子结合能与准粒子能隙之间的线性标度关系

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室在二维材料激子效应的理论研究方面取得新进展。研究人员利用GW-BSE方法计算了单层黑磷、氟化石墨烯、氮化硼等一系列二维材料的激子结合能，并揭示出此类材料的激子结合能与其准粒子能隙之间存在显著的线性标度关系。该研究成果发表在8月7日的《物理评论快报》上，实验室的博士后Jinho Choi与博士崔萍为共同第一作者。

激子结合能也称激子效应，是分离组成激子的电子-空穴对所需要提供的能量，其大小在许多基于半导体的光伏与光电器件的工作效率中起着至关重要的作用。精确确定不同维度的各种材料的激子结合能，具有广泛的基础与应用价值。在已报道的不同维度的材料体系里，激子结合能的变化范围很广。三维体系，如半导体体材料，由于有效的库仑屏蔽作用，使得这类材料中只能形成弱束缚的激子，其结合能一般只有几十毫电子伏特。随着体系的维度降低，库仑屏蔽作用也会减弱，从而导致更强的激子效应。近期的研究发现，很多一维和二维材料的激子结合能都比相应的体材料大得多，相应的激子效应也更加显著，从而可为设计新的能量转换器件提供新机遇。

在以往的研究里，每发现一种新的有重要影响的低维材料体系，人们总习惯采用最先进的计算和实验方法确定其激子结合能。在新的研究里，研究人员利用GW-Bethe-Salpeter-Equation(GW-BSE)方法首先计算了实验上新近发现的两种层状二维材料的激子结合能：黑磷和氟化石墨烯。它们的激子结合能分别是0.85eV和2.03eV，再次验证了二维材料由于库仑屏蔽作用的减弱而具有很强的激子效应。更重要的是，他们将 these 结果与其它几个有代表性的层状材料体系的激子效应作为整体考虑，发现二维半导体材料的激子结合能与准粒子能隙之间存在显著的线性标度关系。利用类氢模型，结合k.p微扰理论，他们进一步解释了这种线性关系存在的内在物理原因，并用具体例子展示了这一标度关系对确定其它二维体系激子效应的普适性预测功能。

文章在评审过程中得到多位审稿人的肯定，尤其是在以统一精度标准下新的计算结果证明七种常见的二维体系都满足同一标度规律这一主要方面。一位审稿人评论到，“这些结果不仅在预言二维体系所遵从的线性标度规律方面有耐人回味的创意，也在规范该领域的严谨度方面迈出了显著的新步伐。”

上述研究得到了国家自然科学基金委、教育部、中国科学院和科技部的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/81678.html>