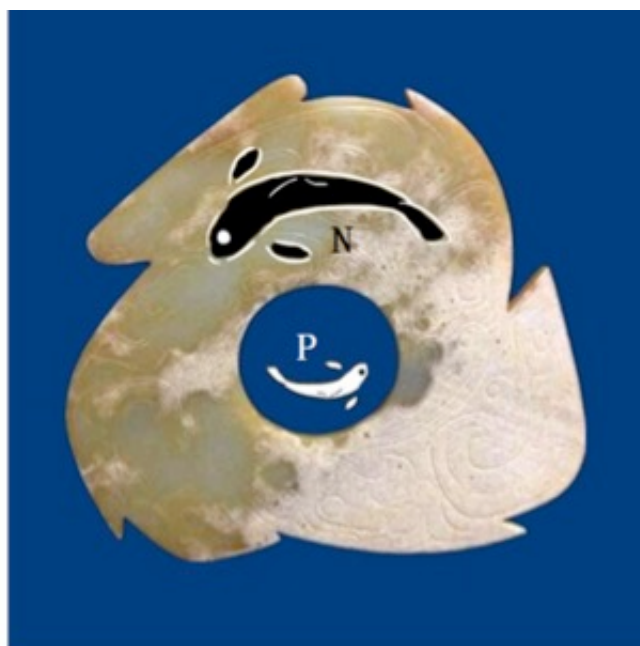


单晶纳米线中设计PN结的关键：扭曲

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5072.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！



玉璇玑是大汶口文化出土礼器，其形态恰似研究中的单晶纳米线横截面；轴向扭曲使P、N型杂质彼此分离，分别位于中心区域和外围区域。

单晶纳米线中设计PN结的关键：扭曲。阴阳相互吸引却不融合，半导体PN结也是这样：N型杂质和P型杂质相互吸引，而一旦彼此融合，却意味着PN结的死亡与半导体性能的丧失。研究人员发现，在纳米线中加入轴向扭曲，可以令二者保持分离，使PN结长生、器件寿命延长。

如果在材料的一个区域进行N型掺杂，而在另一个区域进行P型掺杂，就形成了一个PN结。PN结是半导体器件当中最重要和最基础的一种特殊结构，也是半导体电子器件如发光二极管、太阳能电池、晶体管等等的基本单元。随着近些年来纳米工程技术的发展，纳米PN结可望成为下一代纳米科技的基本载体。

然而，PN结同典型的晶体不同，它有自己的生与死。N型杂质与P型杂质之间存在强且长程的库伦吸引，他们会自发复合形成中性对，这使材料又失去了PN结的电子特性。换句话说，一个PN结失效了或者死亡了。从这种意义上来说，PN结并不是系统平衡态，而是在两种杂质完全复合互相抵消之后，系统才到达热力学的平衡态。因此这种复合过程就好比生命从诞生到死亡的过程。

中国道教思想的一个核心观念是长生。那么有没有可能阻止或者延缓这样的复合，为PN结求长生呢?研究者发现，通过进一步引入异质结构，可以对其中的一种材料进行N型掺杂，而对另一种材料进行P型掺杂。这样异质结构中的材料界面可以更加有效地阻断N型杂质与P型杂质之间的复合。这个思想也是纳米尺度下PN结材料设计的一个范式。

最近，为了获得纳米PN结，实验上已经合成了纳米线共轴异质结构。但是，作为PN结载体的纳米异质结构存在明显缺陷：纳米线共轴异质结构的合成一般需要多个步骤，费用高昂;共轴异质结构的壳层常常是多晶的，不利于载流子的输运;核壳之间的界面电荷散射以及可能的深能级会损害器件的效率。从道教的意义来看，异质结型PN结还只是PN结的养生之道，因为这只是通过抑制扩散和复合的过程来延长PN结的寿命。

还有其它方法来阻止N型杂质与P型杂质之间的复合，从而在单晶纳米线中设计长生的PN结么?N型杂质与P型杂质之间存在库伦吸引，这要求我们必须通过操控掺杂原子的空间占据位置(或者占据分布)来分离N型杂质和P型杂质。这是是半导体掺杂研究中有待解决的一个关键问题。

最近，香港中文大学朱骏宜课题组与北京师范大学张东波课题组以及北京计算科学研究中心的研究人员在发表于《国家科学评论》的研究论文Twist-Driven Separation of p-type and n-type Dopants in Single Crystalline Nanowires中提出，在单晶硅纳米线里通过轴向扭曲来调控掺杂原子的位置，可以有效分离N型杂质与P型杂质。

具体来说，基于密度泛函紧束缚的广义布洛赫方法原子级计算表明，在扭曲的硅纳米线中，尺寸较小的掺杂原子倾向于占据纳米线中心的区域，而尺寸较大的掺杂原子则喜欢呆在纳米线表面附近的区域(如图所示)。基于杂化键轨道理论的解析模型进一步揭示出，扭曲纳米线中掺杂原子的这种选择性分布来自于扭曲诱导的沿纳米线径向的非均匀剪切应变。

这样，通过选择合适的N型杂质元素与P型杂质元素，如硼与锑，就可能在单晶纳米线中实现N型杂质与P型杂质的分离。这一点为基于掺杂原子形成能的统计分析所证实，意味着在单晶纳米线中通过扭曲变形可获得有效的PN结结构。

这种新方法可以大大简化器件的合成难度、降低合成成本。如果在使用器件时保持剪切应变，两种杂质的复合会因为受到应变的束缚而被显著克服，从这种意义上来说，器件获得了长生。即使在使用器件时去掉剪切应变，由于比较高的扩散势垒的影响，两种杂质的复合也是相当缓慢的。

论文相关信息：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwz014>

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发