

拓扑半金属二碲化铂太赫兹探测器

钟粤华¹, 韩玉柱¹, 赖志鸿¹, 李洋^{2,3}, 沈云^{2,3*}, 邓晓华^{3**}¹南昌大学材料科学与工程学院, 江西 南昌 330031;²南昌大学物理系, 江西 南昌 330031;³南昌大学空间科学与技术研究院, 江西 南昌 330031

摘要 通过第一性原理计算了第 II 类狄拉克半金属二碲化铂(PtTe₂)的能带结构及拓扑表面态,使用机械剥离法制备出层状 PtTe₂,通过微纳加工制成金属-PtTe₂-金属场效应晶体管,并进行了基于第 II 类狄拉克半金属 PtTe₂的场效应晶体管器件在太赫兹波段的光电流响应研究。该器件对太赫兹具有明显的光响应,响应度达到了 3.85 A/W,等效噪声功率约为 4.81 pW·Hz^{-1/2},其在低能尤其是太赫兹波段有着广泛的应用前景。

关键词 探测器; 太赫兹; 拓扑半金属; 场效应晶体管

中图分类号 O439

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.1504001

Topological Semimetal PtTe₂ Terahertz DetectorZhong Yuehua¹, Han Yuzhu¹, Lai Zhihong¹, Li Yang^{2,3}, Shen Yun^{2,3*}, Deng Xiaohua^{3**}¹School of Materials Science and Engineering, Nanchang University, Nanchang 330031, Jiangxi, China;²Department of Physics, Nanchang University, Nanchang 330031, Jiangxi, China;³Institute of Space Science and Technology, Nanchang University, Nanchang 330031, Jiangxi, China

Abstract In this paper, the energy band structure and topological surface state of type II Dirac semimetal PtTe₂ are calculated based on first-principle calculation. A layered PtTe₂ is prepared by the mechanical lift-off approach, and a metal-PtTe₂-metal field effect transistor is fabricated based on micro-nano processing. The photocurrent response of a field-effect transistor device based on type II Dirac semimetal PtTe₂ in terahertz region is studied. The device has an obvious photoresponse to terahertz, with a responsivity of 3.85 A/W and an equivalent noise power of about 4.81 pW·Hz^{-1/2}. It shows a wide range of application prospects in low-energy bands, especially terahertz bands.

Key words detectors; terahertz; topological semimetal; field effect transistor

1 引言

拓扑半金属的光电流响应因其具有在低光子能量和高运算速度方面突破光电探测器性能极限的潜力而引起了人们极大的研究兴趣^[1-5]。狄拉克(Dirac)半金属在狄拉克点附近具有较低的激发能量,服从狄拉克方程,它表现出许多独特的电学性质,包括三维量子霍尔效应^[6-7]、超高载流子迁移率^[8]和巨负磁阻^[9]。当用作光电探测器时,狄拉克半金属显示出许多优于半导体材料的优点,在太赫兹(THz)波段有较低的暗电流、超快的响应,以及低的等效噪声功率^[10-18]。一般来说,根据狄拉克费米子的能量色散是否违反洛伦兹不变性,狄拉克半金属可以分为两类,Dirac 费米子的一般

哈密顿量 $\epsilon_{\pm}(K) = T(K) \pm U(K)$ ^[19],其中 $T(K)$ 是动能分量, $U(K)$ 是势能分量。 $T(K)$ 和 $U(K)$ 的相对大小可以用来对 Dirac 半金属^[20]的拓扑性质进行分类。服从洛伦兹不变性的 I 型 Dirac 半金属满足 $T(K) < U(K)$ 并且具有线性 Dirac 锥;当 $T(K) > U(K)$ 时,洛伦兹不变性被破坏,在电子和空穴之间的拓扑保护的接触点出现强烈倾斜的 Dirac 锥,这种 Dirac 半金属被称为 II 型 Dirac 半金属。

本文使用第一性原理计算了二碲化铂(PtTe₂)的能带结构以及表面态,采用机械剥离法制备得到 PtTe₂ 薄层,随后基于微纳加工工艺制得金属-PtTe₂-金属场效应晶体管,对 PtTe₂ 进行电学性能及太赫兹光电探测性能分析,结果表明 PtTe₂ 具有栅极不可调特性,对

收稿日期: 2022-01-04; 修回日期: 2022-01-31; 录用日期: 2022-03-03

基金项目: 国家自然科学基金重大科研仪器研制项目(61927813)、国家自然科学基金(61865009)

通信作者: *shenyun@ncu.edu.cn; **Dengxiaohua0@gmail.com

太赫兹光电响应达到 3.85 A/W , 等效噪声功率为 $4.81 \text{ pW}\cdot\text{Hz}^{-1/2}$ 。

所有第一性原理计算都是在密度泛函理论的框架内使用 Perdew-Burke-Ernzerhof-Type^[21] 广义梯度近似交换相关势进行的。自洽场计算采用 $8\times 8\times 6$ 的 k 点网格和 300 eV 平面波能量截止值。晶格弛豫计算是为了得到最稳定的晶格参数和原子结构参数, 自洽计算的收敛判据是任意原子的受力小于 $1\times 10^{-3} \text{ eV}/\text{\AA}$, 计算中考虑了自旋-轨道耦合(SOC)。使用基于最大局域 Wannier 函数^[22] 的表面格林函数方法^[23] 计算了表面态。

2 实验方法

2.1 样品制备

采用机械剥离法得到的 PtTe_2 薄片, 其制备过程如下: 先在蓝膜胶带上获得层状 PtTe_2 , 然后将其转移到聚二甲基硅氧烷(PDMS)上, 并采用定点转移, 将其转移到干净的 SiO_2/Si 基底上(SiO_2 厚度为 300 nm , Si 厚度为 $500 \mu\text{m}$); 然后进行光刻, 光刻步骤为: 以 $3000 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 转速旋涂光刻胶, 前烘 60 s , 使用激光直写进行曝光图案化, 后烘 90 s , 显影, 氮气吹干, 完成电极图案的光刻。

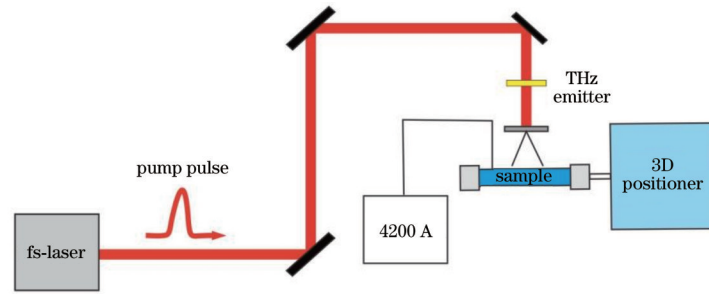


图 1 太赫兹光电探测系统光路示意图

Fig. 1 Schematic diagram of light path of terahertz photoelectric detection system

3 结果与讨论

块状 PtTe_2 属于具有 CdI₂ 型晶体结构的 1T 金属二硫属化物大家族[空间群 $P\bar{3}m1(164)$]。块状结构可以看作是孤立单层在面外方向堆叠的集合, 图 2(a) 和图 2(b) 分别是 PtTe_2 晶体的俯视图和侧视图。在这些单层中, 每层都有 3 个子层 Te-Pt-Te, 其中中心 Pt 原子与 6 个相邻的 Te 原子牢固结合, 形成六边形蜂窝结构, 图 2(c) 显示了六角体布里渊区(BZ)和投影到 (001) 表面上的表面布里渊区。图 2(d) 为考虑过自旋轨道耦合后的体 PtTe_2 能带图, 其狄拉克点出现在 Γ -A 处, 且明显可以看出有较大的倾斜。图 2(e) 为理论计算下 PtTe_2 在 (001) 表面的 \bar{K} - $\bar{\Gamma}$ - \bar{M} 方向能带色散, 其具有倾斜的狄拉克点, 在狄拉克点附近具有较低的能量激发, 因此其在低能波段有广阔的应用前景。

为了进一步研究其性能, 制备了如图 3(a) 所示的金属-PtTe₂-金属场效应晶体管, 沟道长度为 $4 \mu\text{m}$, 所镀金属电极为 Cu(50 nm)/Cr(10 nm)。拉曼光谱表征时, 入射激光垂直照射于图 3(a) 所示的 PtTe_2 样品上,

随后依次进行电子束蒸镀电极金属 Cr(10 nm) 和 Cu(50 nm); 蒸镀后的电极样品浸泡于丙酮中 30 min, 使用滴管将残余的金属清洗及氮气吹干; 最后将样品进行真空保存, 以防止因 PtTe_2 氧化影响性能。

2.2 测量与表征

使用德国 WITec 公司生产的 Alpha 300R 激光共焦拉曼光谱仪进行拉曼光谱采集, 激光为绿光(532 nm), 物镜放大倍数为 50。为避免样品被高能激光烧伤, 控制样品表面的激光功率低于 1 mW , 信号采集时间为 $3\sim 10 \text{ s}$, 测试在室温真空下进行, 扫描范围为 $50\sim 300 \text{ cm}^{-1}$, 测试精度为 1 cm^{-1} 。

PtTe_2 电学输运性能测试采用探针台及 Keithley 4200 A 半导体参数测试仪进行。在配套的显微镜辅助下将探针移动到电极上并使二者接触, 测量转移特性曲线和输出特性曲线, 所有测试均在室温下进行。太赫兹波是由钛宝石飞秒激光器产生的 800 nm 飞秒激光照射 N-benzyl-2-methyl-4-nitroanilin (BNA) 有机晶体产生, 产生的太赫兹波为 3 THz 频谱宽度的复色光, 其功率均由 Gentec-EO 公司的 THZ-B-DZ 系列太赫兹功率计标定。太赫兹光电探测系统光路如图 1 所示。

得到的图谱结果如图 3(b) 所示, 其中有 2 个分别位于 110 cm^{-1} 、 157 cm^{-1} 波数的特征峰, 分别对应 PtTe_2 的 E_g 、 A_{1g} 峰, 这是 1T 结构的典型特征, 该拉曼光谱图中没有其他明显的峰, 表明样品为干净的 PtTe_2 。图 3(c) 为在不同栅压下 PtTe_2 场效应管随偏压变化的 I_{ds} - V_{ds} (I_{ds} 为源漏电流, V_{ds} 为源漏电压) 曲线 (栅压为背栅), 可以明显看出 PtTe_2 具有栅压不可调的性质; 图 3(d) 为 PtTe_2 在固定偏压下随栅压变化的 I_{ds} - V_g (V_g 为栅极电压) 曲线, 图中有三条平行的直线, 进一步验证其栅压不可调的性质。

为了得到 PtTe_2 光电探测器的光响应性能, 采用 800 nm 飞秒激光照射在 BNA 有机晶体上产生的太赫兹波对器件进行照射, 产生的太赫兹波为 3 THz 频谱宽度的复色光, 并在此条件下对器件的光响应和电学性能进行测试。第 II 类 Dirac 半金属 PtTe_2 允许电子与倾斜 Dirac 锥体费米表面的 THz 波强耦合, 从而导致非平衡载流子的激发, 如图 4(a) 所示。当通过沟道施加偏置电压时, 产生的载流子很容易从金属-材料界面移位, 形成较大的光电流, 这些被激活的载流子在电

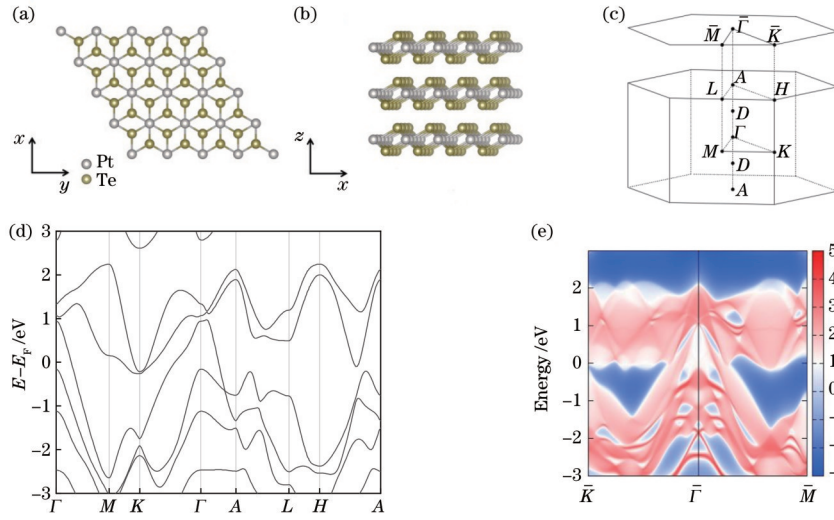


图 2 PtTe₂ 的结构和电子特性。(a) PtTe₂ 俯视图; (b) PtTe₂ 侧视图; (c) 块体和投影到(001)表面上的布里渊区(D 为 3D 狄拉克点的位置); (d) 考虑自旋-轨道耦合(SOC)块体 PtTe₂ 的能带图; (e) 用 Wannier 函数计算得到的 $\bar{K}-\bar{\Gamma}-\bar{M}$ 方向的能带色散

Fig. 2 Structural and electronic properties of PtTe₂. (a) Top view of PtTe₂; (b) side view of PtTe₂; (c) block and Brillouin region projected onto (001) surface (D is location of 3D Dirac point); (d) band diagram considering spin-orbit coupling (SOC) bulk PtTe₂; (e) band dispersion in $\bar{K}-\bar{\Gamma}-\bar{M}$ direction calculated using Wannier function

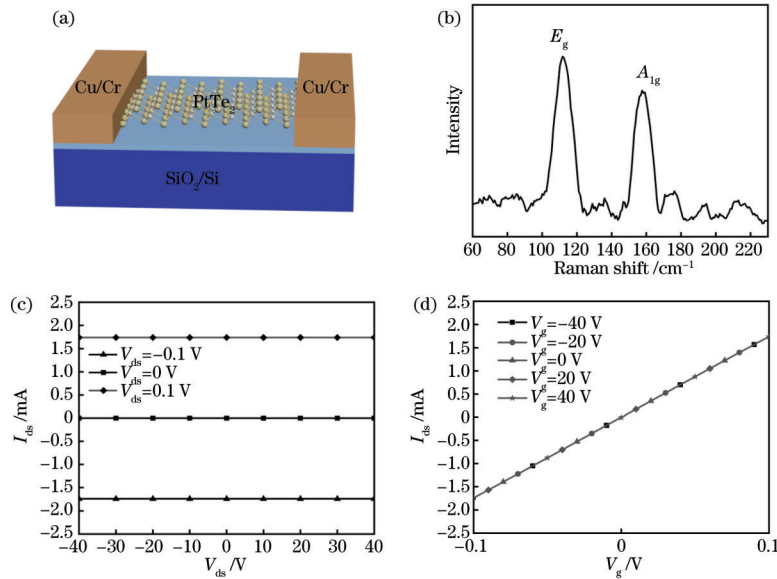


图 3 PtTe₂ 的表征及电学特性。(a) PtTe₂ 场效应晶体管结构示意图; (b) PtTe₂ 拉曼图谱; (c) 固定栅压下的 $I_{ds}-V_{ds}$ 曲线; (d) 固定偏压下的 $I_{ds}-V_g$ 曲线

Fig. 3 Characterization and electrical properties of PtTe₂. (a) Schematic diagram of PtTe₂ field effect transistor structure; (b) PtTe₂ Raman spectrum; (c) $I_{ds}-V_{ds}$ curves under fixed gate pressure; (d) $I_{ds}-V_g$ curves at fixed bias

场的作用下会被加速,从而导致光电导增益。图 4(b) 为太赫兹光电探测器的电极结构图,该结构使用了对数周期结构来增强沿 4 μm PtTe₂ 沟道的太赫兹电场强度,其中 $r_n=0.8R_n$ (r_n 为第 n 条天线辐射臂的内壁半径, R_n 为第 n 条天线辐射臂的外壁半径)。图 4(c) 为太赫兹探测器的显微图像。图 4(d) 为在 1 mV 偏压下 PtTe₂ 光电探测器的光电流响应曲线,太赫兹功率密度为 0.027 mW/cm², 脉冲宽度为 35 fs。图 4(e) 为在不同太赫兹功率密度情况下探测器光电流的大小,可以明显看出在一定范围内,光电流与功率密度呈线性关

系。图 4(f) 为在不同太赫兹功率密度情况下探测器响应度的大小,其中响应度 $R_A = \frac{I_{ph}}{P_{in}S_a}$, I_{ph} 为光电流, P_{in} 为太赫兹功率密度, S_a 为器件有效面积。等效噪声功率 $P_{NE} = \frac{\nu_n}{R_A} = \frac{\sqrt{(4k_b T/r + 2qI_d)}}{R_A}$, 其中 R_A 是器件的电流响应率, k_b 是玻尔兹曼常数, T 是温度, r 是材料的电阻值, q 是基本电荷, I_d 是器件的偏置电流, ν_n 是噪声电流的均方根, $\nu_n = (\nu_i^2 + \nu_b^2)^{1/2} = \sqrt{(4k_b T/r + 2qI_d)}$, ν_i 为

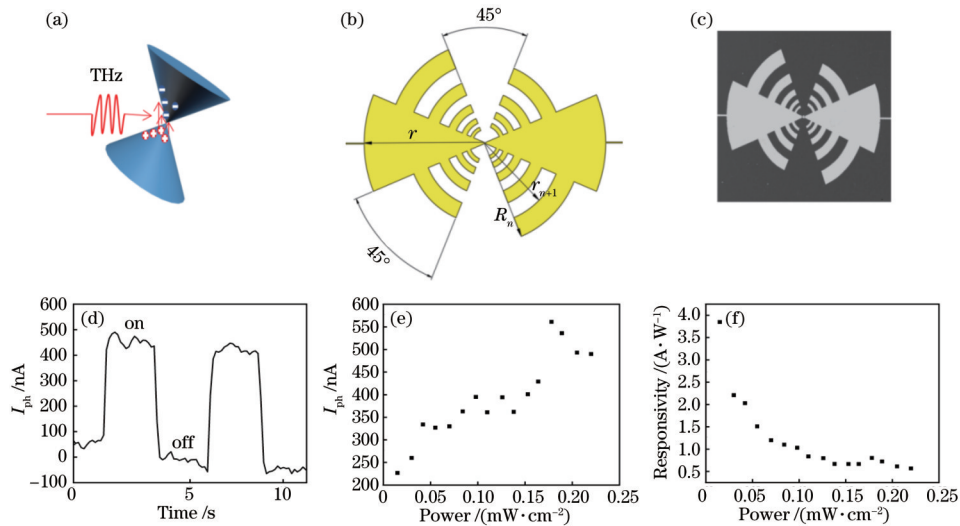


图 4 器件结构及太赫兹响应特性。(a) PtTe₂基太赫兹光电探测器的光导机理;(b)天线结构参数;(c)器件的显微图像;(d)器件在太赫兹下的光电响应;(e)光电流与入射光功率的关系;(f)响应度与入射光功率的关系

Fig. 4 Device structure and terahertz response characteristics. (a) Photoconductive mechanism of PtTe₂-based terahertz photoelectric detector; (b) antenna structure parameters; (c) microscopic images of devices; (d) photocurrent response of device at terahertz; (e) relation between photocurrent and incident optical power; (f) relation between responsivity and incident light power

与器件通道的非零电阻相关的热约翰逊-奈奎斯特噪声, ν_b 为偏置电流引起的噪声。在太赫兹照射下, 该器件的最高响应度为 3.85 A/W, 等效噪声功率约为 $4.81 \text{ pW} \cdot \text{Hz}^{-1/2}$ 。

4 结 论

使用第一性原理计算得到 PtTe₂ 的能带结构和表面态, 采用机械剥离法制备了 PtTe₂ 层状材料, 随后通过微纳加工工艺制备了基于 PtTe₂ 的场效应晶体管, 并对电学性能和太赫兹探测进行了测试和分析。PtTe₂ 单晶是由化学气相输运法得到的, 使用机械剥离法得到 PtTe₂ 层状材料, 表征结果显示制备的 PtTe₂ 质量较好, 场效应晶体管无明显的栅压调控作用, 使用太赫兹波照射, 测试其对太赫兹的探测性能。结果表明该器件对太赫兹具有明显的光响应, 响应度达到了 3.85 A/W, 等效噪声功率约为 $4.81 \text{ pW} \cdot \text{Hz}^{-1/2}$ 。本文研究结果表明 PtTe₂ 太赫兹光电探测器在太赫兹探测和光电信号转换方面具有很大的应用前景。

参 考 文 献

- [1] Zeng L H, Wu D, Lin S H, et al. Controlled synthesis of 2D palladium diselenide for sensitive photodetector applications[J]. *Advanced Functional Materials*, 2019, 29(1): 1806878.
- [2] Yang M, Wang J, Han J Y, et al. Enhanced performance of wideband room temperature photodetector based on Cd₃As₂ thin film/pentacene heterojunction[J]. *ACS Photonics*, 2018, 5(8): 3438-3445.
- [3] Yavarishad N, Hosseini T, Kheirandish E, et al. Room-temperature self-powered energy photodetector based on optically induced Seebeck effect in Cd₃As₂[J]. *Applied Physics Express*, 2017, 10(5): 052201.
- [4] Léonard F, Yu W L, Collins K C, et al. Strong photothermoelectric response and contact reactivity of the Dirac semimetal ZrTe₅[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2017, 9(42): 37041-37047.
- [5] Ma J C, Deng K, Zheng L, et al. Experimental progress on layered topological semimetals[J]. *2D Materials*, 2019, 6(3): 032001.
- [6] Zhang C, Zhang Y, Yuan X, et al. Quantum Hall effect based on Weyl orbits in Cd₃As₂[J]. *Nature*, 2019, 565(7739): 331-336.
- [7] Tang F, Ren Y, Wang P, et al. Three-dimensional quantum Hall effect and metal-insulator transition in ZrTe₅[J]. *Nature*, 2019, 569(7757): 537-541.
- [8] Liang T, Gibson Q, Ali M N, et al. Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal Cd₃As₂[J]. *Nature Materials*, 2015, 14(3): 280-284.
- [9] Li C Z, Wang L X, Liu H, et al. Giant negative magnetoresistance induced by the chiral anomaly in individual Cd₃As₂ nanowires[J]. *Nature Communications*, 2015, 6: 10137.
- [10] Xu H, Guo C, Zhang J Z, et al. PtTe₂-based type-II Dirac semimetal and its van der Waals heterostructure for sensitive room temperature terahertz photodetection[J]. *Small*, 2019, 15(52): 1903362.
- [11] Guo C, Hu Y B, Chen G, et al. Anisotropic ultrasensitive PdTe₂-based phototransistor for room-temperature long-wavelength detection[J]. *Science Advances*, 2020, 6(36): eabb6500.
- [12] Yang Y, Zhang K X, Zhang L B, et al. Controllable growth of type-II Dirac semimetal PtTe₂ atomic layer on Au substrate for sensitive room temperature terahertz photodetection[J]. *InfoMat*, 2021, 3(6): 705-715.
- [13] Xu H, Fei F C, Chen Z, et al. Colossal terahertz

- photoresponse at room temperature: a signature of type-II Dirac fermiology[J]. *ACS Nano*, 2021, 15(3): 5138-5146.
- [14] Yao X M, Zhang S X, Sun Q, et al. Thickness-controlled three-dimensional Dirac semimetal for scalable high-performance terahertz optoelectronics[J]. *ACS Photonics*, 2021, 8(6): 1689-1697.
- [15] Zhang L, Chen Z, Zhang K, et al. High-frequency rectifiers based on type-II Dirac fermions[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 1584.
- [16] 肖芮文, 肖俊羽, 金萍, 等. 基于三维多孔石墨烯和胆甾相液晶胶囊的高效可视化太赫兹探测器[J]. *光学学报*, 2020, 40(17): 1704002.
Xiao R W, Xiao J Y, Jin P, et al. High-efficiency visual terahertz detector based on three-dimensional porous graphene and cholesteric liquid crystal microcapsule[J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(17): 1704002.
- [17] Zhao H H, Chen X H, Ouyang C, et al. Generation and manipulation of chiral terahertz waves in the three-dimensional topological insulator Bi_2Te_3 [J]. *Advanced Photonics*, 2020, 2(6): 066003.
- [18] 冯辉, 卜伟华, 王文静, 等. 单探测器快速扫描被动太赫兹人体成像系统[J]. *光学学报*, 2020, 40(7): 0711002.
Feng H, Bu W H, Wang W J, et al. Passive terahertz imaging system for fast scanning of human body by a single detector[J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(7): 0711002.
- [19] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z, et al. Type-II Weyl semimetals[J]. *Nature*, 2015, 527(7579): 495-498.
- [20] Yan M, Huang H, Zhang K, et al. Lorentz-violating type-II Dirac fermions in transition metal dichalcogenide PtTe_2 [J]. *Nature Communications*, 2017, 8: 257.
- [21] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple[J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18): 3865-3868.
- [22] Mostofi A A, Yates J R, Lee Y S, et al. wannier90: a tool for obtaining maximally-localised Wannier functions [J]. *Computer Physics Communications*, 2008, 178(9): 685-699.
- [23] Lopez Sancho M P, Lopez Sancho J M, Rubio J. Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to $\text{Mo}(100)$ [J]. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1984, 14(5): 1205-1215.