

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

D27-二维材料与器件

D27-Two-dimensional Materials and Devices

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



D27. 二维材料与器件

分会主席：何军、廖蕾、张凯、彭海琳、张立军、张铮、吕俊鹏

D27-01

机器学习在二维长周期体系物性研究上的应用

段纯刚*

华东师范大学

机器学习为二维长周期体系物性研究提供了强有力的工具。在本次报告中，我们简单回顾机器学习在材料研发中的应用，重点介绍近期利用机器学习方法研究六方氮化硼（h-BN）扭曲和应变双层的极化中得到的有趣结果。具体说来我们发现了转角依赖的极化模式拓扑结构，并发现垂直电场和晶格失配可以有效调制这些拓扑模式，这些结果得到了实验上的有力支持。该工作有助于促进莫尔铁电性、拓扑物理及相关领域进一步的研究，也使我们有信心探索更加复杂体系的物性。

D27-02

二维半导体范德华间隙

邹旭明*

湖南大学

范德华间隙在调节材料特性、定制器件性能、探索纳米限域等领域扮演了重要角色。通过分子预吸附和范德华组装，实现了埃尺度范德华间隙的创造和精准控制。系列工作证明范德华间隙工程能为开发新原理器件提供独特途径，通过构建水间隙， MoS_2 /间隙/ MoS_2 同质结能够表现出无滞回、理想因子为 1 的二极管特性，以及超敏感的压力传感特性；另外，通过构建氧间隙，有效抑制了栅极介质缺陷与半导体能级之间的耦合作用，实现了回滞电压低于 10 mV，平均亚阈值摆幅晶体管低至 60mV/dec 的顶栅二维晶体管。

D27-03

二维材料新型制备工艺及在高性能器件中的应用

黄元*

北京理工大学

二维材料具有优异的电学性质，在未来信息电子器件中有重要的应用潜力。然而，极高的比表面积使得二维材料对外界物理量的改变非常敏感，如何发展先进的制备和调控工艺是实现高性能电子器件的基础。针对高洁净界面和多维度调控的需要，本报告主要介绍：1.发展了基于水汽分子插层的准干法转移技术，成功实现了具有高洁净界面的二维转角结构和高性能器件；2.在悬空二维结构上观测到了显著的光学特性的提升，如荧光、二次谐波、低频振动模式等；3.实现了石墨烯纳米卷的制备并观测到了复杂的层间耦合模式。

D27-04

面向电子器件的高结晶质量二维半导体晶圆

郝玉峰

南京大学

Two-dimensional semiconductor thin film materials are typically represented by a type of transition metal chalcogenide compounds. Its unit structure is a layer of transition metal M (such as molybdenum or tungsten) atoms sandwiched between two layers of chalcogen element X (such as sulfur or selenium) atoms. The MX_2 structure is less than 1nm thick. This type of three-atomic-layer-thick film is a semiconductor with a band gap between 1.5-2 eV and a typical carrier mobility greater than $1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1}$. It has important application prospects in the field of next-generation electronics and optoelectronic. This presentation will first introduce the research progress of this research group in designing, building and improving MOCVD equipment for the growth of

two-dimensional semiconductor films; I will alfyde (WS_2), molybdenum diselenide (MoSe_2), tungsten diselenide (WSe_2) and other film basic growthso introduce typical two-dimensional semiconductor films, such as molybdenum disulfide (MoS_2), tungsten disuh parameters. We will focus on the progress in the growth dynamics of two-dimensional thin film materials on sapphire substrates, including nucleation, epitaxial growth, crystal domain merging, film formation and other processes at the micro scale, and point out the impact of these microscopic processes on wafer-sized two-dimensional thin films. Finally, we will propose the current problems faced by MOCVD growth of two-dimensional semiconductor thin film materials and the direction of efforts.

D27-05

等离激元纳腔与少数二维激子的相互作用

许秀来*

Peking University

局域表面等离激元纳腔因其具有突破光衍射极限的光模体积，可以大大增强光与物质的相互作用。而二维过渡金属硫族化合物（TMDs）半导体因其原子层的厚度、大的激子束缚能、高效的缺陷单光子辐射等优异物理性质，在光子学研究领域得到了广泛关注。将这种腔与激子的相互作用压缩到少激子甚至单激子水平，对未来腔量子电动力学研究以及实现紧凑的量子光学器件等具有重要意义。首先，通过制备具有纳米间隙的 bowtie 型纳腔，我们成功实现了该纳腔与不同层数的 MoS_2 激子的强耦合，通过采用合理的激子跃迁偶极矩数值，估算得到参与耦合激子数约为 40 个左右。进一步地，在实验上构建了一种等离激元纳腔和一维缺陷态光子晶体微腔耦合的新型混合腔，有效地压缩了 bowtie 纳腔的光模体积。通过与单层 WSe_2 激子耦合后将激子数减少到了约 8 个左右，为当前该类型研究中的最优值。同时这种混合腔具有更为均匀的模式分布，在室温下与单个胶体量子点激子耦合后，可以得到具有高鲁棒性的等离激元-激子强耦合。这些工作有效地推进了单激子强耦合器件的研究和应用。在弱耦合体系的研究中，我们关注到二维材料中缺陷量子发射体是一种高效的单光子源，利用等离激元纳腔可对其辐射进行有效调控。通过将单层 WSe_2 中单个二维局域缺陷态激子与手性表面等离激元纳腔的相耦合，在实验中我们成功实现了手性纳腔依赖的圆偏振单光子输出。通过在理论上建立单个谷间缺陷态激子与手性纳腔作用的全量子模型，揭示了缺陷量子发射体中谷保护特性的缺失，该工作加深了对二维缺陷态激子本征特性的认知，也为未来新型量子光学器件的研究提供了良好的平台。

D27-06

铋化物低维结构与光电器件

杨再兴

山东大学物理学院

铋化物被认为是继砷化物、磷化物、氮化物等 III-V 族体系获得巨大成功后的新的前沿方向。在众多的铋化物中，铋化镓（ GaSb ）的带隙（0.72 eV）在近红外波段且具有 III-V 族半导体中最高空穴迁移率（ $1000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ），被认为是实现新一代高性能红外探测器和高速集成电路中空穴组元的理想沟道新材料之一。

低维半导体光电材料是新一代信息材料研究的核心。将 GaSb 低维化为一维纳米线，一方面可以结构和演绎出全新的集成电路（后摩尔时代 Beyond Moore 的主要发展方向之一），另一方面可以研发新一代高性能室温红外探测器。我们课题组在可控生长纳米线之后，通过调控表面散射、晶格散射以及库伦散射，将 GaSb 场效应管的空穴迁移率提升至现有报告的最高值。在红外探测方面，受限于纳米线的丰富表面态， GaSb 红外探测器件的暗电流高，光电流开关比低。在本报告中，我们将详细介绍通过采用非晶半导体作为壳层在生长过程中原位钝化纳米线表面态、构筑合理的异质结等手段，降低了低暗电流、提高了光电流开关比。这些优点主要得益于打破了纳米线表面费米能级钉扎效应和内建电场的高效光电子分离与收集作用。

D27-07

二维 NbOCl₂铁电相变的应变工程与增强光电响应性能

祁祥*

湘潭大学

NbOCl₂ 作为一种新兴的铁电层状二维材料, 凭借其显著的面内铁电性以及巨大、各向异性且与层无关的二次谐波响应特性(比单层 WS₂ 高出三个数量级), 成为超薄量子光源和非线性光学器件的潜在候选材料。我们从该材料本征特性与器件构筑的角度出发, 系统探索应变工程对 NbOCl₂ 声子行为及铁电相变的调控机制, 开发二维 NbOCl₂ 在光电探测中的应用潜力。NbOCl₂ 独特的弱层间耦合特性为应变工程在晶格调控中的应用提供了理想的平台。应变工程作为一种重要的策略, 用于精确调控二维材料的晶格结构, 具有高定向性和连续性的特点, 在调节材料光电特性和诱导相变方面展现出独特优势。PEC 光电探测器是一种基于光电池构型的新型光电探测器, 其工作原理通过巧妙结合半导体物理过程和电化学反应机制, 展现出自供能、成本低、环境适应性强和制备工艺简单等特点。1) 我们采用 PVA 封装方法对薄层 NbOCl₂ 施加应变, 深入探究了应变-声子耦合机制, 发现其声子振动模式 P1 和 P5 呈现出明显的应变依赖性声子位移现象。2) 通过施加相对于固有晶格取向的应变, 在 NbOCl₂ 中实现特定方向的可调谐铁电相变; 当沿极轴施加的应变达到特定阈值(低至 0.65%) 时, 即可实现 NbOCl₂ 从铁电相到反铁电相的转变。3) 利用 NbOCl₂ 的自发极化引起的内置电场可独立驱动光激发电子和空穴的分离和传输的显著优势, 采用液相剥离法制备了少层 NbOCl₂, 并将其用于构筑 PEC 型光探测器; 实验结果表明, 可调铁电极化显示出记忆效应, 即使在 60 分钟后, 光电流密度仍可提高约 25 %。基于 NbOCl₂ 的 PEC 系统中内置电场的可调性为光电探测器和非易失性存储器件的开发提供了依据。

D27-08

智碘二维半导体材料及其光电性能调控研究

王琳*

南京工业大学

面向后摩尔时代发展, 高效光电集成系统需向小型化、低功耗与智能化加速演进, 亟需底层半导体材料在原子级制造工艺、高效光电响应及多维度调控机制上实现突破。然而, 传统半导体材料受限于高温制备的高能耗、单一感光机制的性能局限, 以及分立器件级联的系统能效损耗, 难以支撑光学感知-存储计算-类脑识别等多模态协同调控的复杂需求。

针对上述挑战, 本人聚焦二维碘化物半导体体系开展系统交叉性研究, 发现其“智碘”系列特征与独特机制, 在原子级制造-光电机理革新-感存算器件集成三大核心领域实现原创性突破, 攻克了二维材料从合成工艺、物性调控到功能器件的关键技术瓶颈, 形成了全链条创新成果, 为后摩尔时代智能光电半导体应用发展奠定科学基础。迄今为止, 共发表 SCI 论文 100 余篇。近五年以(共同)通讯作者身份在 Nat. Mater.、Nat. Commun.、Adv. Mater.、Angew. Chem. Int. Ed.、Nano Lett.、ACS Nano、Light Sci. Appl.、Natl. Sci. Rev. 等期刊上发表论文 56 篇, 在影响因子大于 10 的期刊上发表 30 篇。

D27-09

高阶莫尔效应

徐楠

武汉大学

莫尔效应是调节低维体系电子结构和实现新物态的有效手段。近年来, 转角体系中实现了莫尔效应引起的强关联平带, 并由其导致了关联绝缘体、超导、磁性和非平庸拓扑态等一系列新奇物态。前期莫尔效应的研究主要集中在晶格常数相同或相近的低维材料, 对莫尔周期的调控是通过改变堆叠转角来实现。在这个报告中, 我将介绍我们在一些列大晶格失配异质结中发现的高阶莫尔效应, 并实现通过调节晶格常数对莫尔周期进行调控, 进而实现对关联电子结构的调制。我们利用角分辨光电子能谱在石墨烯异质结中观测到高阶莫尔效应导致的狄拉克复制带, 并实现了对莫尔条纹周期、手性和狄拉克点的原位调控。高阶莫尔效应为实现平带强关联物理提供了一个新途径, 并为模拟六角蜂窝晶格提供了一个好的平台。

D27-10

二维半导体激子荧光发射与调控

王笑*

湖南大学

二维过渡金属硫族化合物 (TMDCs) 中独特的量子相关激子发射特性, 引发了基于二维半导体材料的量子光学和器件的广泛研究。此报告将汇报我们在二维半导体激子荧光发射及异质结调控方面的相关工作。在 2D/2D 异质结方面, 前期我们实现了不同能带排列的二维异质结, 并通过界面载流子转移, 实现了室温下二维材料中的高度自旋极化[1]。近期, 在二维 TMDCs 异质结中, 例如 WS₂/WSe₂ 中, 阐明了莫尔势对材料电子结构的调控, 发现了莫尔轨道依赖的层间激子, 并实现了其应变调控及载流子注入调控[2]。在 0D/2D 异质结方面, 构筑了单量子点 (QD) /单层 MoS₂ 异质结, 发现了室温下异质结中 MoS₂ 原子层的荧光闪烁现象。基于瞬态荧光光谱和荧光强度时间轨迹测量, 阐明了 MoS₂ 中的闪烁行为是由于单 QD 到 MoS₂ 的单光子能量转移[3]。在 1D/2D 异质结方面, 构建了单层 MoSe₂ 与 CsPbBr₃ 钙钛矿纳米线 (PVK) 的异质结, 探究了异质结界面相互作用, 发现了显著的荧光强度负相关关系。此外, 通过寿命随时间变化曲线分析, 发现异质结区域 MoSe₂ 载流子被 PVK 中超级陷阱所捕获的现象, 阐明了基于界面电荷转移的荧光闪烁机制[4]。

D27-11

红外微弱信号光电探测

王芳*

中国科学院上海技术物理研究所

微弱信号探测一直是光电领域追求的极致灵敏极限, 并且不断在量子通信、医疗行业疾病诊断、军事防务检测定位等方面发挥着越来越重要的作用。弱信号的光子能量很小, 对于可见光和红外波段, 单个光子的能量约为 10-19J, 而且不可避免的噪声干扰使得探测更加困难。实现红外微弱信号探测的核心是提高红外探测器的信噪比, 其关键就是噪声暗电流抑制和信号光电流提高。本次报告汇报我们通过操控光电联合局域场, 促进红外探测器噪声暗电流抑制和信号光电流提高, 进而实现高灵敏探测需求。

D27-12

二维室温铁磁材料 Fe₃GaTe₂ 中 DMI 的成因与斯格明子形成周新怡¹, 夏仕安¹, Iftikhar Ahmed Malik¹, 刘盛¹, 于 霆^{1,2,*},

1 武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072

2 武汉量子技术研究院, 武汉 430205

*Email: yu.ting@whu.edu.cn

二维室温铁磁材料 Fe₃GaTe₂ 的出现为研究拓扑磁序及其在新一代自旋存储/逻辑器件领域的应用提供了全新的平台。近两年一些研究报道了在 Fe₃GaTe₂ 中观测到室温稳定存在的斯格明子及斯格明子晶格。然而 Fe₃GaTe₂ 中心对称的晶体结构如何产生可观的 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用 (DMI) 是一个亟待回答的问题。在 Fe₃GaTe₂ 的相关报道中广泛使用场冷 (FC) 方法产生斯格明子, 而这一过程不可避免对样品进行一定程度的热处理。通过研究我们发现, 场冷以及类似热处理过程会使得 Fe₃GaTe₂ 晶体表面形成均匀稳定的 FeTe₂ 薄层, 并导致一定程度的界面非对称性。这种由界面引起的对称性破缺提高了 DMI, 促成了斯格明子的形成与稳定。同时我们还发现, 通过调整场冷温度控制界面析出效应, 可以调制斯格明子产生的能量势垒, 并在一定程度上实现通过应力场调控斯格明子及斯格明子晶格的形成与演化。

D27-13

基于二维磁性半导体的自旋电子器件

王喆*

西安交通大学

二维磁性材料在单层时仍可保持长程磁有序、同时可和其他二维材料形成高质量异质结，是二维自旋物理基础研究及自旋电子器件应用研究的理想对象。由于二维铁磁半导体中自旋劈裂能带对隧穿电子的自旋过滤效应[1]，其可以实现高自旋极化的电流。当多个自旋滤波器串联时，可以实现大的隧道磁阻(TMR)，这一原理本课题组在二维范德华 A 型反铁磁体 CrI_3 及 CrCl_3 中得到验证[2-3]。然而，这些材料层间的反铁磁基态在零磁场下必然表现为高电阻状态，这种易变行为限制了其潜在应用。针对此问题，我们利用二维铁磁金属 Fe_3GeTe_2 和半导体 CrBr_3 构建了混合自旋滤波器，由于两种磁性材料在磁性上实现了解耦，器件表现出非易失性[4]。我们实现了约 100% 的大 TMR，其温度依赖性与扩展 Jullière 模型吻合良好。此外，近期本课题组在 A 型反铁磁半导体 CrPS_4 中发现了绝缘系统中罕见的磁电阻振荡行为[5]，并对其微观物理机制进行了讨论。我们的工作为发展基于二维磁性半导体的自旋电子学开辟了一条全新的途径。

D27-14

二维室温极化斯格明子气泡

薛飞*

浙江大学

极性斯格明子是拓扑非平凡的极化结构，表现出独特的物理现象，在低能耗信息存储领域有潜在的应用。迄今为止，这类拓扑结构主要存在于氧化物铁电体的外延异质结中，因为其稳定需要外延应变的弹性能量牺牲。本研究中，我们无需借助外延应变工程，通过压电力显微镜 (PFM)、高分辨率透射电子显微镜 (HRTEM) 和相场模拟的结合，在独立的层状范德瓦尔斯铁电 CuInP_2S_6 晶体中发现了极性斯格明子泡。在厚度超过约 100 nm 的 CuInP_2S_6 薄片，斯格明子泡表现出椭圆状的刺猬状态，其中心为发散或收敛结构。通过将样品厚度减小至约 8 nm，斯格明子从椭圆形拓扑转变为圆形。值得注意的是，这些斯格明子的螺旋性可以通过探针施加的电刺激和机械刺激进行切换，这与其它已报道的斯格明子的创建与湮灭机制不同。理论和实验数据均证明，斯格明子结构的形成及其厚度依赖性主要来源于铜离子相关的静电能的牺牲。本研究为探索未被涉足的极性拓扑物理学和潜在的类脑计算硬件开辟了一个新的材料体系（即二维层状铁离子材料）。

D27-15

二维 TMDs 晶体的堆垛工程及铁电性能研究

耿德超*

天津大学

二维范德华层状材料因其独特的厚度依赖和堆垛顺序依赖的滑移铁电性能而成为当前发展中备受追捧的变革性材料。然而，二维铁电材料的定制化制备仍然面临着与不可控和低效的制备策略相关的挑战。此外，在二维材料中开发抗疲劳铁电材料也是一项艰巨的挑战。虽然二维材料中滑移铁电的潜力已经被认识到，但堆垛构型和铁电行为之间的复杂关系仍然没有得到充分的探讨。我们利用优化的 CVD 技术合成的 14 种不同堆垛构型的 MoS_2 晶体。我们的研究表明， MoS_2 的铁电性质对堆垛构型高度敏感，只有由于层间不对称堆垛和滑移而导致中心对称性破缺的结构才表现出铁电性质。我们观察到这些非中心对称堆垛的多层 MoS_2 具有明显的振荡铁电行为，即其极化强度随堆垛顺序的不同而呈现出“高-低-高-低-高”的变化。这种铁电振荡趋势得到了 SHG 的证实，即铁电性能的内在差异主要是由不同堆垛结构的中心对称性变化所驱动的。此外，这些材料具有较强的抗疲劳性能，在 1011 次开关循环后仍保持其极化强度而不失去效率。这些发现为设计坚固、高性能的铁电材料建立了新的范例，为可扩展的应用提供了新的可能性。

D27-16**面向神经形态计算的多比特 2D 浮栅存储器**

王振兴

国家纳米科学中心

基于神经网络的机器学习和人工智能在自动驾驶、天气预测、语音识别和图像理解等广泛应用中展现了卓越的能力。然而，传统冯·诺依曼架构中物理分离的存储单元与逻辑单元之间的数据来回传输，以及数字数据处理范式，严重限制了系统效率。因此，人们对高效神经形态计算硬件（neuromorphic computing hardware, NCH）的兴趣日益增长，尤其是对于能够在本地以模拟方式处理和存储数据的智能边缘设备。在算法层面，神经网络（NNs）以高精度浮点数表示权重，这是 NCH 无法实现的。为了在边缘设备上实现神经网络，必须在具有有限数值精度的设备级节点中进行训练和/或推理。浮栅存储器因其基于电荷的非易失性模拟存储模式成为重要的神经形态计算硬件的候选之一。当用作人工突触时，浮栅存储器表现出与视觉和听觉信号相匹配的学习速率；浮栅存储器具有较大的动态范围；并且与标准互补金属氧化物半导体技术兼容；同时，将浮栅存储器与新兴的二维（2D）材料结合以构建二维浮栅存储器，为高度集成的神经形态计算硬件提供了巨大潜力。本报告提出了一种基于栅极注入模式的二维浮栅存储器，通过共面器件结构设计，控制栅极、浮栅和沟道被解耦，存储电荷通过隧穿层从控制栅极进行编辑和擦除，实现了 8-bit 多态存储能力，证明了其作为大规模神经形态计算加速器中的潜力。

D27-17**高通量铁电薄膜与器件**

钟高阔*

湖南大学

无机铁电薄膜具有铁电性、压电性等丰富的物理效应，在微纳集成电子器件中具有极大的应用潜力。其性能与结构、制备工艺等密切相关，传统制备手段费时费力，也无法避免实验误差和人为误差。基于脉冲激光沉积系统开发高通量薄膜的制备方法，可以获得厚度、组分、制备工艺等参数梯度变化的高通量薄膜样品，基于此开展了材料参数与性能的高通量筛选研究。同时，针对铁电材料缺少快速无损的极化表征技术，开发了高通量表征方法（高通量光学二次谐波扫描法），该方法具有精准定位和自动扫描功能，可以快速探测和筛选铁电材料的极化强度。结合高通量铁电薄膜制备与表征研究，精准研制了功能导向铁电薄膜器件。

D27-18**二维转角莫尔体系中的铁电物理起源及其调控**

钟妮*

华东师范大学

基于二维转角堆叠构筑的莫尔铁电由于不受限于二维材料极性空间群的要求，且具有更高的灵活性和普适性，有望突破目前具有室温面外极化二维 vdW 铁电体系极度缺乏的发展瓶颈。其展现的莫尔条纹特殊畴结构，是研究基于 vdW 层间电荷转移的铁电稳定性、极化翻转动力学及其极化调控的绝佳平台。本工作中，我们利用多功能扫描探针显微镜具有多种测试模式可高精度表征微区的机电响应、电荷、输运和力学特性的显著优势，实现铁电畴（面外极化、面内极化）和电荷的原位同步表征，首次发现了莫尔云纹的边缘强铁电性、铁电拓扑态及应力可控性，结合第一性原理计算理解了转角体系中复杂的极化分布。相关的研究将为深入理解莫尔铁电，探索铁电电子学及转角电子学交叉领域的新奇物理效应，研制原子级厚度的铁电新型原型器件提供重要实验和理论指导。

D27-19**高 k 钛酸锶介电层在二维半导体晶体管中的应用研究**

杨剑*

北京科技大学

二维半导体有望成为下一代极限微缩的金属-氧化物-半导体场效应晶体管（MOSFET）的沟道材料，然而二维半导体的无悬挂键和极薄厚度等特点使其与高质量介电层的集成面临重大挑战。本研究采用生长后转移的策略，先在晶格与生长条件匹配的衬底和牺牲层上外延生长晶态高 k 钛酸锶（ SrTiO_3 ）薄膜，然后溶解牺牲层得到可以机械转移的介电层，成功实现了高性能的顶栅和底栅结构的二维晶体管。系统的性能、稳定性和可靠性研究表明，以此方法集成的介电层具有高介电常数、低漏电和良好的界面特性，使得二维晶体管表现出大开关比、低亚阈值摆幅和极小的回滞。这些结果表明，机械转移的晶态高 k 介电层是克服二维晶体管介电层难题的有效途径。

D27-20

缺陷调控二维半导体及范德华异质结界面研究进展

王雪静*

澳门科技大学

二维范德瓦尔斯半导体因其独特界面耦合作用，展现出优异的电学/光学可调性及自旋-谷耦合特性。通过缺陷工程实现对材料本征物性的精准调控，如点缺陷和面缺陷诱导晶格对称性破缺，调控载流子输运与激子动力学，实现金属-绝缘体相变、激子态杂化等效应。以过渡金属硫化物 TMDCs 为例，通过离子辐照、化学掺杂或热处理等手段可控引入缺陷态，可显著改变其带隙结构、激子束缚能及自旋轨道耦合，对于开发量子发射器、超快光电探测器等器件具有重要意义。本次报告聚焦两项相关进展：（1）通过精确控制质子辐照通量，诱导单/双层 WS_2 的层内激子至三子转换，并在大面积范围内形成具有原子级清晰边缘的纳米孔。通过第一性原理计算表明孔边缘原子重构产生的缺陷能级诱发电荷转移，揭示缺陷结构与光学性能的关联机制。（2）单层 MoS_2 作为范德华外延/远程外延“透明晶格层”，通过热处理调控硫空位（ V_S ）浓度，可诱导界面电荷密度及原子极性改变，进而调制氧/氮化物半导体薄膜外延生长及晶格取向。该技术为宽禁带半导体与二维材料集成开辟了新路径。

D27-21

二维扭角 TMDCs 的 CVD 生长

许曼章、郭梦璇、纪洪嘉、王学文、黄维*

西北工业大学

二维扭角过渡金属二硫化物（TMDCs）因其莫尔超晶格诱导的独特能带结构和电子性质，已成为研究凝聚态物理的理想平台。大面积、高质量、具有宽扭转角度范围的 TMDCs 的可控制备，对于深入探索扭转角度依赖的物理现象及其应用至关重要。但由于扭角 TMDCs 结构的特殊性、化学气相沉积（CVD）过程中反应动力学的复杂性及反应参数的多样性，导致 TMDCs 层间难以发生扭转。因此，建立扭角结构与 CVD 的工艺参数内在关联机制的相关性，是实现大面积、全扭转角度覆盖的高质量扭角 TMDCs 的可控制备的关键。本报告将介绍我们在 CVD 法直接合成 TMDCs 方面的最新研究进展，我们提出了一种重构成核 CVD 策略，成功实现了扭角角度范围覆盖 0° 至 120° 的双层扭角 TMDCs 的直接合成，通过调控实验参数显著提升了双层扭角 TMDCs 的产率和密度，实验清晰地观测到扭转角度依赖的莫尔周期性，发现层间耦合强度与扭转角度的显著关联，并通过扭转角度实现了二次谐波的强度和相位的协同调控。

D27-22

高温外延沉积原位拉曼分析系统及其在低维材料研究中的应用

王迪*、吴国政、许向鹏、谢华君

苏州基元科技有限公司

在低维材料外延生长研究中，往往因高温黑体辐射、生长设备自身结构、材料测量耦合技术困难等因素，造成研究人员对于材料外延生长过程中的形貌特征、物相演变、结晶习性等诸多重要信息缺失。针对上述不足，基元科技有限公司开发高温外延沉积原位拉曼分析系统 JYR1000^{EPI}，该系统由基元科技可视化 Micro-CVD 沉积子系统和高温拉曼 HT-Raman 光谱子系统组成，实现对最高 1000°C 条件下外延生长过程的原位光学成像和原位光谱测量。

本报告以二维单晶 MoS_2 生长原位研究为例，向大家展示 JYR1000^{EPI} 系统如何赋能低维半导体材料研究。（一）JYR1000^{EPI} 系统原位光学成像能力：研究首次记录了 MoS_2 二维单晶 800 °C 下在 SiO_2/Si 衬底表面完整外延生长过程，发现 MoS_2 二维单晶有效生长时间低于 30 s，最大生长速率约为 $100 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ，发现 MoS_2 二维单晶存在“液-固”和“气-固”两种生长模式，前者源于高温融化液态 MoO_3 破碎后与气态硫反应生成 MoS_2 单晶薄膜，后者源于高温升华气态 MoO_3 与气态硫反应生成 MoS_2 单晶薄膜。（二）JYR1000^{EPI} 系统原位光谱分析能力：高温原位拉曼光谱证实了 MoS_2 二维单晶外延生长中存在中间相 $\text{MoO}_{3-x}\text{S}_x$ ，该中间相能够有效地降低 MoS_2 成核势垒，促进高质量二维薄膜生长。

D27-23

石墨烯薄膜的洁净、自动化转移

林立*

北京大学材料科学与工程学院

北京石墨烯研究院

石墨烯优异的物理化学性质使其在柔性封装与显示、高端电子器件等领域有着广阔的应用前景。尽管化学气相沉积（chemical vapor deposition, CVD）方法制备的石墨烯薄膜材料具有大尺寸、质量高、层数可控等优点，然而石墨烯薄膜通常需要在金属衬底上制备，限制了其实际应用。为实现大面积 CVD 石墨烯薄膜的功能应用，通常需要将金属衬底上制备的石墨烯薄膜转移至目标功能衬底上。而石墨烯转移过程中通常会产生结构破损、污染、掺杂等问题，严重影响石墨烯的性质。因此如何实现石墨烯大尺寸、无损、洁净转移，维持其本征性能，同时，设计规模化转移装置，实现石墨烯批量转移，仍是石墨烯薄膜应用领域的技术瓶颈，亟待解决。由于石墨烯具有单原子层厚度与极佳的柔性，引入必要的转移辅助介质可以抑制转移过程中破损与褶皱的形成，但会引入不必要的污染物。另一方面，转移过程中，基于水溶液的化学刻蚀与电化学鼓泡等传统转移方法会引入不必要的水氧掺杂，降低转移后石墨烯的品质，并增加批量转移的装备成本。

课题组围绕“大面积石墨烯转移”这一方向开展了一系列工作，通过转移辅助介质的结构设计、转移过程界面力的精确调控等，实现了大面积石墨烯薄膜的批量、无损、“全干法”转移[1-2]：（1）通过生长衬底的均匀氧化和石墨烯与目标衬底的共形贴合，精确调控石墨烯与转移媒介之间的作用力，实现了石墨烯从生长衬底的无损剥离和石墨烯与转移介质的剥离分离，转移全流程无水与有机溶剂参与；（2）实现了 4 英寸晶圆石墨烯向 Si/SiO_2 衬底上的完整转移，完整度可达 99%，石墨烯的室温载流子迁移率可达 $14,000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ；（3）实现了 A3 尺寸石墨烯薄膜向柔性聚对苯二甲酸乙二醇酯（polyethylene glycol terephthalate, PET）衬底的无损、叠层转移，并构筑了高效石墨水氧阻隔膜，双层石墨烯水蒸气透过率可降低至 $5 \times 10^{-3} \text{ g}/(\text{m}^2\text{d})$ ；（4）设计并搭建了石墨烯批量、自动化转移系统，实现了转移媒介的自动涂覆、石墨烯薄膜自动分离与贴合等。

D27-24

单层石墨烯的可控图案化修饰

鲍立飘*

华中科技大学

单层石墨烯图案化修饰可将具有特定功能的基团精确地负载到石墨烯指定区域，构筑出具有多维度和多功能性的石墨烯纳米结构，在半导体、催化等领域具有重要潜力。围绕单层石墨烯的图案化修饰，我们在其在拓扑可控、高精度区域选择、化学活化等方面进行了深入探索。提出基底预雕刻策略首次实现了单层石墨烯下表面的图案化及双侧同时图案化可控修饰；发展了石墨烯化学活性的纳米限域方法，实现了晶圆级纳米尺度的高精度可控修饰及系列超晶格材料的制备；开发了系列高价碘化物用于石墨烯激光雕刻，利用其原位光照分解产生的高活性自由基来实现纳米尺度下石墨烯的超高程度且可逆的图案式可控修饰，包括首个石墨烯的图案式羟基化以及最高功能化程度的图案式氟化、氯化和三氟甲基化等，进一步通过官能团的完全置换实现图案区域 p 掺杂到 n 掺杂以及极性的完全翻转。

D27-25

石墨烯精准化学修饰及电子特性调控

卫涛*

中国科学技术大学

探索石墨烯的可调控物理与化学性质是当前研究的前沿课题。近年来,新兴的基于共价分子工程的精准化学修饰策略,为实现对石墨烯性质的精细调控提供了极具前景的解决路径[1]。基于这一理念,我们开发了两种高效策略,包括光刻辅助-还原活化方法与激光直写技术,实现在亚微米尺度上对石墨烯二维晶格的空间可控化学修饰,构建出多种结构明确的石墨烯超晶格[2,3]。进一步地,结合精准修饰与后续处理工艺,我们成功构筑了具有更高结构复杂性和多功能性的三维石墨烯异质结构。通过建立完整的“写入—读取—擦除”循环过程,我们还验证了对这些高度定义纳米结构的化学和物理信息实现精确操控的可行性。

D27-26

热力学与动力学控制晶圆级二维材料生长

逢金波*

济南大学

刚性硅基材料与技术在高集成度芯片、柔性电子等应用遇到瓶颈。二维材料的可控生长变得至关重要。新兴的石墨烯、二硒化钨、二硫化铂、MXene 等二维材料基晶体管及光电探测器作为电子功能元件,可用于制造数字逻辑电路等信息器件。因此,二维材料可控生长是产业链条中的关键上游技术。本文利用热力学与动力学方法对二维材料的可控生长进行了系统的研究,取得了系列进展。(1) 石墨烯在绝缘基底上的直接生长对于无需转移步骤的器件制造具有吸引力。应用热力学和动力学控制,通过化学气相沉积在绝缘基底上实现严格的单层石墨烯生长。(2) 提出了预晶种层策略实现成核的热力学控制,解决了成膜不连续的问题,合成了亚厘米尺寸的严格单层二硒化钨。(3) 通过调控衬底与二维材料相互作用中的对称匹配,利用第一性原理计算预测了 Pt-S 与硫的温度和分压的相图,提高了大面积均匀性,合成了晶圆级硫化铂薄膜。本项目以(共同)第一作者或通讯作者的身份在 ACS Nano、Adv Energy Lett、InfoMat (4) 和 Nano-Micro Lett (2) 等期刊上发表了 46 篇论文。或为二维材料生长提供参考,推动我国新型半导体材料及器件的发展。

D27-27

晶圆级单晶金属薄膜的可控制备与石墨烯外延生长

贾开诚*

北京石墨烯研究院

Cu(111)单晶薄膜因其优异的催化特性与表面平整度,被广泛认为是石墨烯等二维材料单晶外延生长的理想衬底。在此基础上,通过合金化策略构筑铜基合金(111)单晶薄膜,可以进一步拓展二维材料生长的衬底体系,并有望实现对其结构和性能的精准调控。本研究以蓝宝石单晶晶圆为衬底,发展了一系列 4~8 英寸、超平整、无孪晶 Cu(111)单晶薄膜的可控制备方法与通用合金化技术。依托上述衬底,并结合自主开发的规模化装备,我们实现了高质量、高均匀性单晶石墨烯晶圆的化学气相沉积外延生长与批量制备,为新一代电子与光电子器件研发提供了材料基础。

D27-28

Super graphene-skinned material: From epitaxial growth to property calculations

Xiucui Sun¹, Zhongfan Liu^{*1,2}

1. Beijing Graphene Institute (BGI)

2. Peking University

As a new member of graphene materials family, super graphene-skinned material is a type of graphene composite materials made by directly depositing continuous graphene layers on traditional materials via chemical vapor deposition (CVD) process. By growing high-performance graphene “skin”, the traditional materials are

given new functionalities. The atomically thin graphene hitches a ride on the traditional material carriers to market. The experimental progress has been driven by theoretical insights. Using methods such as first-principles calculations, molecular dynamics, and high-throughput machine learning, we have conducted in-depth research on the key issues of graphene-skinned materials, from growth to applications. Based on the gas-phase and surface reaction mechanisms in CVD graphene growth, we have established a theoretical framework for the growth of graphene on both metallic and non-metallic materials. By investigating the oxidation resistance, water and oxygen barrier properties, and thermal conductivity of graphene, we have opened new avenues for the practical application of continuous graphene films, providing fresh momentum for the accelerated industrialization of graphene materials.

D27-29

蒙烯非金属材料的制备：类金属衬底表面催化生长石墨烯的机理研究

孙晓莉、于朝杰、刘忠范*

北京石墨烯研究院

蒙烯非金属材料作为石墨烯与传统非金属材料结合的新型复合材料，凭借其独特的电热、力学及功能化特性，在航空航天、新能源等领域展现出广阔的应用前景。而通过化学气相沉积（CVD）在非金属材料上直接生长石墨烯，为我们提供了一种新颖的、无转移的制备蒙烯非金属材料的方法。

在非金属衬底上生长石墨烯时，通常不考虑其催化作用。然而，最近的实验发现石墨烯在不同的非金属衬底上的生长行为是不同的，在部分非金属衬底上，衬底也展现出了类似于金属衬底的催化活性，使得石墨烯具有更高的生长质量。

本工作基于密度泛函理论（DFT）研究了 α -Al₂O₃ 和 γ -Al₂O₃ 等非金属衬底上石墨烯的生长机理，从碳源的裂解、碳活性物种的迁移、石墨烯的成核与边缘生长这四个石墨烯生长的基本过程出发，研究了不同表面对石墨烯生长过程的影响。结果表明，相较于气氛中， α -Al₂O₃ 和 γ -Al₂O₃ 表面上碳源的裂解能垒均有不同程度的下降，因此可以证明 α -Al₂O₃ 和 γ -Al₂O₃ 具有一定的催化能力[1]；对于不同的碳源，衬底的催化能力也不同，对于工业上常见的 CH₄ 碳源， γ -Al₂O₃ 具有更强的催化能力，而对于 C₂H₄、C₂H₂ 和 C₃H₈ 等其他常用碳源， α -Al₂O₃ 的催化性能更好，碳源的裂解能垒更低[2]；而对于相同的衬底而言，无论是在 α -Al₂O₃，还是 γ -Al₂O₃ 衬底上，C₃H₈ 等三碳碳源生长石墨烯的速度都要快于 C₂H₄ 等双碳碳源，这与实验结果一致[3]。

D27-30

基于铅盐半导体的红外探测器

王启胜*

南昌大学

红外半导体材料（如 HgCdTe、InGaAs、二类超晶格等）在国防军工、安全监测、气象观测、环境检测等空间通讯技术领域具有重要战略应用。其直接窄带隙特性赋予材料高灵敏度和超快响应能力，但中长波红外半导体普遍存在室温热激发引起的强噪声问题。尽管热红外探测器可在室温工作，但其响应速度较慢（通常为毫秒级），极大限制了应用场景。本研究重新改造了传统铅盐半导体（PbS/PbSe），开发出室温高性能红外探测器：报道了晶圆级单晶铅盐薄膜生长技术及大面积探测器阵列的可控制备[1-2]；进而揭示薄膜中光生热载流子主导的能量转换新机制[3-7]。该机制实现了自驱动（无需偏压）、超快光热电响应（达 500 纳秒），比商用光热电探测器与光电导型 PbS/PbSe 探测器快三个数量级。结合室温高灵敏度（探测率 $D^*=1.1 \times 10^{10}$ cm Hz^{1/2} W⁻¹@4.0 μ m）与宽谱探测范围（1.0-5.0 μ m），本研究提出的基于光热载流子效应的铅盐半导体在室温工作的红外探测与成像技术领域具有重要的应用潜力。进一步将铅盐薄膜与二维材料（MoS₂）或全无机钙钛矿（CsPbBr₃）集成[8-11]，分别在 PbS/MoS₂ 和 PbS/CsPbBr₃ 异质结中实现了非易失性可重构短波红外存储器与宽谱光电探测器，这说明基于铅盐的复合半导体红外探测器有望实现低功耗神经形态的红外探测技术。

D27-31

二维激子态光电性质的探测与调控

李志鹏*

上海交通大学

过渡金属二硫属化物 (TMDCs) 因其出色的光电性质在未来的光电子学、谷电子学和量子信息科学中具有重要的应用潜力。二维激子的探测与调控是量子信息科学和新型光电器件开发与应用的关键基础之一。我们围绕二维激子与电子、声子和光子的相互作用规律及其调控机制开展系统研究解决了理论与实验相悖的“双激子之谜”，揭示了带电暗激子谷自由度形成机制，实现了强库仑作用系统的激子能量量子化；揭示了暗激子和声子耦合向亮激子转变的机制，发现了谷旋光极化和长寿命的暗激子伴线，谷间激子和带电暗激子伴线；发展了后焦面成像显微技术实现了暗激子发光传播途径的可视化探测和谷分辨光电流频谱揭示了“类氢原子”二维激子的 $1-11s$ Rydberg 激子态及其束缚能和波尔半径；进一步发展多种调控手段调控二维材料的相变和光电性质，以期丰富二维材料的功能特性，促进对二维激子性质的认识和潜在应用的开发。

D27-32

二维天然超材料三氧化钼生长、声子极化激元调控及超透镜应用

戴志高*

中国地质大学（武汉）

本报告总结了我们在二维矿物超材料三氧化钼的生长、调控及应用领域的最新研究成果。首先，通过无辅助的物理气相沉积法，在 c -面蓝宝石基底上成功生长了高度取向、边缘可控的大面积三角形三氧化钼单晶，这些单晶具有高度限域的光场和易于器件制备的特性。其次，利用三氧化钼的强面内各向异性，研究了图案化三氧化钼纳米腔中的边缘定制双曲极化激元，并分析了边缘取向和晶体方向之间的夹角对光学响应的显著影响。通过界面工程，实现了双轴晶体的可调拓扑转变，包括通过石墨烯和三氧化钼的堆叠方式、石墨烯中费米能级的调节以及三氧化钼厚度的控制来调节层间耦合。此外，我们通过实验展示了基于三氧化钼的“渠道化”声子极化激元的超薄平带超透镜。这种超透镜利用声子极化激元在拓扑转变和平带色散处的无衍射传播和面外“渠道化”，有效引导和传输消逝场。实现了超高分辨率成像，能够清晰分辨出宽度为 15 纳米的单个物体和间距为 100 纳米的光栅，并探索其在芯片缺陷检测中的潜在应用。

D27-33

氧调制下的 $\text{LaVO}_3/\text{SrTiO}_3$ 薄膜的氧八面体结构与磁输运性质

刘晨旭、王震、周婧琳、王焕华、翁小榕*

中国科学院高能物理研究所

过渡金属氧化物异质结中的二维电子气 (2DEG) 因其强关联电子行为与自旋轨道耦合效应，成为探索量子物态和新型自旋电子器件的理想平台。具有强电子关联特性的 $\text{LaVO}_3/\text{SrTiO}_3$ (LVO/STO) 异质结在磁输运各向异性调控方面仍存在关键科学问题：其一，氧空位作为氧化物体系的核心缺陷，如何通过动态调控晶格对称性和电子结构影响各向异性磁阻；其二，界面结构相变与磁输运性质的关联机制尚未明晰。

本研究通过精准调控脉冲激光沉积过程中的退火氧分压，在 LVO/STO (001) 异质结中实现了单斜相至正交相的结构转变，并利用同步辐射 X 射线衍射与低温磁输运联合表征，首次揭示了氧化学势对 VO_6 八面体旋转模式及磁输运性质的相互作用。实验表明，低氧压条件下单斜相 LVO 中强烈的八面体倾斜 (Glazer 模式 $a^-b^+c^-$) 诱导了面内磁各向异性，而高氧压正交相中八面体旋转抑制导致垂直磁各向异性占优。同时，氧空位通过调控载流子浓度 ($n \sim 10^{21} \text{ cm}^{-3}$) 和影响 Rashba 自旋轨道耦合强度，在高温低氧的生长条件下，LVO/STO 霍尔迁移率约达 $30000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，比其他二维电子气 (2DEG) 氧化物系统高 10 至 100 倍。此外，氧空位不仅增强了 2DEG 的导电性，还影响了 SrTiO_3 的线缺陷和畴壁结构： SrTiO_3 在温度接近体相临界温度时，发生从单一立方相到多畴四方相的转变，形成高电阻畴与导电畴壁共存的异质网络。在降温过程中，载流子逐渐被畴壁钉扎；当温度接近 90 K 时，钉扎势垒突然解除，载流子集体释放导致电阻异常突降，这一现象凸显了畴界动力学对薄膜电输运的调控主导性。这些发现为理解强关联氧化物异

质结的磁电耦合机制提供了新的物理图像，确立了氧工程作为调控量子材料对称性破缺与自旋运输的核心手段，为开发电场/化学场双控型自旋电子器件（如各向异性磁电阻存储器、可重构自旋逻辑器件）奠定了基础。

D27-34

First principle study on the structural, optical and electronic properties of two dimensional In₂Se₃/SnSe₂ heterostructure

Dahua Ren, Qingwei Wang, Weihua Deng, Liushun Wang, Zhangyang Zhou, Jinqiao Yi*

Hubei Minzu University

In recent years, two-dimensional semiconductor materials have shown great application prospects in fields such as nanoelectronics, optoelectronic devices, and energy conversion due to their unique electronic and optical properties. The heterostructure formed by stacking different two-dimensional materials with weak van der Waals (vdW) forces can break through the performance limitations of a single material, achieve precise control of band engineering and interface effects, and provide broad space for the design of new functional devices. Therefore, the study of van der Waals heterostructures in two-dimensional semiconductor materials has become one of the current research hotspots. However, two-dimensional semiconductors In₂Se₃ and SnSe₂ each have their limitations. In₂Se₃ has a lower carrier mobility, while SnSe₂'s electrical properties are highly sensitive to impurities and defects, making it difficult to precisely control its electrical properties. We can improve the limitations of the two materials by constructing heterostructures. Therefore, first principles are used to study the structural, electronic and optical properties of monolayer In₂Se₃, monolayer SnSe₂, and In₂Se₃/SnSe₂ heterostructure based on VASP software.

Firstly, the structures of single-layer two-dimensional semiconductor materials In₂Se₃ and SnSe₂ were studied. The lattice constant of In₂Se₃ is 4.096 Å, and the lattice constant of SnSe₂ is 3.842 Å. Geometric optimization was performed in VASP software to calculate bandgap values, charge density, and optical properties. The calculations showed that the band structure of the single-layer In₂Se₃ formed an indirect bandgap feature of 0.823 eV. Its light absorption and reflection have high response in the visible light range, therefore it has excellent optical properties; The band structure of single-layer SnSe₂ forms an indirect bandgap of 0.336 eV, which enables it to effectively absorb photons of corresponding energy, generate electron hole pairs, and achieve light absorption in the visible near-infrared region. Its light reflection has a strong emission peak in the near-infrared region.

Secondly, the calculation results of the In₂Se₃/SnSe₂ heterostructure show that the lattice constant is 3.968 Å and the bandgap value is 0.841 eV, which is an indirect bandgap. For heterostructures at the interlayer spacing where the final energy value is most stable, exhibiting type II band arrangement can promote carrier separation. This spatial separation characteristic not only enhances the material's absorption efficiency of light, but also promotes efficient transport of photo generated carriers. In addition, the In₂Se₃/SnSe₂ heterostructure can absorb light in the visible to ultraviolet wide spectrum, with excellent light absorption ability. This unique carrier generation mechanism ensures that the heterostructure can maintain a high concentration of photo generated carriers. Based on the excellent physical properties mentioned above, the In₂Se₃/SnSe₂ van der Waals heterostructure exhibits outstanding performance advantages in the field of optoelectronic functional devices, providing reliable guarantees for its practical engineering applications.

This study not only reveals the potential applications of In₂Se₃/SnSe₂ heterostructure in optoelectronic devices and catalysis, but also provides theoretical references for its research.

D27-35

金属/MoSiGeN₄ 接触的界面性质及机器学习预测

胡小会*

南京工业大学

近年来,通过化学气相沉积方法成功合成的 MoSi_2N_4 单层,展现了高载流子迁移率和环境稳定性,成为场效应晶体管的理想候选材料[1]。这一突破推动了对 MA_2Z_4 材料家族($\text{M} = \text{Mo}, \text{W}, \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$ 或 Cr ; $\text{A} = \text{Si}$ 或 Ge ; $\text{Z} = \text{N}, \text{P}$ 或 As) 的深入研究[2,3]。 $\text{Janus MA}_2\text{Z}_4$ 材料因其垂直方向的非对称性,打破了镜像对称并引入了固有偶极矩,赋予其可调的带隙和自发极化等新颖特性。其中, MoSiGeN_4 单层作为典型的二维 Janus 半导体材料[4],表现出优异的动力学、热学和机械稳定性,电子迁移率高达 $5200 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$,显示出在高性能电子器件中的巨大潜力。这些特性使其成为未来低功耗、高性能电子器件的理想选择。

本报告结合密度泛函理论计算与机器学习方法,通过调控 MoSiGeN_4 内建偶极矩的方向,在金属/ MoSiGeN_4 界面实现了 n 型肖特基接触、 p 型肖特基接触以及 n 型欧姆接触[4]。研究发现:当 MoSiGeN_4 接触面从 Si-N 侧切换至 Ge-N 侧时, $\text{Cu}/\text{MoSiGeN}_4$ ($\text{Au}/\text{MoSiGeN}_4$) 的接触类型从 n 型肖特基接触(p 型肖特基接触)转变为 n 型欧姆接触(n 型肖特基接触)。内建偶极矩和界面偶极矩之间的竞争使金属与 Ge-N 侧接触界面的费米能级钉扎效应弱于 Si-N 侧,实现了接触类型和肖特基势垒高度的调控。基于 SISSO ($\text{Sure Independence Screening and Sparsifying Operator}$) 机器学习模型,构建了金属/ MoSiGeN_4 接触结构的肖特基势垒高度描述符。本研究不仅揭示了 Janus 结构可有效调控金属/ MoSiGeN_4 接触结构的肖特基势垒高度和接触类型,还基于机器学习方法提出了高效预测肖特基势垒高度的描述符。

D27-36

二维钙钛矿异质结中载流子弛豫动力学调控

韩斌*

陕西科技大学

半导体 II 型异质结是光电器件中的关键组成部分。传统理论认为层间电荷转移是半导体 II 型异质结中主要的载流子弛豫机制。本研究结合实验和理论计算证明了在由二维有机-无机杂化钙钛矿构成的 II 型异质结中,载流子弛豫机制可由电荷转移转变为能量转移,且无需额外的电荷阻挡层。研究结果显示,在具有相同有机间隔层的二维钙钛矿异质结中,如 $\text{BA}_2\text{PbI}_4/\text{BA}_2\text{MA}_2\text{Pb}_3\text{I}_{10}$ 异质结,电荷转移占主导地位。然而,当将异质结其中一层中的有机间隔层 BA 替换为 PEA 时,即形成 $\text{BA}_2\text{PbI}_4/\text{PEA}_2\text{MA}_2\text{Pb}_3\text{I}_{10}$ 时,载流子弛豫过程就从电荷转移转变为能量转移。尽管这两种异质结都是 II 型能带排列,但密度泛函理论计算表明,用 PEA 取代 BA 会形成一种新型的 II 型能带结构。这种新的能带结构抑制了电子和空穴的分离,从而使得能量转移比电荷转移更占优势。这项研究不仅为半导体异质结中层间载流子弛豫动力学提供了重要见解,而且对于未来基于二维有机-无机杂化钙钛矿光电器件的设计也至关重要。

D27-37

基于原位硒化制备 Ge 基 WSe_2 高性能异质结光电探测器

柯少秋、柯少颖*

闽南师范大学

二维过渡金属硫族化合物二硒化钨(WSe_2)具有带隙可调,从单层的直接带隙半导体($\sim 1.65 \text{ eV}$)到块状的间接带隙半导体($\sim 1.2 \text{ eV}$)的性质,使其与三维半导体结合的范德华(vdW)异质结构在高性能的宽光谱光电探测领域表现出巨大的潜力。然而,采用传统的转移方式制备 WSe_2 2D-3D 异质结器件,导致界面缺陷较多、效率低、机械失配导致薄膜破裂、难以实现晶圆级集成等问题,严重制约了器件的响应度和响应速度。此外,原位硒化工艺,虽然可避免转移损伤,但 WSe_2 的成膜过程会与衬底发生互扩散效应及界面化学反应(形成 GeSe 副产物),显著劣化异质结界面质量,难以实现异质集成。本研究创新性地提出基于 GeSi 扩散阻挡层的界面工程策略,结合大管径双温区管式炉进行原位硒化,成功在 GeSi/Ge 上实现大面积、高质量 WSe_2 薄膜可控生长。基于此,结合激光直写光刻技术,构建了一种 $\text{WSe}_2/\text{GeSi}/n\text{-Ge}$ 异质结 8×8 阵列光电探测器。实验结果表明,该异质结器件实现了从 532 到 2200 nm 的宽光谱探测,理想因子接近 1,表明界面载流子复合得到有效抑制。在 1550 nm 波段实现了 1012 Jones 的高比探测率。此外,由于 WSe_2 薄膜的各向异性,该器件在短波红外波段(SWIR)还表现出了高分辨率成像和高性能偏振光检测能力,该研究为原位制备 2D-3D SWIR 光电探测器提供了全新的思路和技术路径。

D27-38

基于二维材料的全印刷柔性传感器

郑璐、王学文*、黄河、曹云强

西北工业大学

通过印刷二维材料构筑柔性传感器在低成本、大规模制造印刷柔性电子器件领域前景广阔。尽管当前墨水产线开发与器件研究已取得显著进展，但高性能柔性电子器件的印刷制备仍面临挑战，主要归因于二维材料结晶度不足及有毒溶剂的使用。本研究展示了一种全印刷柔性多功能传感器的制备工艺、性能与应用：提出采用两性离子表面活性剂作为分散剂，促进单晶二维材料在水-异丙醇体系中的液相剥离与均匀分散，实现绿色墨水配方。该分散体系无需添加剂/粘合剂的核心优势，可一步制备多种高稳定性二维材料墨水（如 MoS_2 ， MoTe_2 ， WS_2 ， WSe_2 ， WTe_2 ， SnSe 等）。所制备墨水能在柔性基底上均匀沉积，根据二维墨水材料的本身性质，可以构筑柔性湿度传感器、柔性生理电电极、柔性光电传感器等。该策略推动二维材料柔性电子器件的规模化制造，显著加速其工业化集成进程。

D27-39

化学气相沉积生长单层二维金属有机骨架单晶

崔雪萍*

中国科学院化学研究所

二维金属有机骨架（MOFs）由于可编辑的碳基-无机杂化孔/腔结构及可调的性能成为近些年极具吸引力的研究领域之一。与块体 MOFs 相比，单层或几层原子厚的二维 MOFs 展现出快速传质、独特的载流子运输和极高比例的暴露活性位点等优点，在气体分离、分子传感、催化和超导体等应用中作为重要技术的构建模块显示出了巨大的应用潜力。可靠制备二维 MOFs 是其性质和应用开发的关键。然而，由于 MOFs 块体晶体固有的脆性和强的层间相互作用，大尺寸、原子级厚度的 MOFs 单晶的制备具有很大的挑战。化学气相沉积（CVD）方法是制备高质量二维单晶的可靠方法，但是由于配体分子体积大、MOF-CVD 反应温度低等反应热力学和动力学限制，当前传统 CVD 方法仍难以制备原子级厚度的二维 MOFs 单晶。

我们开发了一种新的 MOF-CVD 方法—自冷凝辅助 CVD（SCA-CVD）方法，首次利用 CVD 方法实现了大尺寸单层 MOFs 单晶的制备。在生长过程中设计构建了陡峭的温度梯度，在 MOF-CVD 生长过程中引入了配体自冷凝液滴，创造了一种临时的液态生长环境；该临时液态环境极大地提升了前驱体分子的扩散速度和迁移距离，增强了动态可逆成键过程，从而促进了大尺寸单层 MOFs 单晶的高质量生长。制备了单层聚[铁（苯并咪唑）₂]单晶，其最大尺寸可达 62 μm ；透射电子显微镜和高分辨原子力显微镜表征证明了获得的单层和少数层 MOFs 单晶均具有高的晶体质量。另外，这种 SCA-CVD 方法具有良好的普适性和兼容性，成功实现了不同有机配体和金属离子组成的二维 MOFs 单晶的制备，还可以在多种不同类型的生长衬底，甚至在其他二维材料表面直接生长。基于此，在单层 MoS_2 表面直接生长了超薄 MOFs 单晶，构筑了首个二维 MOFs/单层 MoS_2 超薄范德华异质结。该异质结集成了 MOFs 材料的精确门效应和单层 MoS_2 的高灵敏特性，且异质结中 MOFs 超薄、单晶的特点可最大限度地发挥 MOFs 材料的固有门效应，最终实现了快速、高选择性的氨气传感性能。这种 SCA-CVD 方法为传统方法难以高质量制备的原子级厚度的碳基分子框架材料提供了一种新的合成途径，促进了低维分子框架材料在器件中的集成和应用。

D27-40

二维硼烯的精准合成与化学调控

李秋琨*

厦门大学

二维硼烯是一种由硼原子构成的新型二维材料，具有很强的电子-声子耦合特性，被预测为二维超导体。实验上也证实了硼烯是一种二维金属，并观测到了狄拉克能带结构和电荷密度波现象，近年来在材料科学和低维物理等领域引起广泛关注。但是由于硼原子丰富的成键结构与高化学活性，硼烯在大气环境下很快就会被氧化，这使得它的合成和应用被局限于超高真空环境。我们的工作围绕着二维硼烯的精准合成与物性调控展开。本次报告将介绍三个工作，分别通过调控硼烯的表面化学、层间键合以及维度效应，来

对硼烯的化学和物理性质进行精密调控。

D27-41

范德华半导体中电场可调的室温铁磁性

傅德颐*

厦门大学物理科学与技术学院

铁磁半导体可通过电学手段将电荷输运和磁性耦合在一起, 在实现基于自旋的逻辑器件方面展示出巨大的潜力。尽管几十年来人们一直在努力实现这种多功能性, 但在室温下同时保持良好的半导体性和铁磁性仍是一项重大的挑战[1]。近年来发现的二维范德华磁体(如 CrI_3 [2] 和 CrSBr [3]) 可将电场可调的电荷输运和自旋态结合起来, 表现为磁晶体管, 但居里温度(T_C)仍低于 160 K。传统稀磁半导体(DMSs)基于对非磁性半导体[4]进行替位式磁掺杂, 为实现高至室温的 T_C 提供了替代解决方案。然而, 过高浓度的磁性掺杂通常会将 DMS 的迁移率降低到仅为几 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 或限制其栅压可调性[5]。因此, 具有高迁移率、高开关比和低亚阈值摆幅等关键半导体特性的室温铁磁体仍然遥不可及。然而, 半导体性范德华材料中的掺杂对电子结构的影响可以很小, 因此非常适合在层状半导体中掺入磁性杂质[6]。黑磷(BP)是一种具有独特优势的范德华半导体, 如适中的带隙、创纪录的迁移率、室温微米级的自旋弛豫长度、高自旋各向异性以及适合钴(Co)掺杂产生铁磁性[7]等, 这些特性使 BP 成为磁性原子插层的一个极具吸引力的候选材料, 为在保留其固有半导体特性的同时实现栅压可调的室温磁性提供了潜在的机会。

在此, 我们利用原子级厚度的范德华层状六方氮化硼作为扩散屏障将 Co 原子通过扩散掺入少层 BP 中形成 Co-BP, 基于此构建了横向和垂直结构的 Co-BP 器件并系统研究了其磁输运特性。在横向器件中, 我们观察到了栅压可调的反常霍尔效应(AHE)和面内磁阻(MR), 同时保持了双极型输运特性和高载流子迁移率(约 $1000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$); 在垂直器件中, 我们观察到了高至室温的偏置/栅压均可调控的隧穿磁阻(TMR)。这些实验结果共同表明 Co 掺杂的 BP 中产生了室温长程磁序。Co-BP 中耦合共存的铁磁性和半导体性(高载流子迁移率)与传统磁性体系中的电可调性截然不同。鉴于 BP 所展现的电学多功能性、较长的自旋扩散长度以及在大规模生长和集成方面取得的进展[8], 我们的工作为将 Co-BP 作为铁磁半导体元件应用于自旋电子集成系统开辟了广阔的前景。

D27-42

黑磷等单质磷材料的合成及光电特性

王佳宏*

中国科学院深圳先进技术研究院

从“鬼火”到“火柴”、从农药“草甘膦”到半导体磷化铟, “磷”构成了丰富的材料、带来了多样的应用。在磷基材料家族中, 二维黑磷因其独特的晶体结构和半导体特性而广受关注, 并在储能、光电子器件等领域展现出独特魅力。但是目前黑磷的研究仍面临着如何实现规模化可控制备和如何提升稳定性两大难题。此外, 是否有其他更稳定、性能更好的二维单质磷材料也是可以深入探究的方向。本报告将介绍以黑磷为代表的单质磷材料可控合成的最新进展, 及其在光电探测、光存储等领域的应用研究。

D27-43

手性超导候选材料 4Hb-TaS₂ 中由范霍夫奇点调控的电荷序

李一苇^{*1}、孙玉平²、柳仲楷³、徐楠¹

1. 武汉大学高等研究院
2. 中国科学院合肥物质科学研究院
3. 上海科技大学物质科学与技术学院

手性超导候选材料 4Hb-TaS₂ 已展现丰富的新奇量子物态, 包括时间反演破缺的超导相[1]、超导磁涡旋中的零偏置电导峰[2]和自发涡旋相[3]等。4Hb-TaS₂ 是由交替堆叠的 1T-和 1H-TaS₂ 构成的层状超晶格体系, 其中单层 1T-TaS₂ 为莫特绝缘体且为量子自旋液体候选体系[4], 单层 1H-TaS₂ 为伊辛超导体[5]。1T/1H 的范德华层间作用导致了显著的由 1T 向 1H 层的电荷转移。利用亚微米空间分辨能力的角分辨光电子能谱

技术 (Nano-ARPES)，我们成功分辨了 1T 和 1H 两类终端面。两类终端面呈现了截然不同的费米面。精细的电子结构测量表明内层与表面 1H-TaS₂ 分别具有 2×2 和 3×3 的电荷序，理论分析表明电荷序的转变由穿过范霍夫奇点的栗弗席兹相变导致[6]。此外，我们还观测到 1H 层 2×2 电荷序与 1T 层电荷序间相互作用产生的莫尔能带。本研究成果将有助于理解复杂强关联体系中电荷序、超导性和量子临界点间的紧密关系。

D27-44

基于 Cu_xTiSe_2 的二维-三维混合异质结构中体电子结构的 moiré 调制

李仁喆*

武汉大学

莫尔超晶格可以在二维系统中实现各种奇异的量子现象。我们利用角分辨光电子能谱，研究了界面莫尔势可以调控过渡金属二硫化物的三维电子态。由于与惰性气体单层的晶格失配， Cu_xTiSe_2 的体电子态明显呈现出莫尔复制现象。我们证明界面莫尔效应与三维波矢的电荷有序性强烈耦合，这在混合维度莫尔效应的形成中起着重要作用。莫尔周期可以通过不同的惰性气体原子和退火温度进一步原位调控。我们的研究结果为构建 2D-3D 混合维度异质结构的器件提供了启示。

D27-45

Residue-free wafer-scale direct imprinting of two-dimensional materials

Zhiwei Li, Weibo Gao*

Nanyang Technological University -Singapore

Two-dimensional (2D) semiconductors hold great potential for next-generation electronics in extending Moore's law beyond silicon. However, despite pioneering advances in proof-of-concept device demonstration and wafer-scale crystal synthesis, its industrialization will be hampered by the lack of a compatible residue-free patterning technology. To overcome this limitation, we demonstrate a facile metal-stamp imprinting method for patterning 2D film into wafer-scale arrays of intrinsic quality. The three-dimensional (3D) morphology of metal-stamp forms a local contact at stamp-2D interface, ensuring that the 2D material could be selectively exfoliated and leaving 2D arrays on grown substrate. Furthermore, detailed microscopy and spectroscopy characterizations are conducted to confirm their clean surface and undamaged crystal structure. A statistical analysis of the 100 back-gated transistors and 500 top-gated logic circuits shows a marked improvement in device uniformity (20 times lower variation of threshold voltage) than traditional method, and a device yield of 97.6% on 2-inch wafer. This work achieves a residue-free, time-saving, and widely applicable patterning technique for 2D materials and lays the foundation for the future integration of 2D electronics in industry.

D27-46

二维过渡金属二硫族化合物单晶制备和电子器件构筑

史建平*

武汉大学

二维半导体材料具备独特的物理化学性质，并且其原子层厚度和平面结构与现有微纳加工工艺兼容，有望成为新一代高性能电学、磁学、光学、热学等器件应用的核心材料。然而，其可控制备还存在诸多科学与技术问题；二维半导体材料的精准掺杂可提高载流子最近邻跳跃速率和跳跃几率，增加载流子迁移率。但是过量浓度的金属掺杂会在其表面引入大量缺陷，增加载流子散射，降低电子器件性能。我们主要从事晶圆尺寸二维半导体 TMDCs 单晶的可控制备、新物态调控和新器件构筑。围绕高性能新原理器件中关键电子材料的设计和内在物理机制的阐释开展研究。合成了晶圆尺寸二维半导体 TMDCs 单晶并建立了新生长理论，为高性能电子器件的研制提供了新材料；提出了过渡金属掺杂提升半导体晶体管性能的新机理，开发了全二维电子器件构筑的新技术，获得了单层 TMDCs 超高的载流子迁移率；设计了新型二维铁电/多铁材料，并揭示了鲁棒的室温磁电耦合特性，丰富了场效应晶体管的功能，为新原理二维电子器件的研

制提供了新方案。

D27-47

二维半导体激子相变与光学性质的演化

于艺羚*

武汉大学

二维半导体的弱电介质屏蔽和强激子相关多体作用导致了众多新奇的光学现象。不同激子密度导致激子间不同的相互作用,深刻改变了二维半导体内的光-物质相互作用。(1)类似于原子或分子系统,具有不同密度和相互作用的激子也会经历相变,例如从激子气态过渡到电子-空穴等离子体(EHP),并最终凝聚成奇异的电子-空穴液体(EHL)相。而单层过渡金属硫族物(TMD)中的巨大激子结合能使EHL凝聚可在室温下发生,使EHL相特异的发光与输运性质有望应用到器件当中。在这次报告中,我将系统地讨论二维TMD激子相变的物理路径,及其发光和激子传输等光学性质在上述不同激子物相中的变化规律。包括首次证实的激子莫特相变引起的放大自发辐射,以及相变对激子输运效率数量级的提高。(2)此外,我还将讨论通过对单层MoS₂的同位素平面异质结的表征,揭示在单层极限量子限域作用下,强激子-声子耦合导致的单层MoS₂中异常的同位素诱导光学带隙变化。

上述对二维半导体中的激子相关强多体作用以及激子相变的研究,为二维半导体在光子和量子器件中的应用提供了新的思路。

D27-48

基于金属磷硫化物的阻性神经形态器件

李叶生*

武汉大学物理科学与技术学院

忆阻器是执行存算一体式神经形态计算,突破冯·诺依曼瓶颈最具潜力的候选者之一。然而,绝大部分忆阻器的阻性行为由随机分布的缺陷驱动,存在严重变异性和高漏电等性能问题。我们聚焦于宽禁带金属磷硫化物(MPS),提出了“非缺陷型有序结构空位”阻性驱动机制和掺杂策略,突破了传统缺陷驱动机制性能瓶颈,获得了优异极限性能下的阻性一致性;采用离子可嵌脱vdW电极设计,实现了兼具大开关比和模拟阻性行为的高权重映射能力神经形态器件。利用所发展器件,执行了多种可靠存内逻辑运算、卷积图像处理和图像分类等多种人工智能任务。MPS阻性材料体系提供了新型阻性机制,获得多种超越主流过渡金属硫属化物和金属氧化物的性能,将有可能成为下一代有潜力的神经形态计算硬件。

D27-49

二维室温磁性异质结的制备及性能研究

文耀*

武汉大学

基于磁性材料的存储器件在高密度、低功耗、高速度的存储及计算领域有着重要的应用前景,自在二维(2D)CrI₃与Cr₂Ge₂Te₆等材料中发现本征磁性以来,二维磁性材料由于其超薄的厚度、独特的物理特性以及在自旋电子学领域的潜在应用受到了广泛的关注。并且,2D材料为集成各种晶体提供了一个理想的平台,从而能够形成具有丰富特性的异质结构。我们提出了一种通用的生长方法,用于合成2D二元/三元磁性异质结构。在典型的横向和垂直Cr₁+mSe₂/CuCr₂Se₄异质结中观察到了原子级锐利的界面,通过二次谐波产生测试,在该异质结中发现了显著增强的信号,进一步的磁性测量显示其居里温度高于室温,最高可以达到360 K,并且在这种异质结构中的发现了随厚度和温度变化的磁特性。此外,在另外四种Fe-Cr-S、Co-Cr-S、Cu-Cr-S和Cu-Cr-Te体系中合也成了类似的2D磁性异质结,证明了这种生长模式的普遍性,并显示出了有趣的物理特性。这项作为研究2D二元/三元异质结构的物理特性、相关器件以及潜在应用提供了一个良好的平台。

D27-50

新型量子材料物性调控的第一性原理研究

翟保兴

河南省科学院半导体研究所

近年来,关于量子材料的研究逐渐受到越来越多的关注,因为它们具有源自其量子力学行为的卓越电子、磁性和光学特性,这些特性使量子材料在电子,计算,能源等领域的应用前景非常广阔。例如,研究人员发现了新的拓扑绝缘体,这些材料只能在其表面导电,而在整体上是绝缘的,有望用于低功耗电子和量子计算应用。此外,对二维电子气中的量子霍尔效应和分数量子霍尔效应的研究使人们对电子在强磁场中的行为有了新的认识,这有可能用于制造新型电子设备。对于新型量子材料的发现以及量子材料的物性调控是一项具有挑战性的课题,需要深入了解基础物理学和开发复杂的制造技术。研究人员通常结合使用理论预测、实验测量和先进的表征技术来揭示量子材料的迷人特性。在此,我们通过第一性原理计算的方法,分别采用构建异质结以及原子插层的手段对几种量子材料进行物性调控的理论研究,主要研究成果包括:(1)通过异质结工程,利用二维铁磁材料的磁性和二维铁电材料的极化特性实现了对二维谷电子材料电子结构的调控;(2)通过原子插层方法得到了一种二维铁电超导体,利用铁电极化反转可以实现可逆的超导二极管效应;(3)发现一类可以通过离子嵌入脱出实现半导体-金属转变的材料,为神经形态计算以及全固态电池电解质提供了新的候选材料。

D27-51

对称性破缺工程下的低维材料的设计合成与器件应用

段瑞焕*

新加坡南洋理工大学

Symmetry breaking in low-dimensional materials often determines their novel physical properties and application potential. Through design and synthesis strategies based on symmetry-breaking engineering, it is possible to precisely tune the crystal and electronic band structures of low-dimensional materials at the atomic or molecular scale. This capability enables the enhancement or induction of functionalities such as ferroelectricity, nonlinear optical responses, and quantum light emission. In this study, I utilized a downscaling approach to symmetry breaking for the design, synthesis, and property investigations of low-dimensional materials. A series of non-centrosymmetric low-dimensional crystals were successfully fabricated, and their second-harmonic generation, ferroelectric behavior, and related phenomena under symmetry breaking were systematically examined. These findings offer a novel material platform and design strategy for high-performance optoelectronic devices and the next generation of quantum technologies.

D27-52

基于 WSi_2N_4 /石墨烯异质结的界面稳定性及能带结构调控

王珈琪、马新国*

湖北工业大学

通过降低界面势垒来改善基于异质结场效应晶体管的电输运性能,是一项严峻挑战。本文采用第一性原理方法,系统研究了不同界面距离和外电场作用下 WSi_2N_4 /石墨烯异质结的电子特性。结果表明, WSi_2N_4 与石墨烯之间可形成稳定的范德瓦尔斯异质结。在界面调控方面,调节外电场和界面距离均可有效调控 WSi_2N_4 /石墨烯异质结的能带结构,但外电场对肖特基势垒高度的调节效果显著大于界面距离的调控。在外电场作用下,该异质结可实现从 p 型肖特基接触向 n 型肖特基接触的转变,最终形成欧姆接触。值得注意的是,当施加 $+0.55 \text{ V} \cdot \text{\AA}^{-1}$ 的外电场时,石墨烯载流子浓度可达 $2.73 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 的峰值。研究证实,界面电荷密度的重新分布决定了异质结中肖特基势垒高度和接触类型。这些发现揭示了 WSi_2N_4 /石墨烯异质结在高灵敏度肖特基场效应晶体管中的应用潜力。

D27-53**Graphene/Polymethyl Methacrylate Heterostructure-gated Flexible Organic Light-Emitting Transistors**

Shuangdeng Yuan, Dingdong Zhang, Jinghong Du, Wencai Ren*

Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

Organic light-emitting transistors (OLETs) are possibly the smallest integrated optoelectronic devices, which have great potential for next-generation wearable intelligent display technology. A flexible and transparent gate/dielectric heterostructure is basically required for gate modulation of luminescence. Here, large-area graphene/Polymethyl Methacrylate (PMMA) heterostructure film is produced by a centrifugal casting (CC) and ozone treatment strategy. The CC process enables the film to be highly uniform with coefficients of variation (CV) of 2.66%, 0.52%, 0.61%, and 0.104% for PMMA thickness, sheet resistance, optical transmittance@550 nm wavelength and dielectric constant, respectively, which are significantly superior to those prepared by commonly-used spin coating method. The ozone treatment effectively reduces the surface roughness and improves the surface compatibility, facilitating the deposition of organic emissive channel layer with high photoluminescence intensity. On this basis, flexible graphene/Oz-PMMA heterostructure-gated single-layer OLET is demonstrated with effective gate modulation of luminescence. Maximum external quantum efficiency (EQE_{MAX}) of 7.53% and maximum luminance of more than $20,000 \text{ cd m}^{-2}$ reach on par with the best rigid devices of the same planar structure. Moreover, the performance of OLET devices is highly consistent with a CV of EQE_{MAX} of only 2.5%, laying the foundation for future large-scale practical applications. The study provides an ideal gate/dielectric platform for production of flexible integrated optoelectronic devices.

D27-54**Point defects in monolayer WSi₂N₄ and MoSi₂N₄**

Jinmeng Tong, Yu Cao, Zhibo Liu, Wencai Ren*

institute of metal research

Point defects play a pivotal role in governing material properties, particularly in atomically thin 2D systems, where the influence is dramatically enhanced due to reduced dimensionality. The MoSi₂N₄ family is a newly emerging class of van der Waals layered 2D materials with exceptional electronic, optical, thermal, mechanical, magnetic, and ferroelectric properties, but the atomic-scale characteristics of intrinsic defects and their impact on material properties remain unexplored experimentally. Here, through combined atomic-resolution scanning transmission electron microscopy (STEM) and first-principles calculations, we systematically characterize point defects in semiconducting monolayer WSi₂N₄ and MoSi₂N₄—prototypical members of this material family. Our atomic-scale imaging identifies ten distinct defect types, including vacancies and antisite substitutions, with three dominant configurations exhibiting high abundance: Si-for-top-N antisites (SiN(t)), double-middle-N divacancies (VN(m)2), and double-top-N divacancies (VN(t)2). Using monolayer WSi₂N₄ as a model system, we demonstrate that these defects induce substantial bandgap reduction, in some cases causing even complete gap closure enabling insulator-to-metal transitions, while certain configurations generate spin-polarized bands with localized magnetic moments. Intriguingly, in monolayer MoSi₂N₄, we observe two low-dimensional defect superstructures, including 2D SiN(t) networks and 1D double-Si-for-Mo antisite (Si₂Mo) chains formed from defect self-organization. These findings not only establish a fundamental defect-property relationship for monolayer WSi₂N₄ and MoSi₂N₄ but also provide critical insights into defect-driven engineering of electronic structure, magnetic states, and quantum phenomena in such 2D semiconductors.

D27-55**层间距和外加电场对 MoSi₂N₄/Graphene 异质结肖特基势垒的调控**

王立波、马新国*

湖北工业大学

石墨烯 (GR) 与单层 MoSi_2N_4 的结合引起了广泛关注, 然而对其电接触调制的理解仍未完全探索。在此, 通过第一性原理计算系统地研究了层间距和外部电场对 GR/ MoSi_2N_4 异质结界面特性和电子结构的影响。研究发现, 当石墨烯与 MoSi_2N_4 片结合时, 会形成稳定的范德华异质结。结果表明, 通过改变 GR 与 MoSi_2N_4 片之间的层间距或在 GR/ MoSi_2N_4 异质结上施加垂直外部电场, 可以调节肖特基势垒的类型和高度。值得注意的是, 随着外部电场强度每增加 $0.1 \text{ V} \cdot \text{\AA}^{-1}$, 肖特基势垒高度显著变化约 $0.2\text{--}0.3 \text{ eV}$ 。研究确认, 能带的变化是由层间距和外部电场引起的电荷重新分布所致。这些发现将为下一代场效应晶体管的设计提供合理的依据。

D27-56

莫尔铁电中畴壁驱动的极化调控

徐浩文、童文旖、段纯刚*

华东师范大学物理与电子科学学院

近年来, 界面铁电性因其在低维极限下仍能保持稳定且可切换的自发极化, 成为铁电材料研究的前沿热点。相较于传统块体铁电材料, 界面铁电性 (如范德瓦尔斯结构中的滑移铁电性) 展现出超低功耗、超快极化切换和优异的抗疲劳特性, 使其在下一代高密度非易失性存储器、神经形态计算和超低功耗电子器件中具有广阔应用前景。然而, 尽管这类体系的极化反转通常归因于界面层的相对滑移, 其微观物理机制仍存在诸多未解之谜。例如, 双层完美单畴具有的 C_3 对称性理论上允许三个等效的滑移路径, 因此无法沿特定路径进行滑动, 实验也表明, 完美单畴结构无法在电场下实现极化反转, 暗示对称性破缺在切换过程中扮演关键角色。

本工作以双层氮化硼为例, 结合第一性原理计算和机器学习方法, 深入研究了六方莫尔体系中界面铁电极化切换的物理机制。研究发现, 六方结构中的畴壁可分为 AC-1、AC-2、ZZ-1、ZZ-2 四种基本类型, 这些畴壁将 AB 和 BA 两种相反极化态的畴区分隔开来。在本征状态下, 这些结构均表现为多畴反铁电构型, 加电场后, 电场驱动畴壁移动, 从而体系产生净极化。另外, 根据畴的形状特征, 体系可划分为矩形畴 (rectangular domain) 和三角形畴 (triangular domain) 两种典型结构。机制研究表明, 畴壁在极化翻转过程中扮演着核心角色, 畴壁内部存在的面内极化效应能够打破体系的 C_3 对称性, 为畴壁运动建立优先方向, 从而有效驱动双极态之间的转换。此外, 工作系统探讨了畴壁特性对铁电易失性的调控作用, 发现畴壁类型的多样性直接影响铁电性的易失性特性, 从宏观和微观层面阐明了畴壁在界面铁电切换与稳定性控制中的双重角色。该发现深化了对界面铁电物理起源的理解, 为二维存储器等新型电子器件设计提供了理论基础。

D27-57

基于二维复合材料薄膜的自供电柔性压力传感应用

李欣玉、张煜浦*

西北工业大学

随着新一代可穿戴设备的发展, 对于传感器的性能要求提升的同时, 对于其能够轻质化和便携式应用于人体多部位要求也越来越高, 自供电传感设备的开发研究为满足需求带来了希望。二维黑磷 (BP) 材料由于具有优秀的二维片层结构、高载流子迁移率、多表面活性位点和可变的带隙结构等优势, 已被应用于柔性超级电容器和柔性压力传感器中, 展现出优秀的实用性能。本研究利用具有高比表面积和多孔隙率的 MOF 材料, 以及具有优秀的导电性和结构稳定性的 CNTs 对 BP 进行复合改性, 制备了多孔 3D BP@MOF-CNTs 柔性薄膜, 并成功同时应用于柔性超级电容器和柔性压力传感器中。通过超声化学方法特有的超声空化效应和促进传质作用能够实现复合材料的均匀复合, 实现三维导电网络结构构筑, 增加了导电通路从而促进离子传输和电荷转移速度。在超级电容器性能测试中, 所制备的器件与纯黑磷相比展现出高比电容, 低阻抗和优异的循环稳定性, 循环 10000 次容量保留率仍高达 99%。在压力传感测试中, 黑磷的压阻特性与碳纳米管和 MOF 协同作用, 实现压力信号高效转换与传输, 该器件对不同压力呈现出灵敏且稳定的响应, 对不同程度的弯曲角度也有明显的响应且具有较好柔韧性。通过集成式设计, 实现了自供电柔性器件的成功制备, 能够用于包括人体多处关节等部位的信号监测, 展现出优秀的柔性和压力传感性

能。本研究有望为自供电柔性可穿戴电子设备等相关应用提供高性能的解决方案，为多功能集成器件的发展开辟新路径。

D27-58

自支撑顺电双层膜中应变诱导的莫尔极性涡旋

张亦轩¹、沙浩治²、王学云¹、梁德山¹、王静¹、李千²、于荣²、黄厚兵^{*1}

1. 北京理工大学

2. 清华大学

由于铁电材料强烈的极化-晶格耦合特性，应变工程已成为设计新型铁电畴结构的关键策略。最新发现在二维莫尔自支撑双层膜存在涡旋图案，揭示了膜内复杂的应变场在调控此类纳米拓扑结构中的关键作用。然而，这些莫尔极性涡旋的起源与微观拓扑特性尚未被充分探究。本研究通过结合实验观测与弹性理论，确定了扭角自支撑双层 SrTiO_3 体系中应变的解析解，并进一步采用相场模拟研究莫尔涡旋图案的微观拓扑及其形成机制。研究发现：面内莫尔涡旋图案源于扭角堆叠诱导的周期性分布的原子位移涡度，而弹性能、挠曲电能与梯度能的复杂相互作用共同构成了涡旋形成的能量来源。通过三维相场模拟，我们揭示了极性涡旋具有显著的面内散度和面外手性。通过定量施加外电场或调节挠曲电效应大小，可实现对极性涡旋的面外手性的定量控制。本工作为莫尔体系中铁电拓扑结构的形成和调控提供了一定的理论指导。

D27-59

二维 Janus WSSiN_2 单层光催化水分解的第一性原理计算研究(汇报)

肖冠言、马新国*、袁罡

湖北工业大学

寻找高性能光催化剂以实现高效的太阳能转化，目前仍未达到理想目标。在此，首次提出一种具有 Janus 结构的 ASSiN_2 ($A = \text{Cr}, \text{Mo}, \text{W}$) 单层，利用第一性原理计算来探索其光催化活性。研究发现，Janus 结构的 ASSiN_2 单层在结构上是稳定的，展现出半导体特性，具有 1.47、2.86 和 3.02 eV 的间接带隙。通过对电荷密度差的综合分析，证实 Janus 结构中存在增强的内建电场，这有助于光生载流子的分离。值得注意的是，唯有 WSSiN_2 单层的带边电位完全满足光催化水分解的氧化还原条件。同时， WSSiN_2 单层具有高达 $1098.36 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 的高电子率迁移和强大的可见光吸收能力，这表明其在光催化剂应用方面具有巨大潜力。这些发现将为开发二维 Janus 材料作为高性能光催化剂提供可靠的证据。

D27-60

二维范德华材料中的磁电拓印效应与磁电斯格明子

申中、董帅*

东南大学

磁/电斯格明子作为实空间的拓扑孤子，由于他们在基础科学研究和潜在信息器件应用两方面的重要意义而受到了持久的关注和研究。但是，通过节能的方式对磁斯格明子进行高效的探测和调控依然是一个挑战。此外，电斯格明子的稳定通常需要比磁斯格明子更加苛刻的条件。因此，我们提出一种“磁电拓印”的策略来解决以上问题。通过近邻相互作用，自旋和偶极矩之间建立起一一映射关系。因此，磁斯格明子可以被映射为电斯格明子，这提供了一种通过识别/控制“电指纹”来探测/调控磁斯格明子的新策略。更有趣的是，这些由磁斯格明子诱导出的电斯格明子起源于电子云而非晶格结构的扭曲。这使得该机制产生的电斯格明子天生就拥有电子的超高速动力学。我们的工作给出了一种产生电斯格明子的新机制，同时通过磁电斯格明子这一新型准粒子，架起了磁、电斯格明子研究的桥梁。

D27-61

ScY-或 CaTi-共掺杂增强纤锌矿型 AlN 压电性能的理论证据

吴瀛涛、马新国*

提高 $w\text{-AlN}$ 的压电系数并保证其结构稳定性是一个严峻的实验和理论挑战。本文采用第一性原理计算方法,研究了掺杂 ScY 和 CaTiO_3 的 $w\text{-AlN}$ 的稳定性和压电特性。形成焓分析和 AIMD 热力学模拟结果表明,有序合金具有良好的结构稳定性,证实了常规有序共掺杂结构的稳定性优于无序结构。 $(\text{ScY})_x\text{Al}_{1-x}$ 的压电系数氮化铝钙钛合金成功地预测了 $x\text{N}$ 合金与纯 $w\text{-AlN}$ 相比改进了几倍。其中, $(\text{CaTi})_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N}$ (17.42pC/N) 的压电应变常数 d_{331} 比 $(\text{ScY})_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N}$ (8.70pC/N) 高出 2 倍。当掺杂剂浓度 x 为 0.5 时,可以使用掺杂剂浓度 x 为 0.5 的掺杂剂。结果表明, $(\text{CaTi})_x\text{Al}_{1-x}$ 的极化强度越大,极化强度越大 $x\text{N}$ 的 c 轴源于掺杂后较大的晶格畸变和电荷重分布。此外,掺杂后 Al-N 的弱共价键合是压电应变常数 d_{33} 提高的另一个原因。研究结果可为进一步提高 $w\text{-AlN}$ 薄膜的压电性能及其在声学器件中的应用提供技术支撑。

D27-62

范德华 IV 族单硫族化合物的非常规(反)铁电性

于逸伦*

华东师范大学

从根本上说,铁电体必须属于非中心对称的空间群,这限制了更多新型铁电材料的探索。我们通过引发结构畸变,在具有意外本征面外反铁电性的中心对称范德华 IV 族单硫族化合物 GeSe 半导体中诱导出铁电性,从而绕过了这一限制。电测量的双类型和单类型滞回回线、原位原子成像中观察到的键合畸变,以及第一性原理计算揭示的垂直极化,证实了本征面外反铁电性和由垂直外电场诱导的反铁电性-铁电性转变。空间反演对称 GeSe 中隐藏的面外反铁电性和场诱导的铁电极化,使其成为兼具面内和面外铁电性的范德华层状半导体新成员,并且可能可扩展到所有 IV 族单硫族化合物和其他中心对称范德华层状材料。

D27-63

二维范德华材料超快光电响应研究

王雨凡、王笑*

湖南大学

光电流的形成涵盖了从光子吸收到电子收集的复杂物理过程,其研究对于理解新型纳米材料基本物性及评价微电子器件性能具有重要意义。非中心对称材料中的对称性破缺会导致光生载流子的不对称分布,零偏压下产生非零的光电流,称为体光伏效应(BPVE)。源于自发电极化的 BPVE 可以达到超过肖克利-奎瑟极限的高转换效率。新兴的范德华(vdW)材料为 BPVE 提供了理想的平台。利用体光伏效应调控光生载流子行为,为实现超快光电响应提供了有效手段。基于此,我们利用高时空分辨光电探测技术(Spatial and time-resolved photocurrent technique, STRPC)结合泵浦探测光激发模式及微区光电流测量,可以实现亚皮秒的时间分辨率及百纳米量级的空间分辨率,理解其中光生载流子的动力学行为、提升体光伏器件性能具有重要意义。首先,我们发展界面对称性工程,构建 $\text{MoS}_2\text{-BP}$ 面内面外双极化范德华器件,面内极化在顶层 MoS_2 产生 BPVE,而面外极化辅助的电荷载流子转移进一步加速了层间电子传输,在面内面外双自发电极化的协同作用下,异质结展现出最快 26 ps 的本征响应速度及 2.2 ns 的实际响应速度,同时具有 0.6V^{-1} 的体光伏系数^[1]。此外,我们证实了室温下偶数层 $\epsilon\text{-InSe}$ 中的面外铁电性,并利用该面外铁电性不仅实现了 10^4 高开关比的非易失性存储,且实现了约 3 ps 的超快可切换光伏响应,超越了相同器件结构中石墨烯区域的响应速度^[2],证明了铁电极化在光生载流子动力学中的关键作用,为实现多功能铁电和光电子器件提供了理论支持。

[1] Zeng, Z., Tian, Z., Wang, Y. et al. Dual polarization-enabled ultrafast bulk photovoltaic response in van der Waals heterostructures. Nat. Commun. 15, 5355 (2024).

[2] Wang, Y., Zeng, Z., Tian, Z. et al. Sliding Ferroelectricity Induced Ultrafast Switchable Photovoltaic Response in $\epsilon\text{-InSe}$ Layers. Adv. Mater. n/a, 2410696 (2024).

D27-64

Machine learning-based carbon source screening for CVD graphene growthWeizhi Wang¹, debo hao¹, xiucan sun^{*1}, zhongfan liu^{1,2}

1. Beijing Graphene Institute

2. Peking University

The judicious selection of carbon sources plays a pivotal role in accelerating graphene synthesis across diverse chemical vapor deposition (CVD) scenarios, including static, roll to roll, and fluidized-bed systems, have distinct carbon source requirements. For example, in fluidized bed systems, traditional carbon sources fail to meet the needs due to their slow decomposition rate, leading to poor graphene quality and low production efficiency. To address this, this study proposes an efficient carbon source screening method based on machine learning. First-principles calculations were used to automatically compute the energies and electronic information of 5000 carbon sources and their relevant intermediate states, which provided the reaction directions and thermodynamic criteria for the decomposition polymerization reactions. The Monte Carlo method was then applied to simulate the reaction process of carbon source molecules, predicting the distribution and chemical potential of different intermediate species. A graph neural network model was trained using the obtained data to predict the intermediate state distribution and chemical potential after carbon source molecule decomposition. This model was used to identify carbon sources that best match the specific CVD system. The proposed method provides strong theoretical support for experimental work and significantly improves the efficiency and accuracy of carbon source screening.

D27-65

基于拓扑半金属的室温高灵敏太赫兹探测器研究

阳柳、王东、唐克勤、董卓、张凯*

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

太赫兹 (THz) 辐射 (0.1-10 THz) 结合了微波电子学和红外光子的优势, 在遥感、高分辨率成像、生物医学、国土安全和高数据率通信等领域具有广泛的应用前景, 是各国竞相开发利用的重要频谱资源。太赫兹探测作为太赫兹核心技术之一, 对于推动太赫兹系统的变革型发展与多场景应用具有重要意义。拓扑半金属高迁移率、易于调控的特性, 可延续经典的太赫兹探测机制, 实现性能提升; 同时, 其新奇物理特性可拓展新型响应增强机制, 获得性能突破。在本报告中我们从材料设计和输运性质等方面着手, 开发了基于拓扑半金属的室温高灵敏太赫兹探测器并探究了其探测机制及成像应用, 获得的进展包括 (1) NbGe_xTe₂ 组分调控增强型室温太赫兹探测器, 通过 Ge 组分调控的方式去探究材料本征物性与太赫兹响应的关联, 其中, 所构筑的具有线性色散带的拓扑半金属相展现出最佳的太赫兹响应性能; (2) II 型外尔费米子驱动的低功耗、偏振灵敏太赫兹探测。该器件展示了 3.95 pW/Hz^{1/2} 的超高灵敏度, 以及无偏压模式下 0.46 μs 的快速光响应速度。此外, 还介绍了其各向异性的太赫兹光响应(光电流各向异性比可达 14.1), 以及高分辨率的太赫兹透射成像演示; (3) 具有强拓扑表面态的准一维 Ta₂PdSe₆ 驱动的高偏振灵敏太赫兹探测。受拓扑保护的线性色散特征协同链状结构产生的各向异性效应, 将载流子迁移率提升至 10⁴ cm² V⁻¹ s⁻¹ 量级, 器件在 0.28 THz 下响应度可达 3.63 A W⁻¹、噪声等效功率优于 7.4 pW Hz^{-1/2}、光电流各向异性比高达 68.3。

D27-66

插层/空位引起的二维材料金属-绝缘体相变: CoCp2/SnSe2 和 ZrTe3-x刘洋¹、单欢³、袁秉凯²、郭宇桥¹、吴长征^{*1}

1. 中国科学技术大学

2. 中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

3. 中国科学院物理研究所

金属绝缘体相变是凝聚态物理的基本概念。通常, 金属—绝缘体相变涉及多个自由度的相互竞争, 比

如电荷、晶格、无序等。我们利用有机分子插层和引入空位的方法，在二维材料中观察到激子凝聚和安德森局域化导致的金属绝缘体相变的证据。我们合成了二茂钴分子($\text{Co}(\text{Cp})_2$)插层的 SnSe_2 二维插层材料。在 $\text{Co}(\text{Cp})_2\text{-SnSe}_2$ 中，我们观察到激子凝聚存在的证据：1. 在临界温度下， SnSe_2 表面出现了电荷密度波但没有伴随明显的周期性结构畸变；2. 能带的打开；3. 金属-绝缘体相变。通过在 ZrTe_3 中引入 Te 空位(d-ZrTe_3)，我们观察到安德森局域化导致的金属绝缘体转变的证据：1. 输运测量中，本征的 ZrTe_3 表现出金属性质， d-ZrTe_3 随温度降低有金属绝缘体相变；2. 低温 ARPES 测量表明 d-ZrTe_3 在费米面有电子态，没有打开 gap。3. STM 和 AFM 研究发现单个 Te 空位引起了附近原子的准一维晶格畸变。我们的研究表明有机分子插层和掺杂是调控无机二维材料晶体/能带结构、相转变以及电子性质的有效手段，多尺度多物理量联用的表征手段为进一步探究二维材料的丰富物性提供了重要的实验支撑。

D27-67

Reversible Diode with Tunable Band Alignment for Photoelectricity-Induced Artificial Synapse

Xue Shen, Chi Zhang, Jing Ning*

Xidian University

The advent of big data era has put forward higher requirements for electronic nanodevices that have low energy consumption for their application in analog computing with memory and logic circuit to address attendant energy efficiency issues. Here, a miniaturized diode with a reversible switching state based on N-n MoS_2 homojunction used a bandgap renormalization effect through the band alignment type regulated by both dielectric and polarization, controllably switched between type-I and type-II, which can be simulated as artificial synapse for sensing memory processing because of its rectification, nonvolatile characteristic and high optical responsiveness. The device demonstrates a rectification ratio of 103. When served as memory retention time, it can attain at least 7000 s. For the synapse simulation, it has an ultralow-level energy consumption because of the pA-level operation current with 5 pJ for long-term potentiation and 7.8 fJ for long-term depression. Furthermore, the paired pulse facilitation index reaches up to 230%, and it realizes the function of optical storage that can be applied to simulate visual cells.

D27-68

Polyimide passivation-enabled high-work function graphene transparent electrode for organic light-emitting diodes with enhanced reliability

Rui Liu, Yu Liu, Dingdong Zhang, Jinhong Du, Wencai Ren*

Institute of Metal Research Chinese Academy of Sciences

Chemical vapor deposition (CVD)-grown graphene has tremendous potential as a transparent electrode for the next generation of flexible optoelectronics such as organic light-emitting diodes (OLEDs). A semiconductor coating is critical to improve the work function but usually makes graphene rougher and more conductive, which increases leakage, and then significantly restricts device efficiency improvement and worsens reliability. Here an insulating polyimide bearing carbazole-substituted triphenylamine units and bis(trifluoromethyl)phenyl groups (CzTPA PI/2CF_3) with high thermal stability is synthesized to passivate graphene. The similar surface free energy allows the uniform coating of $\text{CzTPA PI/2CF}_3/\text{N-methylpyrrolidone}$ on graphene. Despite of a slight decrease in conductivity, CzTPA PI/2CF_3 passivation enables a substantial reduction in surface roughness and improvement in work function. By using such CzTPA PI/2CF_3 -passivated graphene as anode, a flexible green OLED is demonstrated with a maximum current, power, and external quantum efficiencies of 88.4 cd A^{-1} , 115.7 lm W^{-1} , and 24.8%, respectively, which are among the best of the reported results. Moreover, the CzTPA PI/2CF_3 passivation enhances the device reliability with extending half-life and reducing dispersion coefficient of efficiency. The study promotes the practical use of graphene transparent electrodes for flexible optoelectronics.

D27-69

Phase Instability in van der Waals In₂Se₃ Determined by Surface Coordination

Shanru Yan*

Kunming Institute of Physics

van der Waals In₂Se₃ has attracted significant attention for its room-temperature 2D ferroelectricity/antiferroelectricity down to monolayer thickness. However, instability and potential degradation pathway in 2D In₂Se₃ have not yet been adequately addressed. Using a combination of experimental and theoretical approaches, we here unravel the phase instability in both α - and β '-In₂Se₃ originating from the relatively unstable octahedral coordination. Together with the broken bonds at the edge steps, it leads to moisture-facilitated oxidation of In₂Se₃ in air to form amorphous In₂Se₃-3xO₃x layers and Se hemisphere particles. Both O₂ and H₂O are required for such surface oxidation, which can be further promoted by light illumination. In addition, the self-passivation effect from the In₂Se₃-3xO₃x layer can effectively limit such oxidation to only a few nanometer thickness. The achieved insight paves way for better understanding and optimizing 2D In₂Se₃ performance for device applications.

D27-70

Fe₃GaTe₂/InSe/Fe₃GaTe₂ 范德华异质结中的反对称磁阻反转研究张波¹、朱莲英¹、王博森¹、王智鹏¹、张颖²、向斌²、傅德颐^{*1}、张荣¹

1. 厦门大学物理科学与技术学院

2. 中国科学技术大学化学与材料科学学院

二维材料因为表面没有悬挂键，在电子学、自旋电子学和磁学等研究领域，特别是涉及到界面的研究方向，展现出极大的优势和潜力。反对称磁阻是器件的电阻在扫描磁场的过程中展现出反对称形状的现象，具体表现为具有一个峰平台和一个谷平台的蝶形交叉曲线[1]。其峰平台、基线和谷平台对应着高、中、低三种不同的电阻状态，分别可以表示数字逻辑运算中的“1”、“0”和“-1”，因此有望实现多态存储和磁逻辑运算[2]。在一些范德华体系中已经观察到了反对称磁阻现象，包括(Bi,Sb)₂Te₃ 拓扑磁性异质结[3]，Fe₃GeTe₂/MnPS₃ 磁性异质结[4]，具有平面对称性破缺的 Fe₃GeTe₂[5]和 Fe₃GaTe₂[6]纳米片，磁畴调制的 Fe₃GaTe₂ 纳米片[7]等。然而，这些反对称磁阻存在信号幅值较小、工作温度低于室温或信号幅度不稳定等不同问题，不利于实际应用。因此研制出室温工作、幅值稳定且具有大信号的反对称磁阻器件显得尤为重要。

在此，我们提出了一种基于二维室温铁磁体 Fe₃GaTe₂ 和二维高迁移率半导体 InSe 的室温反对称磁阻器件。构建的 Fe₃GaTe₂/InSe/Fe₃GaTe₂ 范德华异质结在所测量的整个温度范围内(4 K ~ 310 K)均具有反对称磁阻行为和相对较大且稳定的信号幅值。反对称磁阻曲线的峰平台(谷平台)出现和消失的位置与上下两层 Fe₃GaTe₂ 的矫顽场相对应。令人惊奇的是，在超过某一转变温度(T_t)后，反对称磁阻曲线发生了形状反转。原来蝶形曲线中的峰平台转变为谷平台，而谷平台转变为峰平台。我们进一步分析了形状反转的原因，发现这是由于两层厚度不同的 Fe₃GaTe₂ 的矫顽场随温度的变化行为不一致所致。通过分析两层 Fe₃GaTe₂ 的矫顽场随温度的变化曲线，可以看到两条曲线在 T_t 附近发生交叉。低于 T_t 时，薄层 Fe₃GaTe₂ 的矫顽场更大，高于 T_t 时，厚层 Fe₃GaTe₂ 的矫顽场更大，因此跨过 T_t 后，两层 Fe₃GaTe₂ 磁化翻转的顺序改变导致蝶形曲线的形状反转。通过分析计算，我们认为器件中出现的反对称磁阻曲线是 Fe₃GaTe₂/InSe/Fe₃GaTe₂ 垂直结区的涡型电流分布引起的，涡流的流向导致反对称磁阻平台中峰平台和谷平台的出现。我们随后研究了反对称磁阻信号的温度依赖性、电流依赖性和磁场角度依赖性，测量结果均表明我们的反对称磁阻具有稳健的信号幅值。我们推测使用其他具有良好导电能力的二维材料如 MoTe₂、WTe₂[8]等也可以出现类似反对称磁阻现象，其信号幅值随温度、电流、以及外加磁场的角度等影响因素需要进一步探索与研究。我们的这项工作进一步深化了对反对称磁阻的理解，可以启发基于反对称磁阻效应的新型自旋电子器件的开发和应用。

Reference

[1] H. T. Wu, et al. Frontiers in Physics 2022,10 - 2022.

[2] a)C. O. Avci, et al. Applied Physics Letters 2017, 110; b)H. Wen, et al. Physical Review Applied 2016,

5, 044003.

[3] Q. L. He, et al. *Physical Review Letters* 2018, 121, 096802.

[4] G. Hu, et al. *ACS Nano* 2020, 14, 12037.

[5] a)P. Liu, et al. *Nano Research* 2022, 15, 2531; b)W. Niu, et al. *Physical Review B* 2021, 104, 125429.

[6] G. Hu, et al. *Gao, Advanced Materials* 2024, 36, 2403154.

[7] X. Gao, et al. *Liu, Advanced Materials* 2025, n/a, 2420505.

[8] a)Q. Wang, et al. *Advanced Science* 2018, 5, 1700912; b)R. Zhou, et al. *Chinese Journal of Chemistry* 2022, 40, 989.

D27-71

基于范德华隧穿接触的高效自旋注入

黄世明¹、侯福臣²、曲庭玉³、高立波⁴、林君浩²、张峰¹、傅德颐*¹

1. 厦门大学

2. 南方科技大学

3. 新加坡国立大学

4. 南京大学

石墨烯具有极弱的自旋轨道耦合、可忽略的超精细核相互作用以及超高的迁移率，因此成为理想的自旋输运沟道材料。在石墨烯上直接沉积铁磁金属会形成透明接触[1]，导致极低的自旋注入效率。为了最大限度地发挥石墨烯在自旋器件应用中的潜力，各种绝缘介电材料（金属氧化物和范德华结构六方氮化硼 hBN）被引入铁磁电极和石墨烯之间，形成隧穿接触以解决电导失配问题从而提高自旋注入效率。然而，在无悬挂键的石墨烯表面生长金属氧化物隧穿层容易形成大量针孔结构[2]，导致漏电使得自旋注入效率难以有效提升。二维范德华绝缘体 hBN 被认为是最理想的无针孔隧穿层候选材料[3]，然而采用超薄 hBN 需要精确控制其层厚，并且转移过程中不可避免引入的污染和气泡/褶皱使得自旋注入效率在不同器件中差异较大[4-6]，从而可重复性较差，同时难以与大规模应用兼容。一种简单、可靠的自旋注入方式是基于范德华间隙的隧穿接触技术，即通过在铁磁电极和石墨烯之间自然形成的范德华间隙充当隧穿势垒。最近使用转移方法在石墨烯上堆叠二维铁磁体以形成范德华接触的研究已经成功实现了室温下的自旋注入[7]，但其效率仍然很低并且可扩展性尚未得到解决。

在此，我们提出了一种简单高效、易扩展的策略形成范德华隧穿接触，以实现石墨烯中的室温高效自旋注入。通过在铁磁电极(Co)和石墨烯之间插入一层铟(In)缓冲层，就可以形成具有无损界面和隧穿行为的范德华接触。基于该接触方法制作了横向非局域自旋阀器件，在室温下观察到清晰的自旋阀信号和 Hanle 自旋进动信号，明确地证明了自旋的有效注入。通过优化 In 缓冲层的厚度，获得了高达 25%的室温自旋注入效率和 35%的低温自旋注入效率，这与基于氧化物隧穿层器件中报道的最高值相当，但是方法却更加简单。随后，我们在超长石墨烯样品上制备了多沟道的横向自旋阀器件，器件成品率和性能均匀性极佳，进一步支持了该方法的可扩展性。最后，我们制作了基于二维半导体 MoS₂ 的非局域横向自旋阀，其平均自旋注入效率高达 19.7%，从而证明了基于范德华隧穿接触的高效自旋注入策略很容易应用到其他二维材料。我们的策略仅需在工业兼容的电子束或热蒸发镀膜机中进行两次连续的金属沉积即可实现，易于大规模集成，不需要依赖高真空分子束外延或复杂的二维材料转移工艺，为未来实现大规模高效自旋电子器件应用铺平了道路。

References

[1] *Appl. Phys. Lett.* 94, 222109 (2009).

[2] *Nature* 448, 571-574 (2007).

[3] *Nano Lett.* 12, 1707-1710 (2012).

[4] *Sci. Rep.* 6, 21168 (2016).

[5] *Appl. Phys. Lett.* 105, 212405 (2014).

[6] *Appl. Phys. Lett.* 109, 122411 (2016).

[7] *Adv. Mater.* 35,2209113 (2023).

D27-72

杂化磁邻近效应诱导的石墨烯巨磁阻研究

朱莲英¹、黄世明¹、赵永鑫¹、梅嘉伟²、黄火林³、张峰¹、王茂原¹、傅德颐^{*1}、张荣¹

1. 厦门大学物理科学与技术学院

2. 南方科技大学物理系

3. 大连理工大学光电工程与仪器科学学院

磁阻是材料电阻随磁场而变化的一种物理现象，由于其在基础科学和实际应用中的重要性，几十年来一直备受关注。研究人员的目标是开发能在宽温度范围内工作的低能耗、高灵敏度磁阻传感器。为了实现这一目标，多种新型材料的磁阻现象被广泛研究，包括狄拉克和外尔半金属 [1-3]、奇异金属 [4]等。这些材料最显著的特点是在低温下可观察到不饱和的巨大线性磁阻。然而，这些材料的磁阻通常随着温度的升高而急剧减小，这大大限制了它们的实际应用。石墨烯具有超高迁移率、线性狄拉克锥能带结构和出色的空气稳定性，因此是一种非常有潜力的候选材料。单层石墨烯的室温磁阻比较小(< 300%)，还有很大的改进空间。于是人们提出了多种增强方法，例如通过纳米粒子修饰石墨烯表面[5]，或将其置于具有褶皱结构的衬底上[6]等。这些方法进一步增加了石墨烯体系中的电荷不均匀性，虽然取得了一定的效果，但是磁阻增强效果仍然有限。更重要的是，低温下量子效应会显著影响石墨烯的磁场响应特性，导致器件磁阻大幅下降并出现负磁阻，难以在低温环境中稳定工作，因此是一个亟待解决的关键难题。

在此，我们提出了一种增强石墨烯磁阻的新方法，即在单层石墨烯上堆叠范德华铁磁体 Fe₃GeTe₂ (FGT)，形成 FGT/Gr 异质结构。在室温 9 T 磁场下，FGT/Gr 异质结构的磁阻值可达约 9400%，比纯石墨烯的磁阻值提高了三十多倍，创下了单层石墨烯及其异质结或改性体系中室温磁阻的新记录。更重要的是，这种巨大的磁阻在所研究的温度范围内（4K ~ 300K）几乎保持不变，甚至随着温度的降低还略有增强。理论计算表明，当 FGT 与石墨烯形成异质结时，通过磁邻近效应打破了石墨烯的自旋简并，并且产生了自旋依赖的轨道耦合，导致石墨烯的一个自旋子带在费米面附近打开了一个有限的能隙，使得对应的自旋态密度上升而迁移率因受到杂化散射大幅下降。因此，低迁移率的自旋多数载流子的电导率很低，而高迁移率的自旋少数载流子在输运中占主导地位。当外加磁场时，自旋少数载流子的密度迅速降低，导致电阻急剧升高，从而产生巨大的磁阻，且这种效应与温度无关，从而很好地解释了实验中观测到的巨磁阻效应及其温度弱依赖特性。

References

- [1] Sungjae Cho et al. Charge transport and inhomogeneity near the minimum conductivity point in graphene. *Phys. Rev. B* 77, 081402, (2008).
- [2] Liang, T. et al. Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal Cd₃As₂. *Nat. Mater.* 14, 280–284 (2015).
- [3] Shekhar, C. et al. Extremely large magnetoresistance and ultrahigh mobility in the topological Weyl semi-metal candidate NbP. *Nat. Phys.* 11, 645–649 (2015).
- [4] Giraldo-Gallo, P. et al. Scale-invariant magnetoresistance in a cuprate superconductor. *Science* 361, 479–481 (2018).
- [5] Jia, Z. Z. et al. Large tunable linear magnetoresistance in gold nanoparticle decorated graphene. *Appl. Phys. Lett.* 105, 143103 (2014).
- [6] Hu, J. X. et al. Room-temperature colossal magnetoresistance in terraced single-layer graphene. *Adv. Mater.* 32, 2002201 (2020).

墙报

D27-P01

晶种自驱动成核策略生长大面积掺杂 WS₂ 薄膜

王相懿、王俊勇*、张凯

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

在二维 (2D) 过渡金属二硫化物 (TMD) 中替位掺杂是调节其电子和光电子性能的重要方法。然而, 材料边缘的高活性位点促进了掺杂原子在这些位置的优先吸附或沉淀, 难以实现大面积二维材料的替位掺杂。在涉及原子半径差异较大的替位掺杂过程中, 这个问题尤其严重, 例如在单层半导体中掺杂稀土元素。这里, 我们提出了一种晶种自驱动成核策略, 通过利用台阶蓝宝石衬底的高表面能特性, 为各种掺杂剂金属源提供预吸附位点, 促进了掺杂金属源自发吸附和锚定, 减轻了掺杂生长过程中掺杂源的边缘富集效应。这种方法有助于制造厘米级 Yb-WS₂ 薄膜和各种掺杂金属 WS₂ 薄膜。通过束缚激子发射和电子态密度的表征, 进一步证明了单层 Yb-WS₂ 薄膜中导带附近中隙态的引入。这项工作拓宽了元素替位掺杂二维材料的可控合成的化学途径, 并扩大了开发新型二维光电子器件的潜力。

D27-P02

Controllable synthesis of transferrable ultrathin Bi₂Ge(Si)O₅ dielectric alloys with composition-tunable high- κ properties

Jiabiao Chen, Jinxiong Wu*

Nankai University

Two-dimensional (2D) alloys hold great promise to serve as important components of 2D transistors since their properties allow continuous regulation by varying their compositions. However, previous studies are mainly limited to the metallic/semiconducting ones as contact /channel materials, but very few are related to the insulating dielectrics. Here, we use a facile one-step chemical vapor deposition (CVD) method to synthesize the ultrathin Bi₂Si_xGe_{1-x}O₅ dielectric alloys, whose composition is tunable over the full range of x just by changing the relative ratios of the GeO₂/SiO₂ precursors. Moreover, their dielectric properties are highly composition-tunable, showing a record high dielectric constant of >40 among CVD-grown 2D insulators. The vertically grown nature of Bi₂GeO₅ and Bi₂Si_xGe_{1-x}O₅ enables the polymer-free transfer and subsequent clean van der Waals integration as the high- κ encapsulation layer to enhance the mobility of 2D semiconductors. Besides, the MoS₂ transistors using Bi₂Si_xGe_{1-x}O₅ alloy as gate dielectrics exhibit a large I_{on}/I_{off} ($>10^8$), ideal subthreshold swing (SS) of ~ 61 mV/decade, and a small gate hysteresis (~ 5 mV). Our work not only gives the very few examples on controlled CVD growth of insulating dielectric alloys, but also expands the family of 2D single-crystalline high- κ dielectrics.

D27-P03

拓扑绝缘体 β -Ag₂Te 的巨大室温各向异性磁阻艾威¹、陈复洋²、刘召超¹、苑西西³、张磊¹、何育戍¹、董欣月¹、付会霞³、罗锋¹、邓明勋²、王瑞强²、吴金雄*¹

1. 南开大学

2. 华南师范大学

3. 重庆大学

对于采用低电源电压和高灵敏度的各向异性磁阻角度传感器而言, 在室温下实现高各向异性磁阻比是非常重要的。但目前室温下的非异质结型薄膜的各向异性磁阻通常都小于 5%。在此, 我们通过化学气相沉积法合成了高质量拓扑绝缘体 β -Ag₂Te 单晶纳米片, 其在 9 T 磁场及室温下具有高达 -39% 的各向异性磁阻和 520 $\mu\Omega\cdot\text{cm}$ 的巨平面霍尔效应。我们认为由狄拉克锥倾斜引起的各向异性散射是拓扑材料中各向异性磁阻的起源, 且各向异性磁阻值的大小受有效质量和声速等内在特性调制。此外, 我们还利用合成的

β -Ag₂Te 单晶纳米片构筑了惠斯通电桥结构的小型角度传感器。这些传感器表现出高输出响应（240 mV/V）、高角度灵敏度（4.2 mV/V/°）和小角度误差（<1°）。我们的工作进一步推动了拓扑绝缘体在高场磁传感器和角度传感器等方面的应用进展。

D27-P04

热蒸镀制备晶圆级 BiO_x 用于提高 MoS₂ 晶体管热稳定性的接触电极

刘召超、陈家彪、艾威、陈舒仪、何育彧、吕尊贤、杨明健、李文彬、罗锋、吴金雄*

南开大学

铋是二硫化钼（MoS₂）晶体管中最广泛使用的接触电极材料之一，因为它能够最大程度地减少费米能级钉扎效应，并形成超低接触电阻。然而，铋的低熔点无疑使其无法适应高温制造工艺和应用场景。在此，我们介绍了一种通过热蒸发 α -Bi₂O₃（一种众所周知的绝缘氧化物）的方法，可以形成一种高度金属化的氧缺陷 BiO_x相，展现出高霍尔迁移率（约 60 cm² V⁻¹ s⁻¹）和超高载流子密度（1.5 × 10¹⁵ cm⁻²）。详细的微观结构分析表明，制备的晶圆级 BiO_x薄膜具有一种独特的结构，即多晶态铋分散在非晶态 BiO_x基质中，即使在高于铋熔点的温度下加热，其表面仍能保持超平整。此外，蒸发的 BiO_x薄膜被用作二硫化钼晶体管的接触电极，展现出高导通态电流和超小接触电阻（650 Ω·μm）。更重要的是，由于其卓越的热稳定性，经过 300 °C、6h 的退火处理后，BiO_x-MoS₂ 晶体管仅表现出极小的电学性能衰减，而采用铋接触的晶体管则完全失效。我们的研究表明，热蒸发的 BiO_x薄膜是二硫化钼晶体管的一种有前景的替代接触材料。

D27-P05

稀土基 GdGe₂N₄ 单层中的电和热驱动磁阻

刘斌*¹、关启麟¹、张晓琳²、王中一¹、朱思聪³、虞祥龙¹、邵元智¹

1. 中山大学

2. 武汉大学

3. 武汉科技大学

Tombarthite half-metallic materials possess intrinsically large localized magnetic moments and strong spin-orbit coupling, distinguishing them fundamentally from conventional Two-Dimensional (2D) materials dominated by d-orbital magnetism. In this work, we systematically investigate the structural, electronic, magnetic, and transport properties of the tombarthite two-dimensional ferromagnet GdGe₂N₄ (GGN) by employing first-principles calculations in combination with the non-equilibrium Green's function formalism. The results reveal that monolayer GGN is dynamically stable, featuring robust out-of-plane magnetic anisotropy and a Curie temperature of 215 K, and making it a compelling candidate for cryogenic spintronic applications. GGN exhibits half-metallic half-metallic behavior, in which spin-down electrons dominate the conduction channel, leading to highly efficient spin filtering. To exploit this property, we designed a tunnel magnetoresistive device using MoSi₂N₄ as a tunnel barrier and demonstrated pronounced magnetoresistance under both electrical bias and thermal gradient. Remarkably, the device achieves an ideal magnetoresistance response and a spin-filtering efficiency reaching 100%. These findings position GGN as a promising rare-earth-based 2D material platform for the development of electrically and thermally driven spintronic devices.

D27-P06

低压下 SiC 外延石墨烯的各向异性生长研究

陈家栋、孙存志、林鼎渠、陈厦平、张宇宁、张峰、傅德颐*、张荣

厦门大学物理科学与技术学院

得益于优异的物理性质，石墨烯在微电子领域具有无与伦比的发展前景，历经二十年研究依旧炙手可热。为了实现石墨烯器件产业化应用，大面积高质量均匀的石墨烯制备方法则成为兑现发展前景的关键。目前石墨烯制备方法包括机械剥离法、化学气相沉积法、氧化还原法和碳化硅(SiC)热分解法等。然而大多数方法或是制备面积太小或是工艺复杂影响石墨烯质量，SiC 热分解法可在半绝缘衬底上直接外延生长晶

圆级单晶石墨烯,被认为是产业化应用的可行性方法之一。SiC 外延石墨烯是通过缓冲层与衬底解耦所形成,其中与缓冲层键连的硅原子升华速率决定了石墨烯的生长速率,是调控石墨烯生长的关键因素。由于 SiC 中硅原子在不同晶向键能不同,外延石墨烯生长具有各向异性,通常沿[11-20]方向进行生长,并且在准平衡状态下会形成纳米带表面形貌[1-3]。然而由于高温下 SiC 会发生台阶聚集现象,表面剧烈的原子运动和不稳定的台阶过渡态严重影响石墨烯生长[4]。因此,实现 SiC 外延石墨烯的稳定可控生长亟待研究。

在此,我们提出了一种低压外延生长法,即在低压下降低石墨烯生长温度,在约 1 μm 宽的稳定 SiC 台阶上实现石墨烯的可控生长。在 200 Pa 的生长压强和 1300 ~1350 $^{\circ}\text{C}$ 的生长温度条件下,随着加热时间增长可观察到缓冲层以纳米带的形式向石墨烯转变的不同生长阶段,并对其表面形貌和晶格应变进行表征。通过对石墨烯纳米带特征尺寸的统计分析,发现同一台阶的纳米带具有均匀的生长速率,且相邻纳米带间距与其生长位点间距具有明显的线性关系。这是因为在近饱和硅蒸气压下,硅原子会重新凝华吸附在缓冲层表面并替代缓冲层下的 SiC 硅原子重新升华,仅当硅原子升华速率高于凝华速率时石墨烯才会生长,并在两者相等时形成纳米带边界。而当纳米带横跨整个台阶时,不再有新的硅原子从缓冲层下升华,表面凝华硅原子不断被消耗,纳米带边界处开始向外生长并逐渐合并形成单层石墨烯。外延石墨烯的各向异性生长过程通过不同生长时间纳米带特征尺寸的变化可进行直观的量化表征。低压外延生长法可在四英寸半绝缘 SiC 衬底上直接制备单层石墨烯,其室温霍尔迁移率为 $1535\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ (对应电子掺杂浓度为 $1.08 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$),可应用于大面积高质量均匀石墨烯制备。此外,通过调控生长气压可改变硅的近饱和蒸气压,从而可对石墨烯纳米带生长进行调控,为大面积纳米带制备提供基础。

References

- [1] M.L. Bolen, S.E. Harrison, L.B. Biedermann, M.A. Capano, Graphene formation mechanisms on 4H-SiC(0001), *Phys. Rev. B*, 80, 11 (2009).
- [2] V. Borovikov, A. Zangwill, Step-edge instability during epitaxial growth of graphene from SiC(0001), *Phys. Rev. B*, 80, 12 (2009).
- [3] T. Ohta, N.C. Bartelt, S. Nie, K. Thürmer, G.L. Kellogg, Role of carbon surface diffusion on the growth of epitaxial graphene on SiC, *Phys. Rev. B*, 81, 12 (2010).
- [4] J.F. Bao, O. Yasui, W. Norimatsu, K. Matsuda, M. Kusunoki, Sequential control of step-bunching during graphene growth on SiC (0001), *Appl. Phys. Lett.*, 109, 8 (2016).

D27-P07

氧等离子体诱导改善碲场效应晶体管的接触电阻和迁移率

王博森、胡晋威、李星云、宇文明、张波、朱莲英、徐俊、傅德颐*、张荣

厦门大学物理科学与技术学院

二维范德华半导体碲(Te)作为后摩尔时代的潜力材料,兼具高载流子迁移率(相较于过渡金属硫族化合物)和空气稳定(相较于黑磷)的优点[1],在下一代电子器件中展现出显著的应用潜力。然而,其器件性能目前仍受限于金-半接触界面:传统钯(Pd)电极与碲之间形成的肖特基接触存在高达 $\sim 1.3\text{ k}\Omega\cdot\mu\text{m}$ 的接触电阻[2],远超国际半导体技术路线图(ITRS)对未来纳米晶体管接触电阻应低于 $0.2\text{ k}\Omega\cdot\mu\text{m}$ 的要求[3]。尽管通过金属选择或界面工程可调控接触质量,但现有方法普遍面临工艺复杂、兼容性差等问题,制约了碲基电子器件的实际应用[4]。此外,未优化的接触界面会引入显著的载流子散射[5],阻碍了高性能碲场效应晶体管(FET)的发展。

我们提出了一种简单高效的接触工程策略:在电极蒸镀之前通过氧等离子体局部处理电极接触区域的Te表面形成超薄氧化层(TeO_x),该氧化层通过电荷转移对Te进行简并掺杂,在平带条件下得到了负的肖特基势垒,从而实现了理想的欧姆接触。经典传输线法(TLM)测量表明,处理后的接触电阻低至 $0.16\text{ k}\Omega\cdot\mu\text{m}$,较未处理的对比器件降低了一个数量级以上,创下了Te基器件的最低接触电阻记录[6]。同时,基于该处理方法制备的Te场效应晶体管的室温迁移率提升至 $\sim 1015\text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$,低温(3 K)下更高达 $\sim 3002\text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$,显著优于未处理的对比器件。X射线光电子能谱(XPS)和拉曼(Raman)光谱表征表明,氧等离子体处理诱导的 TeO_x 层厚度仅为纳米级,其简并掺杂效应不依赖外加电场,确保了接触界面的稳定性。我们的方法具有CMOS兼容性且工艺简单,无需复杂的转移或外延过程,适合大规模集成制造。与插入 WS_2

半金属层等复杂策略相比[5]，氧等离子体处理的可扩展性为碲基电子器件的大规模应用提供了新路径。

References

- [1] Li, L., Yu, Y., et al. Black phosphorus field-effect transistors. *Nat. Nanotech.* 9, 372–377 (2014).
- [2] Qiao, J.; Pan, Y.; Yang, F.; et al. Few-Layer Tellurium: One-Dimensional-like Layered Elementary Semiconductor with Striking Physical Properties. *Sci. Bull.* 63, 159–168 (2018).
- [3] International Technology Roadmap for Semiconductors Organization. The Official Website of the International Technology Roadmap for Semiconductors [EB/OL]. USA: Semiconductor Industry Association Press, 1999 (2015-12-31) [2025-05-20]. Available from: <https://irds.ieee.org/>
- [4] Kang, D.-H., Pae, S.R., et al. An Ultrahigh-Performance Photodetector based on a Perovskite–Transition-Metal-Dichalcogenide Hybrid Structure. *Adv. Mater.* 28, 7799–7806 (2016).
- [5] X. Zhang, H. Yu, W. Tang, et al. All-van-der-Waals Barrier-Free Contacts for High-Mobility Transistors. *Adv. Mater.* 34, 2109521 (2022).
- [6] J. O. Island, G. A. Steele, H. S. J. van der Zant, and A. Castellanos-Gomez. Environmental instability of few-layer black phosphorus. *2D Mater.* 2, 011002 (2015).

D27-P08

等电子掺杂过渡金属二硫族化物及其异质结构的金属-绝缘体转变

王羽¹、侯玉堂¹、尹蕾¹、文耀¹、程瑞清^{*1}、何军^{1,2}

1. 武汉大学物理与技术学院，人工微纳结构教育部重点实验室

2. 武汉量子技术研究所

本文报道了一种通过等电子掺杂在二维过渡金属硫族化合物中诱导金属-绝缘体转变（MIT）的策略，并探究了其在异质结构系统中的普适性。研究以硫（S）原子部分替换为硒（Se）的 $\text{MoS}_2(1-x)\text{Se}_2x$ 为对象，通过机械剥离制备少层材料，结合拉曼光谱、原子分辨高角度环形暗场扫描透射电镜（HAADF-STEM）和能谱分析（EDS）验证了等电子掺杂的原子级结构与组分分布。利用单背栅场效应晶体管（FET）进行电学测量，发现 $\text{MoS}_2(1-x)\text{Se}_2x$ 的导电性随温度与栅极电压变化呈现显著 MIT 特征：低温高栅压下材料表现为金属态，而高温低栅压下转为绝缘态。进一步通过异质结构工程，将 $\text{MoS}_2(1-x)\text{Se}_2x$ 与 MoTe_2 结合，成功在原本无 MIT 特性的 MoTe_2 中复现了金属-绝缘体转变行为。实验表明，异质结构界面处的能带弯曲显著提升了载流子浓度 ($>1.58 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$)，同时将肖特基势垒从 224.7 meV 降至 130.3 meV，并增强了载流子迁移率。理论分析指出，强电子相互作用与界面二维电子气的形成是 MIT 现象的关键机制。该研究为二维材料电子特性的调控提供了新思路，通过异质结构设计拓展了 MIT 在多功能电子器件中的应用潜力。

D27-P09

用于多功能纳米电子学的可重构范德瓦尔斯铁电势垒器件

丁家辉*

武汉大学物理科学与技术学院

近年来，二维（2D）材料因其独特性质和在各领域的巨大潜力而备受关注。特别是兼具铁电性和离子导电性的二维铁离子材料，为范德华纳米电子学带来了新可能。在此，通过理论计算和电学表征支持，我们报道了一种可重构范德华铁离子势垒器件，其可用于包括电阻器件和陡斜率晶体管在内的多功能电子器件。通过移动离子的电驱动迁移和重新分布，实现了器件性能的大幅调制。该存储器件展现出前所未有的长期稳定性，开关比约为 $\sim 10^6$ 。利用这种铁离子特性，设计了能够突破玻尔兹曼限制、具有不同栅极配置的二维晶体管。亚阈值摆幅（SS）在漏极电流五个数量级范围内呈现每 decade 低于 60 mV 的值，最小值为每 decade 12.1 mV。这项作为研究范德华铁离子材料中铁电性与离子活动的共生关系铺平了道路，并凸显了其在先进纳米电子学中的应用前景。

D27-P10**Sacrifice-layer-free transfer of wafer-scale atomic-layer-deposited dielectrics and full-device stacks for two-dimensional electronics**

Yuyu He¹, Zunxian Lv¹, Zhaochao Liu¹, Mingjian Yang¹, Wei Ai¹, Jiabiao Chen¹, Wanying Chen¹, Bing Wang¹, Xuwen Fu², Feng Luo¹, Jinxiong Wu^{*1}

1. School of Materials Science and Engineering, Nankai University

2. School of Physics, Nankai University

Transfer printing techniques have enabled the fabrication of devices on soft or delicate substrates that are incompatible with conventional manufacturing processes. However, the involved sacrifice-layer removal process typically causes damage to the quality of device interfaces. Here, we develop a sacrifice-layer-free transfer printing strategy by pre-depositing the device constituents onto commercially available mica substrates. The intrinsic weak interfacial interaction enables the transfer of various pre-deposited device constituents at the wafer scale, including well-known strongly adhesive dielectrics grown by atomic layer deposition (ALD). Moreover, entire top-gated device stacks can be simultaneously transferred onto few-layer MoS₂ to form fully gated two-dimensional (2D) transistors, showing an atomically sharp interface, negligible gate hysteresis (~5 mV) and subthreshold swings near the thermionic limit. Importantly, the conformal growth of ALD dielectrics enables the one-step fabrication of complex top-gated Hall devices with a fully encapsulated structure, allowing multi-terminal gate-tunable transport measurements on fragile 2D materials, such as black phosphorus. Our work not only enriches the transfer printing methodologies for difficult-to-transfer materials, but also provides a method to investigate the properties of fragile 2D materials.

D27-P11**Catalytic mechanism towards CVD-grown wafer-size graphene on 4H-SiC (0001) and (000-1) using dimer carbon sources**

Zhiyu Jing, Xioanli Sun, Zhongfan Liu*

北京石墨烯研究院

In order to understand the process of direct graphene growth on the silicon carbide surface, this study employed density functional theory to analyze its growth mechanism and verifies it experimentally, and draws the following conclusions: (1) Acetylene and ethylene exhibit strong adsorption on both SiC (0001) and (000-1) surfaces, with adsorption energies ranging from -5 eV to -2 eV. These energies enable effective adsorption and subsequent dissociation of acetylene and ethylene on the SiC surface, catalyzing the formation of active carbon species. Based on the cleavage energy barriers and the population of different carbon-active species of acetylene and ethylene, it is tentatively confirmed that CHCH is the most probable main active species in the two subsequent steps (nucleation and edge growth). (2) At low chemical potentials, CHCH exhibits a stronger nucleation tendency on the (000-1) surface. In contrast, at higher chemical potentials, nucleation is more favorable on the (0001) surface. (3) The experimental results show that acetylene provides a more efficient carbon source and significantly accelerates the graphene growth; graphene has fewer defects in the conformal growth on the Si surface and more defects on the C surface.

D27-P12**单轴磁各向异性铁硅合金中自发 Skyrmion 气泡**

冯小强、程瑞清*、何军*

武汉大学物理科学与技术学院

磁 skyrmions 表现出有趣的拓扑行为，在自旋电子器件领域具有未来的应用前景。尽管最近取得了进展，但在具有单轴磁各向异性的磁体中实现自发磁 skyrmions 和拓扑转变，特别是在高温下 (>100 K)，仍然是一项具有挑战性的奋进。本文中，我们采用了化学气相沉积法，在云母衬底上成功合成了具有中心

对称性和单轴磁各向异性的单晶 Fe₅Si₃ 纳米棒，其表现出约 372 K 的高居里温度（TC）。由洛伦兹透射电子显微镜促进的实时观察揭示了聚焦离子束制备的 Fe₅Si₃ 薄箔中磁 skyrmion 的自发形成和畴的演化。此外，Fe₅Si₃ 器件输运测量揭示了显著的磁电阻（MR）效应，使得在特定温度设置下正负 MR 之间能够互换，这些结果为探索各种拓扑自旋织构及其形成机制提供了各种潜在途径，表明铁硅合金在自旋电子学领域的创造性应用。

D27-P13

少层黑磷中激子主导的近红外波段动态可调发光二极管

梁雅宁、姚允、王俊勇、张凯*

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

具有直接带隙的二维（2D）半导体为构建超薄且紧凑集成的发光二极管（LED）提供了新的机遇。目前基于二维半导体的 LED 大多工作在可见光波段，而非近红外通讯波段，不利于在光学计算和通信等成熟领域中的应用。本研究报告了利用黑磷（BP）的直接带隙特性，在近红外区域制备基于双层和三层黑磷的 LED，发光能量分别在 1.12eV 与 0.83eV 附近。通过合理控制电场和载流子注入条件，证明了基于三层黑磷的 LED 能够在 1500 nm 附近动态调控主要激子类型和发射波长。我们的研究成果有助于构筑近红外波段的微型光源器件。

D27-P14

Machine learning-based carbon source screening for graphene growth in CVD systems

Weizhi Wang¹, debo hao¹, xiucan sun^{*1}, zhongfan liu^{1,2}

1. Beijing Graphene Institute

2. Peking University

The judicious selection of carbon sources plays a pivotal role in accelerating graphene synthesis across diverse chemical vapor deposition (CVD) scenarios, including static, roll to roll, and fluidized-bed systems, have distinct carbon source requirements. For example, in fluidized bed systems, traditional carbon sources fail to meet the needs due to their slow decomposition rate, leading to poor graphene quality and low production efficiency. To address this, this study proposes an efficient carbon source screening method based on machine learning. First-principles calculations were used to automatically compute the energies and electronic information of 5000 carbon sources and their relevant intermediate states, which provided the reaction directions and thermodynamic criteria for the decomposition polymerization reactions. The Monte Carlo method was then applied to simulate the reaction process of carbon source molecules, predicting the distribution and chemical potential of different intermediate species. A graph neural network model was trained using the obtained data to predict the intermediate state distribution and chemical potential after carbon source molecule decomposition. This model was used to identify carbon sources that best match the specific CVD system. The proposed method provides strong theoretical support for experimental work and significantly improves the efficiency and accuracy of carbon source screening.

D27-P15

层状 TiS₃ 纳米带的可调谐近红外光发射

张君蓉、徐骏生、王俊勇、张凯*

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

本研究报道了一种基于空气稳定层状三硫化钛（TiS₃）纳米带的可调谐近红外光致发光（PL）特性。通过化学气相输运法并以硫粉作为输运剂成功合成高质量 TiS₃ 晶体，有效减少了材料中的硫空位缺陷，使其 PL 强度相比以碘为输运剂的样品提升约一个数量级。实验表明，TiS₃ 的 PL 发射波长可通过材料厚度实

现调控,覆盖近红外通信波段。此外, TiS_3 展现出明显的各向异性应变响应:沿 b 轴施加单轴拉伸应变时, PL 峰位发生蓝移,而沿 a 轴施加应变时,发射波长变化不显著。上述结果揭示了 TiS_3 在近红外波段出色的可调发光性能和应变响应特性,表明其作为片上近红外光源在光子集成器件中的潜在应用价值。

D27-P16

高品质大尺寸石墨烯薄膜的批量化制备技术

杨雨佳、原菡恒、刘忠范*

北京石墨烯研究院

当前,化学气相沉积法制备石墨烯薄膜材料已从实验室走向中试,但这些石墨烯薄膜普遍存在缺陷密度高、附加层小核较多、品质不均一、工艺稳定性差等问题,为石墨烯薄膜走入高精尖领域应用带来了极大的挑战。开发具有高单层率、低缺陷密度、品质均一的大尺寸石墨烯薄膜材料的批量制备工艺具有重要意义,也是当前亟待突破的技术难题。本研究围绕高品质石墨烯薄膜材料的批量制备开展研究,力图突破中试级石墨烯薄膜生产过程中单层率低、缺陷密度高、均一性差、工艺不稳定等瓶颈问题,实现高品质大尺寸石墨烯薄膜的批量化制备。

D27-P17

高 k 栅介质外延集成型二维鳍式晶体管的创制

谭聪伟*

北京大学

垂直鳍(Fin)作为器件沟道结构主导了现代晶体管微缩,并且是最先进的商用 3 nm 制程集成电路的主流沟道结构。亚 3nm 先进节点以后,垂直 Fin 沟道架构仍被考虑用于开发制造垂直 Fin 环栅器件(VGAA)或垂直传输场效应晶体管(VTFET),以适应“摩尔定律发”展要求;世界著名集成电路制造龙头公司 IBM 和三星已进行相关研发。然而,二维半导体作为芯片候选“后硅”沟道材料之一,面临新型高迁移率二维半导体鳍片和高 κ 氧化物异质结的精准制备及新架构三维异质集成等关键科学问题。

对此,基于自主研发的新型二维铋基材料体系,我们首先实现了自支撑高迁移率二维半导体 $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ 鳍片的垂直外延;进而采用可控插层氧化方法,实现了晶圆级二维 $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ 鳍片/高 κ 自氧化物 Bi_2SeO_5 的异质集成。值得强调的是,二维 $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ 可被逐层可控插层氧化减薄至 1 个单胞厚度(1.2 纳米),并与高 κ 自氧化物 Bi_2SeO_5 形成原子级平整、晶格匹配的高质量半导体/介电层界面。在此基础上,首次实现了沟道厚度约 6 nm 的高性能二维垂直鳍式晶体管(2D FinFET)的研制(图 1)。二维 FinFET 在迁移率($270 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)、关态电流($1 \text{ pA } \mu\text{m}^{-1}$)和开关比(108)等性能满足业界高性能低功耗器件要求的同时,相对于商用 Si、Ge 及过渡金属硫化物等沟道材料,在开态电流密度方面展现出二维 FinFET 电子学的优势。二维半导体鳍片/高 κ 栅氧化物的三维异质集成及二维鳍式场效应晶体管(2D FinFET)的研制,为开发突破硅基晶体管极限的未来芯片技术带来新机遇。

D27-P18

集传感和记忆计算于一体的人工视觉系统的全 vdW $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3/\text{MoS}_2$ 异质结构外延生长

张峥*

山西师范大学

范德瓦尔斯(vdW)铁电-半导体异质结在光/电辅助极化切换的基础上提供了可调的能带对准,显示出构建视觉神经系统的巨大潜力。然而,用于概念验证和基础研究的机械剥离制造方案非常繁琐,无法扩展到实际应用中。在此,我们提出了通过动态调节生长温度来实现平面/垂直 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3/\text{MoS}_2$ 异质结的大规模、高结晶度生长策略。此外,在 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3/\text{MoS}_2$ 异质结构的基础上,设计和制造了光电器件,以模拟视觉神经系统的多种功能,包括多态存储、光逻辑运算、突触增强与抑制、成对脉冲易化(PPF)、短时记忆(STM)、长时记忆(LTM)和学习-遗忘-再学习。这项工作提供了一种动态调整铁电半导体异质结堆栈方向的策略,并将为应用“一体化感知”和“存算一体”技术的人造视觉提供帮助。

D27-P19**Monolayer Short-Channel Transistors Defined by Nonmetallic van der Waals Contact**

Xinjie Hou*

Wuhan University

Two-dimensional (2D) semiconductors have excellent immunity to short-channel effects and are therefore promising for ultra-scaled field-effect transistors. However, ultra-scaled transistors necessitate simultaneous minimization of the channel length and contact resistance, which is a significant challenge for atomically thin 2D semiconductors. In this work, a facile angle evaporation technique is developed to fabricate ultrashort channel monolayer 2D transistors with nonmetallic van der Waals (vdW) contacts. By precisely controlling the evaporation angle and the thickness of the physical vapor deposition-grown nonmetallic PbTe, which owns ultra-sharp edges due to its perfect and stable periodic crystal structure, the channel length of 2D transistors can be controlled reproducibly. Moreover, due to the nonmetallic contact properties of PbTe, there are negligible metal-induced gap states (MIGS) between PbTe and 2D semiconductors, thus almost no additional Fermi-level pinning (FLP) at the heterostructure interface. The short-channel MoS₂ transistor with PbTe vdW contact exhibits superior performance including the excellent ohmic contacts, near-Boltzmann-limit subthreshold swing, high on/off current ratio ($\sim 10^9$), and negligible drain-induced barrier lowering ($\sim 82 \text{ mV V}^{-1}$). In addition, the device can also operate at low voltage of 0.01 V with a desirable on/off ratio of $\sim 10^8$, providing a facile technique to fabricate 2D material-based low-power ultimate scaled transistors.

D27-P20**High separation coefficient metal mesh/graphene hydrogen isotope separation composite membrane**

Yijie Guo, Hailin Peng*

Peking University

Graphene is an effective membrane for hydrogen isotope separation because a perfect single-layer graphene is permeable to protons but impermeable to most other atoms and molecules. However, the cracks and defects introduced during the transfer process of graphene-based composite membranes often reduce the separation performance. In this work, a simple and effective method for transferring graphene to prepare separation composite membranes was developed, achieving the preparation and characterization of high-quality graphene composite membranes with a high proton-deuteron separation factor. By coating Nafion solution on graphene and then combining it with a metal support mesh, the Nafion coating and the metal support mesh provide support and protection for graphene, reducing its damage. The Nafion coating ensures the smooth transmission of protons while blocking the interference of other particles. The metal support mesh, as a metal conductor, achieves better contact with the electrode during hydrogen isotope separation. The proton-deuteron separation factor of this graphene separation composite membrane is as high as 12.3, with an average of approximately 10.7. This structure of the separation membrane enables the analysis of its integrity, structure, and other characteristics of the separation membrane under near in-situ working conditions, which is conducive to exploring the structure-activity relationship and mechanism of the proton transmembrane process and has great application prospects in the field of hydrogen isotope separation.

D27-P21**Uniaxial Strain Engineering of Anisotropic Phonon in Few-Layer Violet Phosphorus with High Flexibility for Polarized Sensitive Photodetector**

Liangqiang Chen, Xiaobo Li*

Xidian University

The manifestation of mechanical phenomena in quantum materials at the macroscopic level is intricately linked to pronounced electron-electron interactions within their lattices, a relationship that becomes especially evident in low-dimensional materials. Violet phosphorous (VP), a nascent 2D material distinguished by its unique vertically aligned tubular structures, has garnered considerable attention owing to its layer-dependent electronic bandgap, exceptional carrier mobility, and robust air stability. This study explores the phonon modes of few-layer violet phosphorus (VP) through an experimental-theoretical approach, focusing on how uniaxial strain along different directions modulates its Raman response. Density functional theory shows strain along the a- or b-axis is mainly relieved through tube rotation, causing a pronounced anisotropic Raman response. Strain engineering enhances VP's photoelectric performance, increasing responsivity by about 2500% and the anisotropic ratio from 2.26 to 3.38. This work confirms VP's superior stretchability and impact resistance and provides a foundation for exploring its strain-induced anisotropic optoelectric properties.

D27-P22

Van der Waals Epitaxy Growth of 2D Single-Element Room-Temperature Ferromagnet

Xunguo Gong*

Wuhan University

2D single-element materials, which are pure and intrinsically homogeneous on the nanometer scale, can cut the time-consuming material-optimization process and circumvent the impure phase, bringing about opportunities to explore new physics and applications. Herein, for the first time, the synthesis of ultrathin cobalt single-crystalline nanosheets with a sub-millimeter scale via van der Waals epitaxy is demonstrated. The thickness can be as low as ≈ 6 nm. Theoretical calculations reveal their intrinsic ferromagnetic nature and epitaxial mechanism: that is, the synergistic effect between van der Waals interactions and surface energy minimization dominates the growth process. Cobalt nanosheets exhibit ultrahigh blocking temperatures above 710 K and in-plane magnetic anisotropy. Electrical transport measurements further reveal that cobalt nanosheets have significant magnetoresistance (MR) effect, and can realize a unique coexistence of positive MR and negative MR under different magnetic field configurations, which can be attributed to the competition and cooperation effect among ferromagnetic interaction, orbital scattering, and electronic correlation. These results provide a valuable case for synthesizing 2D elementary metal crystals with pure phase and room-temperature ferromagnetism and pave the way for investigating new physics and related applications in spintronics.

D27-P23

Ar 等离子体辅助拓扑化学转化制备二维 M_xP_y ($M=Fe, Co, Ni, Cr$) 及其磁学性质研究

李彦玫、秦斌、王芳*

山西师范大学

过渡金属磷化物 (M_xP_y) 具有可调的电子结构和丰富的磁学性质, 在新型自旋电子器件和高效能源存储系统开发中具有独特优势。然而, 目前二维过渡金属磷化物普适性合成方法仍具挑战性, 其制备方法的局限性显著制约了材料性能的系统性研究和实际应用开发。本研究开发了一种普适性制备策略: 以电化学剥离的磷烯作为模板和磷源, 通过 Ar 等离子体处理引入空位以提升其反应活性, 并采用溶剂热法成功制备了一系列不同比例的 M_xP_y ($M=Fe, Co, Ni, Cr$) 及其异质结构。磁学性能研究表明, FeP 和 Fe_2P 均表现出铁磁性, 其中 FeP 为硬磁材料而 Fe_2P 呈现软铁磁特性, 且居里温度随材料厚度增加而升高。特别值得注意的是, Ni_5P_4/Ni_2P 异质结构作为锂硫电池正极材料时展现出优异的电化学性能。该工作不仅为二维过渡金属磷化物的可控制备提供了普适性方法, 同时推动了其在磁学与能源领域的功能化探索。

D27-P24

石墨烯/氮化硼异质结晶圆的远程外延生长

王悦晨、王嘉豪、彭海琳*

北京大学

随着地质勘探、航空航天等新兴技术的发展,面向高温极端工况的电子器件亟待机械强度更好,更耐热冲击的新型材料体系。二维材料家族中,石墨烯具有超高的机械强度和载流子迁移率,将其与具有独特断裂行为的氮化硼复合有望进一步提高体系韧性。我们发展了石墨烯/氮化硼垂直异质结构的远程外延生长方法。首先研究了生长过程中气相物种对氮化硼的刻蚀机理,探究了金属衬底组分对远程催化能力的调控作用,通过远程外延的生长设计,实现了石墨烯/氮化硼垂直异质结构的构筑,制备得到的石墨烯/氮化硼异质结构晶圆具有良好的机械强度和均匀度,并基于此构筑了大面积、无破损、高仪表系数(GF~22)的石墨烯压阻传感器阵列。

D27-P25**超薄二维铁电材料 CuCrS₂ 可控范德华外延**

周焱畅

武汉大学物理科学与技术学院

铁电二维材料由于其潜在的多功能性,在下一代电子领域非常受欢迎。然而,由于去极化静电场和界面化学键的存在,当厚度达到纳米级时,铁电材料的长程极性序很难维持,导致膨胀的二维铁电体反应迟缓,居里温度高于室温的铁电体很少。我们首次利用化学气相沉积系统,通过范德华外延成功合成了厚度达 1.8 nm 的 2D CuCrS₂ 纳米片。通过透射电子显微镜(TEM)、二次谐波产生(SHG)和拉曼光谱(Raman spectroscopy)的测量,证实了 R3m 空间群和非中心对称结构,从结构角度验证了铁电体存在的可行性。最令人兴奋的是,通过压电响应力显微镜(PFM)在厚度达~10 nm 的 CuCrS₂ 纳米片上记录并显示了相反极化的畴。理论计算有助于理解 CuCrS₂ 纳米片的铁电开关机制。最后,我们制备了一种铁电忆阻器,其 on/off 比达到~10²,并在 2000 s 后保持稳定,表明其适用于新型纳米电子学。总的来说,二维 CuCrS₂ 纳米片在纳米尺度表现出优异的铁电特性,克服了基本的厚度限制,在下一代器件中显示出巨大的前景。

D27-P26**原子级锐利堆叠的二元三元磁性异质结构中增强的光学非线性与鲁棒性铁磁性**

黄诗瑶, 王皓

武汉大学物理科学与技术学院

二维(2D)材料为多种晶体的集成提供了一个多功能平台,能够构建具有独特功能的异质结构。由于其显著的界面相互作用特性,连续生长的二维异质结构在性能调控方面展现出巨大潜力。在本研究中,我们提出了一种通用的合成策略,并对精心设计的二维二元-三元磁性异质结构进行了系统性研究。通过实现典型的横向和垂直 Cr_{1+m}Se₂(001)/CuCr₂Se₄(111) 异质结构,得益于其高度匹配的晶格排列,成功获得了原子级锐利的界面。实验结果表明,该异质结构表现出显著增强的光学二次谐波生成能力。进一步的磁性测量显示,该异质结构的居里温度高达 360 K,且其磁性表现出对厚度和温度的依赖性。此外,我们在 Fe-Cr-S、Co-Cr-S 和 Cu-Cr-S 系统中成功合成了三种类似的二维磁性异质结构,验证了相干异质外延方法的普适性。本研究开发了一个创新性平台,用于深入探索二维二元-三元异质结构的基本物理机制及其潜在应用,同时为相关功能性器件的设计与制造奠定了基础。

仅发表论文

D27-PO01**Tunable Schottky barrier of WSSiN₂/graphene heterostructure via external electric field**

Libo Wang, xinguo ma*

Hubei University of Technology

ABSTRACT: Mitigating the interfacial barrier to enhance the electrical transport properties of heterojunction field-effect transistors (HTS) remains a formidable challenge. In this study, we employ first-principles calculations to thoroughly investigate the modulation of Schottky barrier formation through the application of an external electric field. Owing to the vertically asymmetric structure of WSSiN₂, the Schottky contact at the interfaces of graphene/N₂WSSi and graphene/SWSSiN₂ heterojunctions transitions from p-type to n-type and ultimately eventually into Ohmic contact under the influence of an external electric field. Predictably, the maximum carrier concentration of graphene in the N₂WSSi heterojunction is predicted to reach $2.95 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ under an external electric field of -0.58 V, while that in the SWSSiN₂ heterojunction reaches $2.52 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ under an external electric field of +0.58 V. It is confirmed that the redistribution of interfacial charge density dictates the height of the Schottky barrier and the type of contact. These findings highlight the potential of WSSiN₂/graphene heterojunctions for the development of high-sensitivity Schottky field-effect transistors.

D27-PO02

Schottky Barrier Modulation of Ga₂O₂Cl₂/Graphene Heterostructure via Electric Field

Jiaqi Wang, Xinguo Ma*

Hubei University of Technology

Reducing the Schottky barrier and achieving ohmic contact present critical challenges for optimizing heterostructure field-effect transistor and electronic device performance. Using first-principles calculations, we examine the interfacial and electronic properties of the stable Ga₂O₂Cl₂/graphene heterostructure. Notably, the Ga₂O₂Cl₂/GR heterostructure exhibits a low Φ_n (0.242 eV) at equilibrium, which can be readily tuned to zero, suggesting its potential for tunable Schottky nanodevices. The Schottky barrier height (SBH) of the Ga₂O₂Cl₂/GR heterostructure can be efficiently modulated via an external electric field, achieving a transition from n-type Schottky to Ohmic contact at $0.1 \text{ V} \cdot \text{\AA}^{-1}$ electric field. Notably, the Schottky barrier height varies substantially (0.263-0.338 eV) with the change of the external electric field per $0.1 \text{ V} \cdot \text{\AA}^{-1}$, highlighting the high sensitivity of Ga₂O₂Cl₂/GR heterostructure. These results offer practical approaches for developing high-performance and sensitive Ga₂O₂Cl₂/GR-based field-effect transistors.

D27-PO03

First-principles calculations of atomic geometry and relaxed structure of wurtzite AlN (001) surface

Yingtao Wu, Xinguo Ma*

hubei university of technology

Based on density functional theory and using the plane-wave ultra-soft pseudopotential method, this paper systematically studies the atomic structure and relaxation behavior of the (001) surface of wurtzite aluminum nitride (AlN). By constructing two types of surface models, namely Al-terminated and N-terminated, the total energy of the system is calculated and compared to determine the more stable surface termination type. Further, the variation law of surface energy with vacuum layer thickness and atomic layer number is analyzed, and reasonable model parameters are screened to ensure the reliability of the calculation. The results show that the Al-terminated surface is more stable in energy, and the surface atoms undergo significant relaxation, but no surface reconstruction occurs. It is found that when the atomic layer number is 12 and the vacuum layer thickness is 0.4 nm, the convergence degree of surface energy is less than 0.01 J/m², the Al-N bond length changes significantly after relaxation, and the outer electrons are transferred, and the structure tends to be stable.

D27-PO04

调控 Janus Al_2XY ($\text{X/Y} = \text{S, Se, Te}$) 单层的电子与压电性质：第一性原理计算

肖冠言、马新国*

湖北工业大学

本文通过密度泛函理论 (DFT) 计算研究了 Janus 结构 Al_2XY ($\text{X/Y} = \text{S, Se, Te}$) 单层的压电性能。结果显示, Al_2SSe 、 Al_2STe 、 Al_2SeTe 的面内压电系数 d_{11} 分别为 3.08、4.76、3.55 pm/V, 而面外压电系数 d_{31} 分别为 0.14、0.45、0.33 pm/V。此外, 垂直镜面不对称性和不同的电荷分布导致 Al_2STe 具有较大的压电性能。值得注意的是, 应变可以有效调控 Janus Al_2XY 单层的压电性能。在拉伸应变下, Al_2XY 的压电应力系数 (e_{11}) 增大, 而弹性刚度系数 ($C_{11}+C_{12}$, $C_{11}-C_{12}$) 减小, 从而导致了显著的压电系数 (d_{11} 和 d_{31})。这主要归因于玻恩有效电荷的增加以及键合力的减弱。该研究结果为新型二维 Janus Al_2XY 单层在压电器件中的应用奠定了理论基础。