

铁电异质结 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的接触性质及调控\*

孙智玄 赵长松 程芳†

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114)

(2024 年 12 月 10 日收到; 2025 年 2 月 1 日收到修改稿)

单层的铁电半导体 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 因具有卓越的延展性, 极高的载流子迁移率以及独特的面外非对称极化特性而备受关注. 利用铁电半导体 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 面外非对称极化特性, 本研究构建了 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 铁电异质结, 并选用了两个能量最稳定且 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 极化强度方向不同的异质结 PD1 ( $P_{\downarrow}$ ) 和 PU2 ( $P_{\uparrow}$ ), 对其结构稳定性和电接触性质进行相关研究. 结果表明, 由于 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 极化强度方向的不同, 本征态下的异质结 PD1 和 PU2 分别形成了 N 型肖特基接触和 P 型肖特基接触. 改变铁电半导体 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的极化特性, 能改变铁电异质结 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 肖特基势垒的接触类型, 这为设计多功能的肖特基器件提供了一种实用的方法. 对于异质结 PD1 和 PU2, 施加外加正电场或者双轴应变拉伸, 都能够有效地实现肖特基接触至欧姆接触的转变. 这些结果为高性能电接触界面的二维铁电纳米器件提供了理论参考.

**关键词:** 金属-半导体异质结, 肖特基接触, 欧姆接触, 电接触**PACS:** 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv, 73.40.Lq**DOI:** 10.7498/aps.74.20241705**CSTR:** 32037.14.aps.74.20241705

## 1 引言

由于接触势垒的不同, 金属性与半导体性材料构成的异质结接触通常被划分为两大类: 肖特基接触 (SC) 与欧姆接触 (OC)<sup>[1,2]</sup>. 肖特基接触是一种整流型的金属-半导体接触<sup>[3]</sup>, 这一过程会导致半导体能带结构弯曲, 并随之在界面处形成肖特基势垒<sup>[4]</sup>. 这个势垒的存在使得电流只能在一个方向上流动, 即从金属流向半导体 (正向偏置) 时容易通过, 而反向偏置时则很难通过. 欧姆接触是一种理想的金属-半导体接触, 它提供了一个低电阻的路径, 允许电流在金属和半导体之间自由流动. 在欧姆接触中, 金属与半导体之间的肖特基势垒高度 (SBH) 非常小, 接近于零, 这一特性为高速、低功耗电子设备的实现提供了有力保障. 因此, 若要达

成高性能、低功耗电子器件的目标, 需要选用具备高载流子迁移率特性的通道材料, 同时确保金属-半导体界面的接触电阻足够低<sup>[5,6]</sup>.

目前已有多种调控方法来改变 SBH, 而石墨烯与非对称极化半导体构成的异质结接触, 为异质结的调控提供了新的思路. 由于半导体原子终端的影响, 使得在非对称极化半导体形成的异质结在接触面上表现出固有的偶极, 如 GR/Ga<sub>2</sub>SSe<sup>[7]</sup>, GR/PtSSe<sup>[8]</sup>, Gr/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub><sup>[9]</sup>. Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 是一类具有自发极化的铁电半导体  $M_2X_3$  ( $M = \text{Ga, In}; X = \text{S, Se}$ ) 家族的成员, 现已被实验合成<sup>[10-12]</sup>. 单层的 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 展现出了卓越的延展性, 在施加了 3% 的应变条件下, 载流子的迁移率可高达  $1800 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ <sup>[13]</sup>. 目前基于铁电材料 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 进行了一系列异质结的构造, 如 Gr/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub><sup>[9]</sup>, InSe/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub><sup>[14]</sup>, Au/In<sub>4</sub>Se<sub>3</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub><sup>[15]</sup>, 发现它们在纳米器件、光电器件以及场效应晶体管

\* 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [chengfang@csust.edu.cn](mailto:chengfang@csust.edu.cn)

中有着诸多优势, 为设计具有高性能电接触界面的器件做出了理论参考. 1 T 相 NbTe<sub>2</sub> 是一种少层 2D 过渡金属二硫族化合物 (TMDs) 材料, 可通过液相剥离 (LPE) 法<sup>[16]</sup>、湿球磨诱导分层法<sup>[17]</sup>、化学气相沉积法<sup>[18]</sup> 等方法进行制备. Sushant 与 Ramamurthy<sup>[19]</sup> 和 Ataca 等<sup>[20]</sup> 分别研究了 T-NbTe<sub>2</sub> 的评估交换相关函数以及稳定性和金属性. T-NbTe<sub>2</sub> 在一定的条件下可呈现超导性, 而且具有非线性吸收特性和优异的光学响应<sup>[16]</sup>. 目前基于 T-NbTe<sub>2</sub> 进行了一系列异质结的构造, 例如 T-NbTe<sub>2</sub>/SnS<sub>2</sub><sup>[21]</sup>, T-NbTe<sub>2</sub>/ $\alpha$ -In<sub>2</sub>S<sub>3</sub><sup>[22]</sup> 等, 发现其在场效应管和二极管等器件上有着非常广阔的应用前景.

为了进一步探索铁电半导体 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 面外非对称极化特性, 我们考虑了二维材料 T-NbTe<sub>2</sub> 与两种不同极化特性的铁电半导体 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 组成的二维异质结<sup>[23,24]</sup>, 对结构稳定性、以及外加电场或外加双轴应力对接触性质的调控进行深入研究. 通过结合能、AIMD 模拟、声子谱等计算, 表明 T-NbTe<sub>2</sub> 与两种不同极化特性的铁电半导体 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 构成的异质结结构稳定, 在实验下具有制备的可能性. 通过改变 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的极化强度方向, 可以改变异质结的接触类型. 具体来说, 就是当模型由 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> (Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的面外极化强度方向向下) 转变成 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> (Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的面外极化强度方向向上) 时, 接触类型由 N 型肖特基接触转变成了 P 型肖特基接触, 实现了肖特基接触的转换, 为设计多功能的肖特基器件提供了一种实用的方法. 同时施加外电场和双轴应变, 都实现了肖特基接触至欧姆接触的转变, 为制作高性能电接触界面的二维铁电纳米器件提供了理论参考.

## 2 计算方法

本文所有计算均使用 Quantum Atomistix Toolkit 软件包来进行<sup>[25]</sup>, 采用基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理方法进行模型几何形状的优化以及结构的稳定性等计算. 在求 Kohn-Sham 方程过程中, 交换关联势采用了广义梯度近似 (GGA) 中 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函<sup>[26]</sup>, 原子与价电子之间的相互作用采用 Troullier-Martins 模守恒赝势<sup>[27]</sup>. 选用 DZP (Double  $\zeta$  + Polarization) 作为基函数组<sup>[28]</sup>, 将价电子的波函数通过

原子轨道的线性组合 (LACO) 进行展开. 综合计算效率、精度以及时间成本的考虑, 使用了  $14 \times 14 \times 1$  的  $\Gamma$  中心  $k$  点网格对第一布里渊区进行采样, 将能量截断半径设定为 185 Ha, 几何模型优化收敛标准能量  $10^{-5}$  eV, 原子间的相互作用的收敛准则为  $10^{-2}$  eV/Å, 晶格内应力小于 0.01 GPa. 为了消除模型与其“像”之间的相互作用, 我们在非周期  $z$  轴方向上设置了一个大于 20 Å 的真空层. 为了方便, 所有系统的费米能级都设置为 0.0 eV. 计算中同时考虑界面偶极子修正和 Grimme 的 DFT-D3 方法色散修正<sup>[29]</sup>. 在几何模型结构优化后, 才会进行几何模型的稳定性评估、电子结构以及后续的计算工作.

## 3 结果与讨论

### 3.1 异质结结构模型与稳定性

为研究异质结的界面性质, 本研究首先对各单层材料的几何结构和电子性质进行了详细探讨. T-NbTe<sub>2</sub> 属于  $P3m1$  空间群, Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的原子构型由堆叠的 S-Ga-S-Ga-S 原子层组成. 优化后的单层原子结构如图 1(a)–(c) 所示, T-NbTe<sub>2</sub>(Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) 的晶格常数是 3.653 Å (3.628 Å), T-NbTe<sub>2</sub> 的功函数为 4.767 eV (PBE) 和 5.099 eV (HSE06), Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的功函数为 4.630 eV (PBE) 和 4.875 eV (HSE06), 这与前人研究结果非常接近<sup>[30–33]</sup>. 计算的能带结构如图 1(d), (e) 所示, T-NbTe<sub>2</sub> 是无磁金属, Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 是带隙为 1.743 eV (PBE), 2.628 eV (HSE06) 的半导体, 结果与之前的研究都很接近<sup>[13,34]</sup>.

对单层材料 T-NbTe<sub>2</sub> 与 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, 采用  $1 \times 1$  的单胞来构建 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 异质结. 晶格失配率定义为  $\sigma = (\alpha_1 - \alpha_2)/\alpha_1$ , 式中  $\alpha_1$  和  $\alpha_2$  分别为 T-NbTe<sub>2</sub> 和 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的晶格常数. 计算得到异质结的晶格失配率约为 0.684%, 这表明构成的异质结具有非常高的晶格匹配度, 可以确保理论模拟更接近实验情况. 由于单层 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 面外非对称极化的特性, 使得上下两侧的 S 原子发生了分化, 从而在构建的异质结时出现了两种异质结: 一种  $\vec{P}$  向下的 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 异质结 (命名为 PD), 一种  $\vec{P}$  向上的 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 异质结 (命名为 PU). 在构建异质结时, 我们考虑了 6 种堆垛情况. 图 2(a) 给出了优化后的正视图和侧视图, 其中 PD1–PD3 堆垛为 T-NbTe<sub>2</sub> 中的 Nb 原子分别与 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 层中

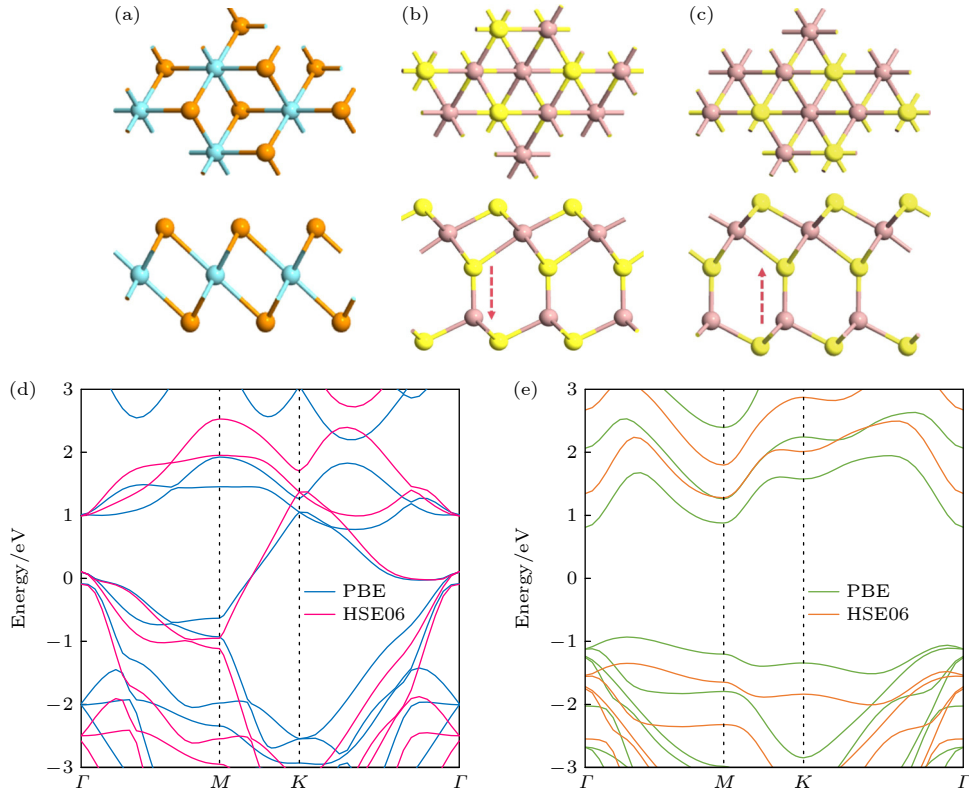


图1 单层原子结构 (a) T-NbTe<sub>2</sub>, (b) Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> (极化向下) 和 (c) Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> (极化向上) 的正视图 and 侧视图. 红色箭头表示极化方向. 单层 (d) T-NbTe<sub>2</sub> 和 (e) Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 能带结构

Fig. 1. Top-view and side-view of single-layer atomic structures: (a) T-NbTe<sub>2</sub>; (b) Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> (polarized downward); (c) Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> (polarized upward). The red arrow indicates the polarization direction. Energy band structures of single layers: (d) T-NbTe<sub>2</sub>; (e) Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>.

最上层的 S 原子, 中间层的 S 原子以及上中层之间的 Ga 原子对齐. 用同样的对齐方式得到 PU1—PU3 堆垛结构. 结合能定义为

$$E_b = \frac{E_{\text{vdWH}} - E_{\text{NbTe}_2} - E_{\text{Ga}_2\text{S}_3}}{A}, \quad (1)$$

其中  $E_{\text{vdWH}}$ ,  $E_{\text{NbTe}_2}$  以及  $E_{\text{Ga}_2\text{S}_3}$  分别是异质结, T-NbTe<sub>2</sub> 单层以及 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 单层的总能量;  $A$  表示异质结界面的面积. 结合能计算结果如图 2(b) 所示, PD1 堆垛和 PU2 堆垛异质结的结合能最低, 分别为  $-0.156 \text{ eV/\AA}$ ,  $-0.163 \text{ eV/\AA}$ , 是最稳定的异质结. 它们的结合能比多数 vdWHs 要低, 如 TaS<sub>2</sub>/MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub><sup>[35]</sup>, Gr/WSeTe<sup>[36]</sup> 等, 证实了异质结结构的稳定性. 为了可视化异质结的成键特征, 计算了 6 种异质结堆叠构型的电子定位函数, 发现 6 种结构相似. 因此, 这里只给出了 A 型和 B 型中结合能最低的堆叠构型, 即 PD1 和 PU2 作为代表, 如图 2(c) 所示, 可以明显看出电子局域化只存在于每一层中, 两层之间没有化学键, 只有较弱的范德瓦耳斯力发生键合.

为了评估 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 异质结的热力学稳

定性, 选取了最稳定的异质结 PD1 和 PU2, 使用了带有 Nose Hoover 热浴方案的 NVT 规范系综<sup>[37]</sup>. 在分子动力学模拟过程中, 热浴温度固定在 300 K, 三个并发调温器模拟过程持续 5 ps. 从图 3(a) 和图 3(b) 中的模拟结果可以看到, 整个模拟过程中总能量随时间的变化幅度很小, 而且结构中的原子没有偏离其平衡位置, 没有出现几何重构和断键现象<sup>[38]</sup>, 因此表明 PD1 和 PU2 具有良好的热力学稳定性. 我们同时计算了 PD1 和 PU2 的声子谱, 如图 3(c) 和图 3(d) 所示, 发现异质结 PD1 和 PU2 的声子谱在布里渊区没有出现虚频, 证明了  $P_{\downarrow}$  的 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 异质结和  $P_{\uparrow}$  的 T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 异质结都具有好的动力学稳定性.

### 3.2 异质结电子结构以及电接触性质

PD1 和 PU2 的投影能带如图 4(a) 所示, T-NbTe<sub>2</sub> 和 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的贡献分别为蓝色和红色. 金属与半导体之间的接触通常被划分为两大类: 肖特基接触 (SC) 与欧姆接触 (OC). 这两种电接触主要取决于半导体能带边缘相对于费米能级 ( $E_F$ ) 的位置.

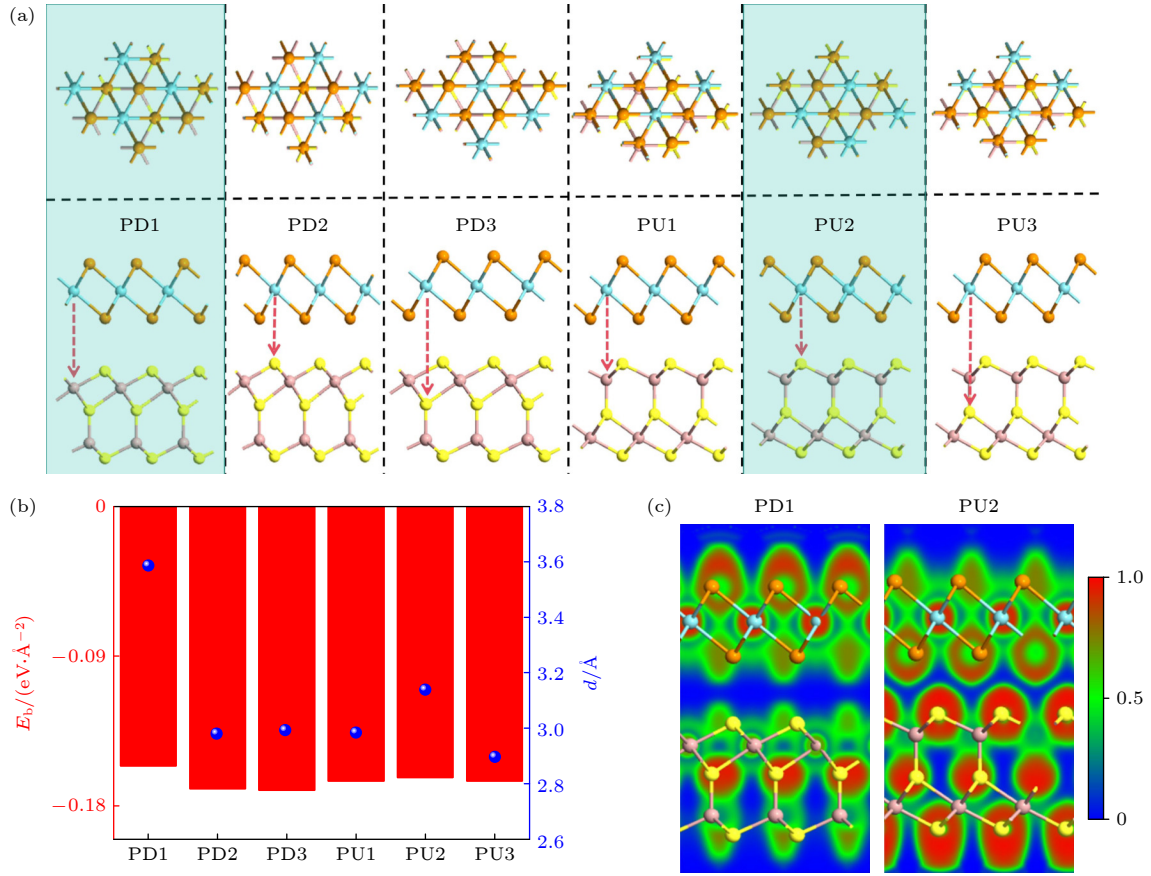


图 2 (a) 异质结的 6 种堆垛方式, 阴影为两种最稳定的堆垛结构; (b) 优化后各堆垛的结合能 (柱状图) 以及层间距 (蓝色点); (c) PD1 和 PU2 的电子定位函数

Fig. 2. (a) The six stacking sequences of heterojunctions, with the shaded ones representing the two most stable stacking structures; (b) optmized binding energy (presented as a bar chart) and interlayer spacing (blue dots) for each stacking sequence; (c) the electron localization function of PD1 and PU2.

由金属-半导体异质结的 Schottky-Mott 规则<sup>[39]</sup>:

$$\Phi_N = E_C - E_F, \quad (2)$$

$$\Phi_P = E_F - E_V, \quad (3)$$

其中  $E_C$  是半导体层的导带最低能量;  $E_V$  是半导体层的价带最高能量;  $E_F$  是费米能级. N 型肖特基势垒高度  $\Phi_N$  小于 P 型肖特基势垒高度  $\Phi_P$ , 即  $\Phi_N < \Phi_P$  对应 N 型肖特基接触, 而  $\Phi_N > \Phi_P$  对应 P 型肖特基接触. 如果肖特基接触高度  $\Phi_N \leq 0$  或  $\Phi_P \leq 0$ , 则形成了 N 型或 P 型欧姆接触. 从图 4(a) 可以看出, 异质结 PD1 和 PU2 的 T-NbTe<sub>2</sub> 和 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 层之间没有发生明显的轨道杂化, 且由于 PD1 和 PU2 是通过范德瓦耳斯力接触形成, 有效地避免了界面化学键. PD1 和 PU2 的  $\Phi_N$  ( $\Phi_P$ ) 分别为 0.288 eV (1.543 eV) 和 1.344 eV (1.269 eV), 所以半导体极化方向不同的两种异质结 PD1 和 PU2 在界面处分别形成两种不同的肖特基接触——N 型肖特基接触和 P 型肖特基接触. 异质结 PD1 的  $\Phi_N$  低于

其他大多数金属半导体异质结, 如石墨烯/WSSe<sup>[40]</sup>, 石墨烯/MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub><sup>[41]</sup> 和石墨烯/PbI<sub>2</sub><sup>[42]</sup> 形成的  $\Phi_N = 0.350, 0.680$  和  $0.890$  eV 的 N 型肖特基接触, 表明 PD1 设计高性能电接触界面的二维铁电纳米器件更加有利. 此外由于 PD1 和 PU2 只是改变了异质结的接触界面, 就实现了肖特基的转换, 为设计多功能的肖特基器件提供了一种实用的方法.

对比 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 单层的能带结构 (见图 1), 发现 Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的投影能带结构在 PD1 (PU2) 中有一定的下 (上) 移, 这是因为投影能带的移动受到电荷转移的影响, 而电荷转移由两个因素决定: 两种单层材料之间的费米能级差和最靠近界面的原子层之间的电负性差. 计算 PD1 和 PU2 的空间电荷密度差, 来观察 PD1 和 PU2 的电荷转移情况. 空间电荷密度差定义为

$$\Delta\rho(x, y, z) = \rho_{\text{T-NbTe}_2/\text{Ga}_2\text{S}_3}(x, y, z) - \rho_{\text{T-NbTe}_2}(x, y, z) - \rho_{\text{Ga}_2\text{S}_3}(x, y, z), \quad (4)$$

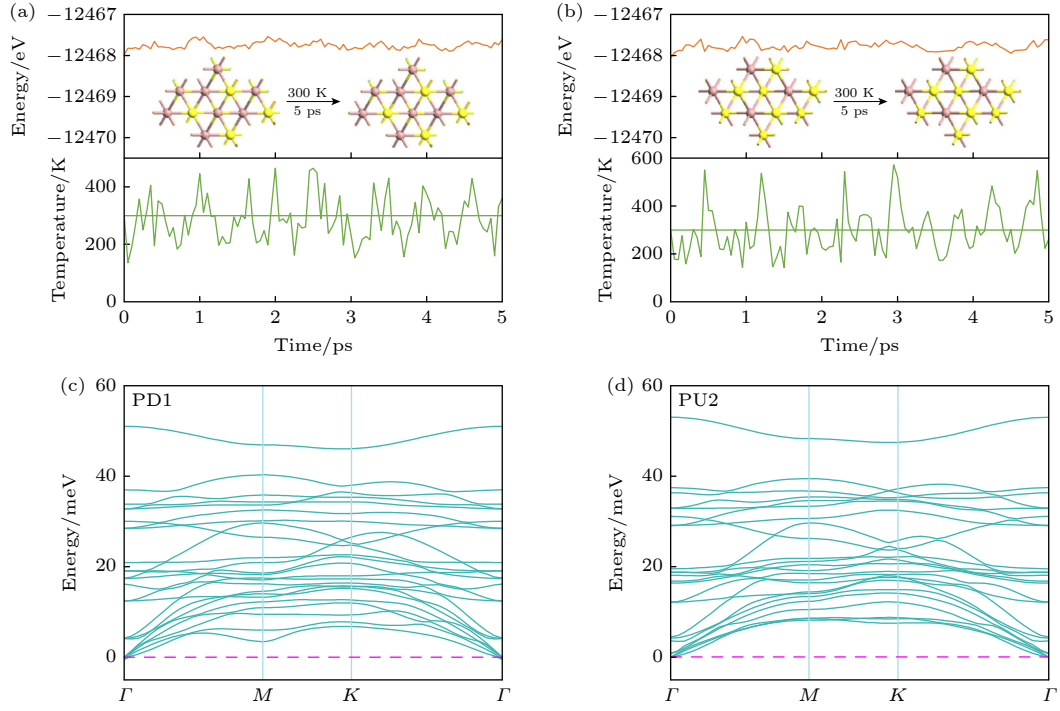


图 3 300 K 的 (a) PD1 和 (b) PU2 的 AIMD 模拟; (c) PD1 和 (d) PU2 的声子谱  
Fig. 3. AIMD simulation of at 300 K (a) PD1 and (b) PU2; the phonon spectra of (c) PD1 and (d) PU2.

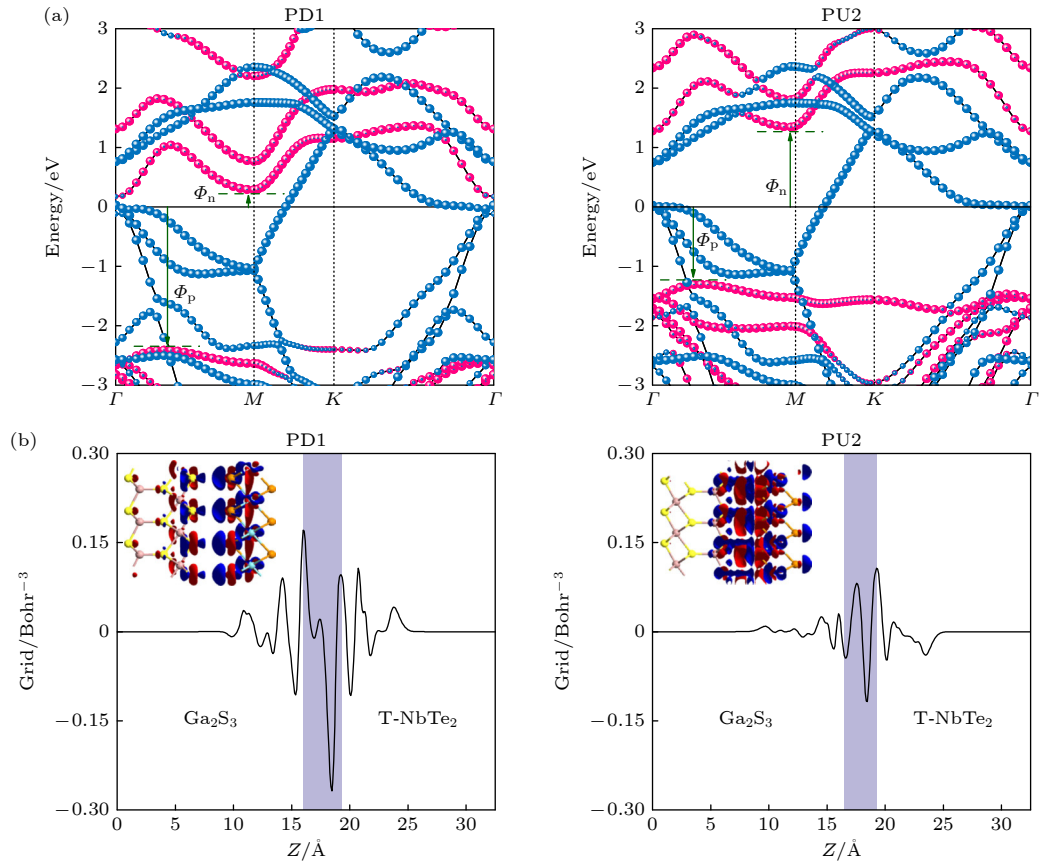


图 4 (a) 异质结 PD1 和 PU2 的投影能带结构; (b) 异质结 PD1 和 PU2 的空间电荷密度差. 插图中红色 (蓝色) 表示电子积累 (消耗), 等值面设为  $0.0005 \text{ e}/\text{\AA}^3$

Fig. 4. (a) Projected band structures of heterojunctions PD1 and PU2; (b) the spatial charge density difference for heterojunctions PD1 and PU2. In the illustration, the red (blue) represent electron accumulation (depletion), and the isosurface is set to  $0.0005 \text{ e}/\text{\AA}^3$ .

其中  $\rho_{\text{T-NbTe}_2/\text{Ga}_2\text{S}_3}(x, y, z)$ ,  $\rho_{\text{T-NbTe}_2}(x, y, z)$  和  $\rho_{\text{Ga}_2\text{S}_3}(x, y, z)$  分别表示异质结, 孤立单层  $\text{T-NbTe}_2$  和孤立单层  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  在  $(x, y, z)$  的电荷密度. 空间电荷密度差随着  $z$  的变化图如图 4(b) 所示, 大于零表示获得电子, 小于零表示失去电子, 插图中红色 (蓝色) 表示电子累积 (耗尽). 对于异质结 PD1, 半导体  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层失去电子而  $\text{T-NbTe}_2$  层得到电子, 电子由  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  流向  $\text{T-NbTe}_2$  层. 这是因为 PD1 的层间距更大 (见图 2), 电荷转移的方向由两个单层之间的费米能级差主导,  $\text{T-NbTe}_2$  层的费米能级 ( $-5.010$  eV) 比半导体  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层的费米能级 ( $-4.875$  eV) 低, 因此电子会从半导体  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层转移至  $\text{T-NbTe}_2$  层, 异质结 PD1 的半导体  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层 N 型掺杂, 其投影能带结构向下移动. 而对于 PU2 来说, PU2 的  $\text{T-NbTe}_2$  层失电子而  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层得电子, 电子由  $\text{T-NbTe}_2$  层流向  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层. 这是由于两个单层层间距较小, 原子 S 原子和 Te 原子更接近, 电荷转移的方向由原子层之间的电负性差主导. 同一主族元素从上到下, 电负性依次减小,  $\text{T-NbTe}_2$  ( $\text{Ga}_2\text{S}_3$ ) 层中离界面最近的原子层是 Te (S) 原子层, 所以 S 原子比 Te 原子有更强的电负性, 会导致电子从  $\text{T-NbTe}_2$  层整体流向了  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层. 最终 PU2 的  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层为 P 型掺杂, 其投影能带结构向上移动. 电子转移导致两单层间形成内建电场  $E_{\text{in}}$ , PD1 的  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层失电子而  $\text{T-NbTe}_2$  层得电子, 所以在 PD1 中, 内建电场由  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层指向  $\text{T-NbTe}_2$  层; 而在 PU2 中, PU2 的  $\text{T-NbTe}_2$  层失电子而  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层得电子, 内建电场由  $\text{T-NbTe}_2$  层指向  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层.

### 3.3 异质结电接触性质的物理调控

在实验中制备高性能电子器件时, 使用脉冲交流场技术允许应用的最大外部电场高达  $0.6 \text{ V}/\text{\AA}$ <sup>[43]</sup>. 本研究以异质结 PD1 和 PU2 为例, 探讨外电场对铁电异质结电接触特性的影响. 定义从  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  层指向  $\text{T-NbTe}_2$  层的方向为电场正方向. 图 5(a) 是外电场对异质结 PD1 (PU2) 的肖特基势垒高度 (SBH) 的调控. 对于异质结 PD1, 如图 5(a) 和图 5(b) 所示, 施加负外电场时,  $\Phi_{\text{N}}$  随着电场强度的增大而增大, 而与之相反,  $\Phi_{\text{P}}$  随着电场强度的增大而减小. 当负的电场强度达到  $-0.3 \text{ V}/\text{\AA}$  时, 异质结 PD1 从 N 型肖特基接触转变成了 P 型肖特基接触; 施加正外电场时,  $\Phi_{\text{N}}$  随着电场强度的增大而减小, 而

$\Phi_{\text{P}}$  随着电场强度的增大而增大. 当正的电场强度增大到  $+0.5 \text{ V}/\text{\AA}$  时, 异质结 PD1 实现了 N 型肖特基接触到欧姆接触的转变. 对于异质结 PU2, 如图 5(a)—(c) 所示, 施加负外电场时,  $\Phi_{\text{N}}$  随着电场强度的增大而增大, 而  $\Phi_{\text{P}}$  随着电场强度的增大而减小. 当负的电场强度增大到  $-0.6 \text{ V}/\text{\AA}$  时, 此时的  $\Phi_{\text{P}}$  仅为  $-0.143$  eV, 非常靠近费米能级; 施加正外电场时,  $\Phi_{\text{N}}$  随着电场强度的增大而减小, 而  $\Phi_{\text{P}}$  随着电场强度的增大而增大. 当正的电场强度增大到  $+0.1 \text{ V}/\text{\AA}$  时, 异质结 PU2 从 P 型肖特基接触转变成了 N 型肖特基接触; 当正的电场强度增大到  $+0.6 \text{ V}/\text{\AA}$  时, 异质结 PU2 实现了从 N 型肖特基接触到 N 型欧姆接触转变. 对于 PD1 (PU2), 只需要较小的电场强度  $-0.3 \text{ V}/\text{\AA}$  ( $+0.1 \text{ V}/\text{\AA}$ ), 就可以实现 N 型肖特基接触和 P 型肖特基的互相转化, 为设计多功能的肖特基整流管开辟了可能性. 同时对于异质结 PD1 (PU2), 当电场强度增大到  $+0.5 \text{ V}/\text{\AA}$  ( $+0.6 \text{ V}/\text{\AA}$ ), 实现了肖特基接触到欧姆接触的转变. 因此, 对于铁电异质结来说, 外加电场能有效提高电流的传输能力, 为高性能电接触界面的二维铁电纳米器件提供了理论参考.

除了外加电场之外, 平面双轴应变同样对肖特基势垒高度以及电接触性起着至关重要的作用. 双轴应变的应变系数  $\varepsilon = (a - a_0)/a_0$ , 其中  $a_0$  和  $a$  分别代表异质结在平衡状态和应变下的晶格常数. 两个轴向取相同的应变, 压缩应变对应于应变系数  $\varepsilon < 0$ , 拉伸应变对应于应变系数  $\varepsilon > 0$ . 本研究以异质结 PD1 和 PU2 为例, 探讨双轴应变对铁电异质结电接触特性的影响. 考虑到双轴应变对晶格影响较大, 应变范围只选取了  $-10\%$ — $10\%$ . 异质结 PD1 (PU2) 的 SBH 随双轴应变的变化关系如图 6(a) 所示. 对于异质结 PD1, 如图 6(a) 和图 6(b) 所示, 压缩时,  $\Phi_{\text{N}}$  有所增加,  $\Phi_{\text{P}}$  持续减小; 拉伸时,  $\Phi_{\text{N}}$  和  $\Phi_{\text{P}}$  随着电场强度的增大持续减小, 当拉伸到  $+8\%$  时, PD1 实现了 N 型肖特基接触到欧姆接触的转变. 对于异质结 PU2, 如图 6(a)—(c) 所示, 压缩时,  $\Phi_{\text{N}}$  持续增大,  $\Phi_{\text{P}}$  持续减小; 拉伸时,  $\Phi_{\text{N}}$  和  $\Phi_{\text{P}}$  随着电场强度的增大持续减小, 当拉伸到  $+2\%$  时, PU2 从 P 型肖特基接触转变成了 N 型肖特基接触; 当拉伸到  $+10\%$  时, PU2 实现了从 N 型肖特基接触到欧姆接触转变. 因此对于异质结 PU2 只需要  $2\%$  的拉伸, 就可以实现 P 型肖特基接触至 N 型肖特基的转化, 为设计多功能肖特基整流

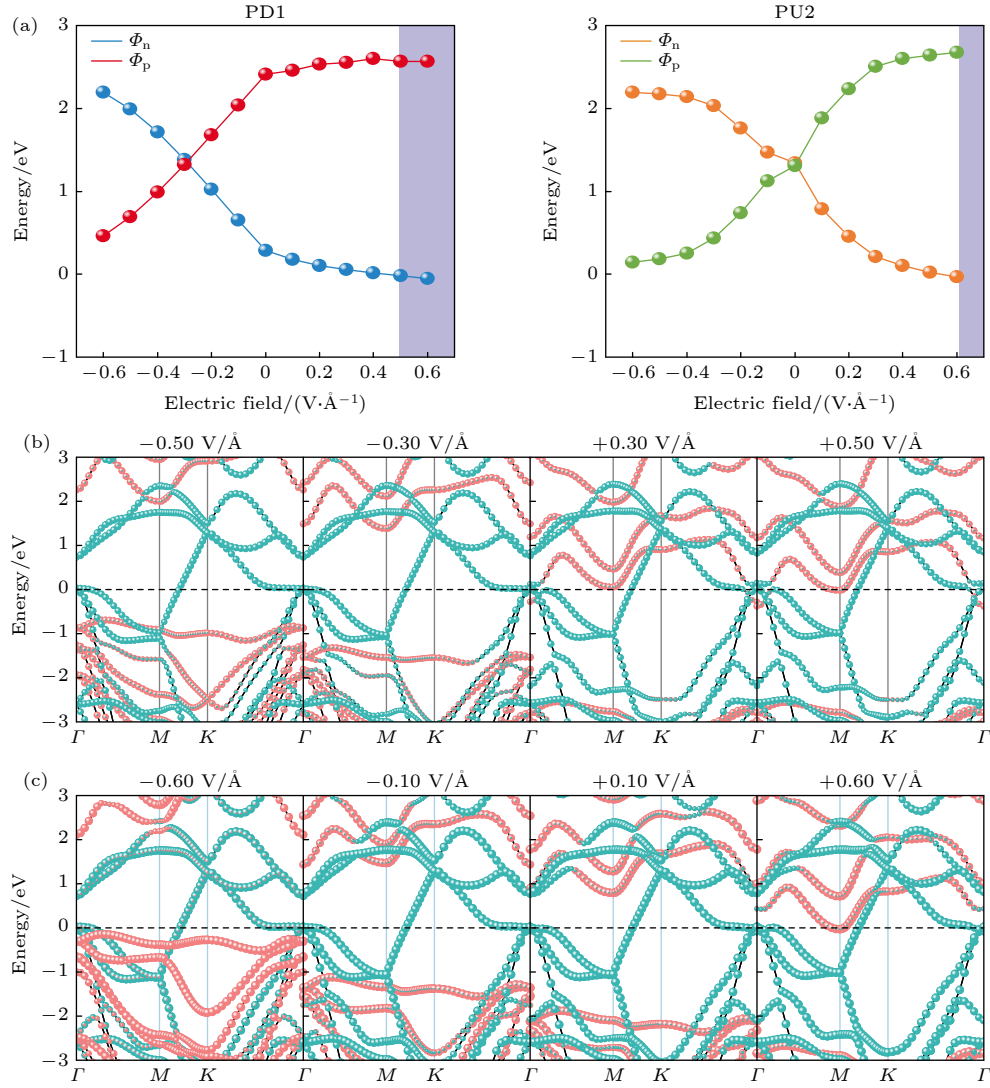


图 5 (a) PD1 和 PU2 的肖特基势垒高度随外加电场的变化曲线; (b) 异质结 PD1 在外加电场下的能带结构; (c) 异质结 PU2 在外加电场下的能带结构. 红色表示  $\text{Ga}_2\text{S}_3$ , 蓝绿色表示  $\text{T-NbTe}_2$

Fig. 5. (a) Variation curves of the Schottky barrier height of PD1 and PU2 with the applied electric field; (b) band structure of the heterojunction PD1 under the applied electric field; (c) band structure of the heterojunction PU2 under the applied electric field. The red lines represent  $\text{Ga}_2\text{S}_3$ , and the cyan lines represent  $\text{T-NbTe}_2$ .

管开辟了可能性. 同时对于异质结 PD1 (PU2), 当拉伸增大 8% (10%) 时, 实现了肖特基接触到欧姆接触的转变. 因此, 对于铁电异质结来说, 双轴应变也能够有效地提高电流的传输能力, 为高性能电接触界面的二维铁电纳米器件提供了理论参考.

## 4 结 论

本文构建了 6 个  $\text{T-NbTe}_2/\text{Ga}_2\text{S}_3$  异质结, 通过计算 6 个异质结的结合能, 并根据  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  的极化方向, 选取了最稳定的两个结构 PD1 和 PU2 进行研究. 通过对异质结 PD1 和 PU2 结合能、AIMD

模拟以及声子谱的计算, 表明异质结 PD1 和 PU2 满足能量、热力学以及动力学稳定性, 证实其在实验下具有制备的可能性. 异质结 PD1 和 PU2 在本征态下分别形成了 N 型肖特基接触和 P 型肖特基接触. 改变异质结中铁电半导体  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  极化方向, 改变了肖特基接触类型, 为设计多功能肖特基器件开辟了一条切实可行的路径. 对于异质结 PD1 (PU2), 外加电场达到 +0.5 V/Å (+0.6 V/Å), 或者双轴应变拉伸至 8% (10%) 时, 均可以实现肖特基接触到欧姆接触的转换, 这些发现为设计基于  $\text{T-NbTe}_2/\text{Ga}_2\text{S}_3$  铁电异质结的高性能多功能器件做出了理论参考.

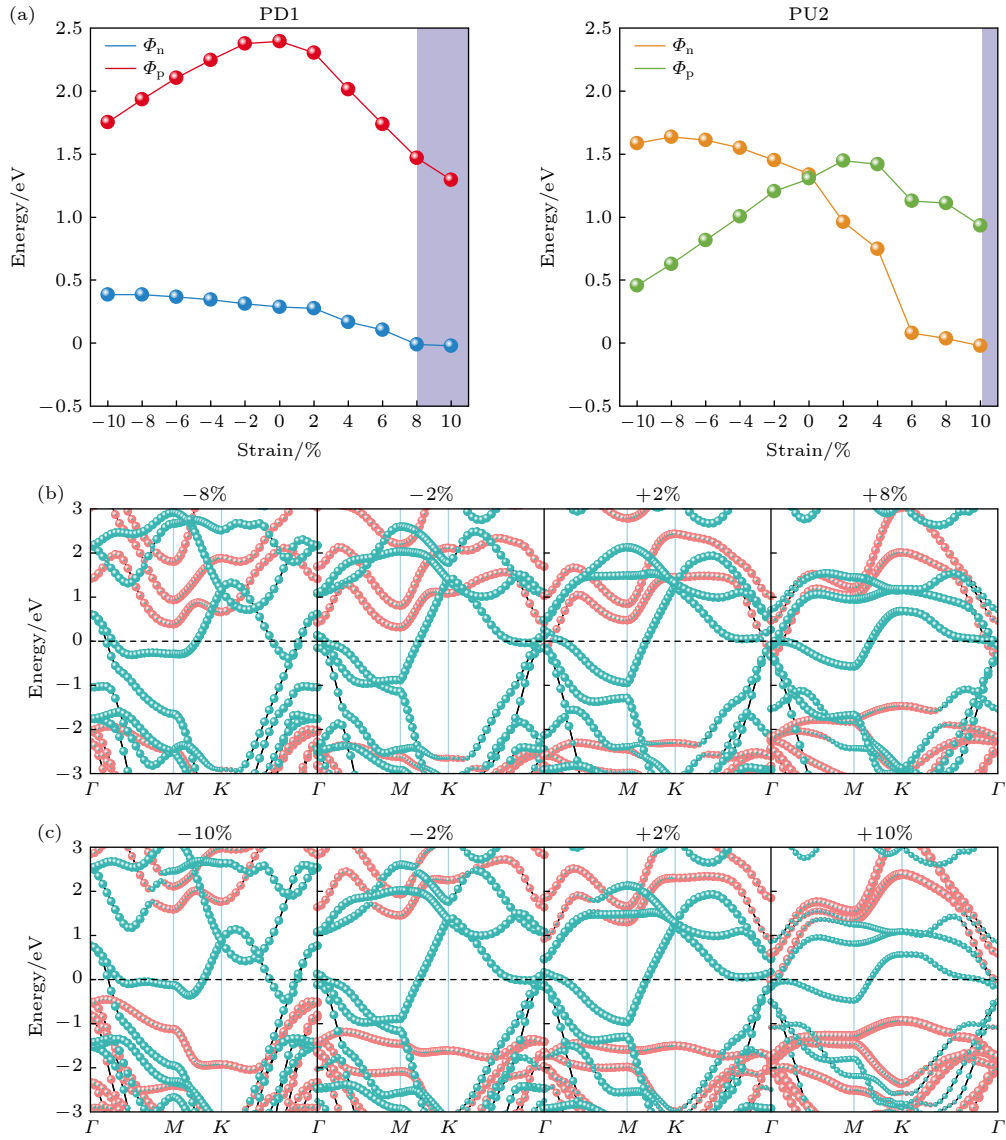


图6 (a) 异质结PD1和PU2的肖特基势垒高度随双轴应变的变化曲线; (b) 异质结PD1在应变下的能带结构; (c) 异质结PU2在应变下的能带结构. 红色表示  $\text{Ga}_2\text{S}_3$ , 蓝绿色表示  $\text{T-NbTe}_2$

Fig. 6. (a) Trend of SBH of heterojunction PD1 and PU2 with the biaxial strain; (b) band structure of the heterojunction PD1 under strains; (c) band structure of the heterojunction PU2 under strain. The red lines represent  $\text{Ga}_2\text{S}_3$ , and the cyan lines represent  $\text{T-NbTe}_2$ .

## 参考文献

- [1] Li Z H, Han J N, Cao S G, Zhang Z H 2023 *Appl. Surf. Sci.* **636** 157766
- [2] Zheng Y, Gao J, Han C, Chen W 2021 *Cell Rep. Phys. Sci.* **2** 100298
- [3] Chen S Y, Wang S, Wang C, Wang Z C, Liu Q 2022 *Nano Today* **42** 101372
- [4] Zheng S, Lu H C, Liu H, Liu D M, Robertson J 2019 *Nanoscale* **11** 4811
- [5] Chhowalla M, Jena D, Zhang H 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16052
- [6] Allain A, Kang J, Banerjee K, Kis A 2015 *Nat. Mater.* **14** 1195
- [7] Nguyen H T, Obeid M M, Bafekry A, Idrees M, Vu T V, Phuc H V, Hieu N N, Hoa L T, Amin B, Nguyen C V 2020 *Phys. Rev. B* **102** 075414
- [8] Cao L M, Ang Y S, Wu Q Y, Ang L K 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 241601
- [9] Zheng Y L, Tang X, Wang W L, Jin L, Li G Q 2021 *Adv. Funct. Mater.* **31** 2008307
- [10] Jastrzebskia C, Jastrzebskib D J, Kozaka V, Pietakb K, Wierzbicki M, Gebicki W 2019 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **94** 80
- [11] Dénoue K, Cheviré F, Calers C, Verger L, Coq D L, Calvez L 2020 *J. Solid State Chem.* **292** 121743
- [12] Zhang G T, Lu K J, Wang Y F, Wang H W, Chen Q 2022 *Phys. Rev. B* **105** 235303
- [13] Liu X H, Mao Y L 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 043102
- [14] Khusayfan N M, Khanfar H K 2018 *Results Phys.* **10** 332
- [15] Khusayfan N M, Qasrawi A F, Khanfar H K 2018 *Results Phys.* **8** 1239

- [16] Shang X X, Zhang Y L, Li T, Zhang H N, Zou X F, Wageh S, Al-Ghamdi A A, Zhang H, Si S H, Li D W 2024 *J. Materiomics* **10** 355
- [17] Dong J Z, Li C S, Yang J, Chen B B, Song H J, Chen J S, Peng W X 2016 *Cryst. Res. Technol.* **51** 671
- [18] Suonan Z X, Wu H X, Mi S, Xu H, Xu H W, Zhang H Y, Pang F 2024 *J. Cryst. Growth* **648** 127891
- [19] Behera S K, Ramamurthy P C 2024 *New J. Chem* **48** 15493
- [20] Ataca C, Şahin H, Ciraci S 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 8983
- [21] Li H, Zhang Y F, Liu F B, Lu J 2024 *Nanoscale* **16** 18005
- [22] Fang S B, Li Q H, Yang C, Wu B C, Liu S Q, Yang J, Ma J C, Yang Z M, Tang K C, Lu J 2023 *Phys. Rev. Mater.* **7** 084412
- [23] Han J N, Cao S G, Li Z H, Zhang Z H 2023 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56** 045002
- [24] Xu Y H, Han J N, Li Z H, Zhang Z H 2023 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56** 365504
- [25] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [26] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [27] Troullier N, Martins J L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1993
- [28] Soler J M, Artacho E, Gale J D, García A, Junquera J, Ordejón P, Sánchez-Portal D 2002 *J. Phys. Condens Matter* **14** 2745
- [29] Grimme S 2006 *J. Comput. Chem.* **27** 1787
- [30] Xu Z, Luo W D, Guo S Y, Liu S Z 2024 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16** 40123
- [31] Ramezani H R, Şaşıoğlu E, Hadipour H, Soleimani H T, Friedrich C, Blügel S, Mertig I 2024 *Phys. Rev. B* **109** 125108
- [32] Fu C F, Sun J Y, Luo Q Q, Li X X, Hu W, Yang J L 2018 *Nano Lett.* **18** 6312
- [33] Hieu N N, Phuc H V, Kartamyshev A I, Vu T V 2022 *Phys. Rev. B* **105** 075402
- [34] Jin H, Wei T, Huang B 2024 *Nano Lett.* **24** 10892
- [35] Xia J L, Gu Y X, Mai J, Hu T Y, Wang Q K, Xie C, Wu Y K, Wang X 2023 *Heliyon* **9** 20619
- [36] Sun N, Qi S M, Zhou B Z, Mi W B, Wang X C 2021 *J. Alloys Compd.* **875** 160048
- [37] Tuckerman M, Berne B J, Martyna G J 1992 *J. Chem. Phys.* **97** 1990
- [38] Zhao C S, Li Z H, Zhang Z H 2024 *Appl. Surf. Sci.* **672** 160859
- [39] Wang Q H, Li H, Si L N, Dou Z L, Yan H J, Yang Y, Liu F B 2023 *Mater. Today Commun.* **35** 105724
- [40] Zhang W X, Yin Y, He C 2020 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22** 26231
- [41] Li Z H, Han J N, Cao S G, Zhang Z H 2023 *Appl. Surf. Sci.* **614** 156095
- [42] Nguyen C V, Idrees M, Phuc H V, Hieu N N, Binh N T, Amin B, Vu T V 2020 *Phys. Rev. B* **101** 235419
- [43] Vicario C, Monoszlai B, Hauri C P 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 213901

# Control of contact properties in ferroelectric heterojunction T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>\*

SUN Zhixuan    ZHAO Changsong    CHENG Fang<sup>†</sup>

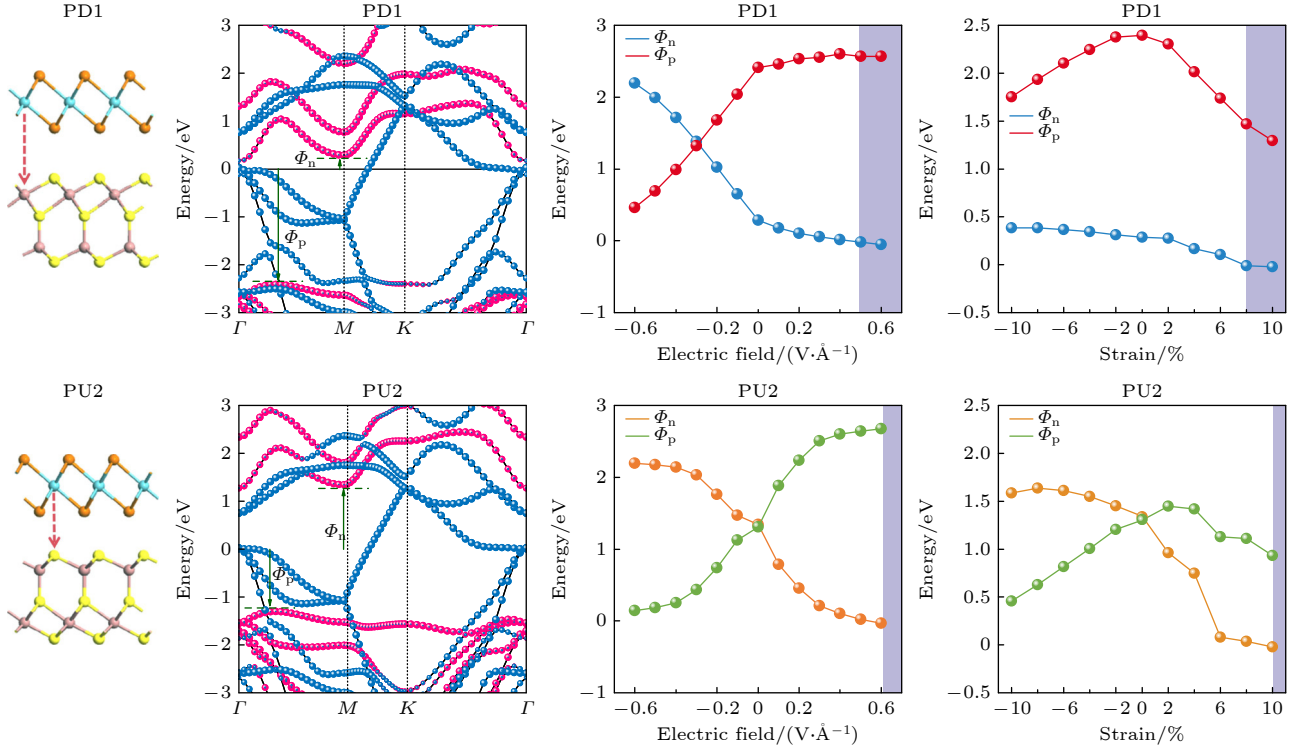
(School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science & Technology, Changsha 410114, China)

( Received 10 December 2024; revised manuscript received 1 February 2025 )

## Abstract

A monolayer ferroelectric semiconductor, Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, has received extensive attention because of its outstanding ductility, extremely high carrier mobility and unique out-of-plane asymmetric polarization characteristics. In this work, T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> ferroelectric heterojunctions are constructed using out-of-plane asymmetric polarization characteristics of Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>. The structural stability, preparation possibility and electrical contact properties for various ferroelectric heterojunction T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> ferroelectric heterojunctions with the different polarization directions of Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> are systematically studied by the first-principles calculations. It is found that heterojunctions T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> exhibit sensitive responses to out-of-plane asymmetric polarization characteristics of Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>. The two heterojunctions with the most stable energy, PD1 ( $\mathbf{P}_\downarrow$ ) and PU2 ( $\mathbf{P}_\uparrow$ ), in the intrinsic state form N-type and P-type Schottky contact, respectively. The polarization characteristics of the ferroelectric semiconductor Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> are dependent on the contact type of the Schottky barrier in the ferroelectric heterojunction T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, which provides a practical approach for designing multifunctional Schottky devices. Specifically, the electrical contact depends on the external electric field. For the heterojunction, PD1 (and PU2), the contact can transition from Schottky contact to Ohmic contact at an electric field strength of +0.5 V/Å (+0.6 V/Å). Besides electric field, the contact properties of both heterojunctions PD1 and PU2 may also be tuned by an external biaxial strain. For the heterojunction, PD1, the contact can transition from

Schottky contact to Ohmic contact at a biaxial strain tensile of 8%. And for the heterojunction, PU2, the contact can transition from P-type Schottky contact to N-type Schottky contact at a biaxial strain tensile of 2%, then from N-type Schottky contact to Ohmic contact at a strain tensile of 10%. These results provide a theoretical reference for designing two-dimensional ferroelectric nanodevices with high-performance electrical contact interfaces.



**Keywords:** metal-semiconductor heterojunction, Schottky contact, Ohmic contact, electrical contact

**PACS:** 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv, 73.40.Lq

**DOI:** [10.7498/aps.74.20241705](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241705)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20241705](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20241705)

\* Project supported by the Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering, Changsha University of Science and Technology, China.

† Corresponding author. E-mail: [chengfang@csust.edu.cn](mailto:chengfang@csust.edu.cn)



## 铁电异质结T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>的接触性质及调控

孙智玄 赵长松 程芳

### Control of contact properties in ferroelectric heterojunction T-NbTe<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>

SUN Zhixuan ZHAO Changsong CHENG Fang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 107101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241705

CSTR: 32037.14.aps.74.20241705

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241705>

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

不同相NbS<sub>2</sub>与GeS<sub>2</sub>构成的二维金属-半导体异质结的电接触性质

Electrical contact properties of 2D metal-semiconductor heterojunctions composed of different phases of NbS<sub>2</sub> and GeS<sub>2</sub>

物理学报. 2024, 73(13): 137102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240530>

石墨烯/C<sub>3</sub>N范德瓦耳斯异质结的可调电子特性和界面接触

Tunable electronic structures and interface contact in graphene/C<sub>3</sub>N van der Waals heterostructures

物理学报. 2023, 72(14): 147302 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230318>

GaN/VSe<sub>2</sub>范德瓦耳斯异质结电接触特性及调控效应

Electrical contact characteristics and regulatory effects of GaN/VSe<sub>2</sub> van der Waals heterojunction

物理学报. 2023, 72(16): 167101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230191>

SiC电力电子器件金属接触研究现状与进展

Research status and progress of metal contacts of SiC power devices

物理学报. 2021, 70(20): 207302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210675>

外电场和双轴应变对MoSH/WSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>肖特基结势垒的调控

Modulation of MoSH/WSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> Schottky-junction barrier by external electric field and biaxial strain

物理学报. 2022, 71(21): 217301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220882>

晶格匹配InAlN/GaN异质结肖特基接触反向电流的电压与温度依赖关系

Voltage and temperature dependence of reverse leakage current of lattice-matched InAlN/GaN heterostructure Schottky contact

物理学报. 2021, 70(7): 077201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201355>