

# 2021 年臺灣國際科學展覽會 優勝作品專輯

作品編號 160030

參展科別 物理與天文學

作品名稱 低維度新型材料量子傳輸

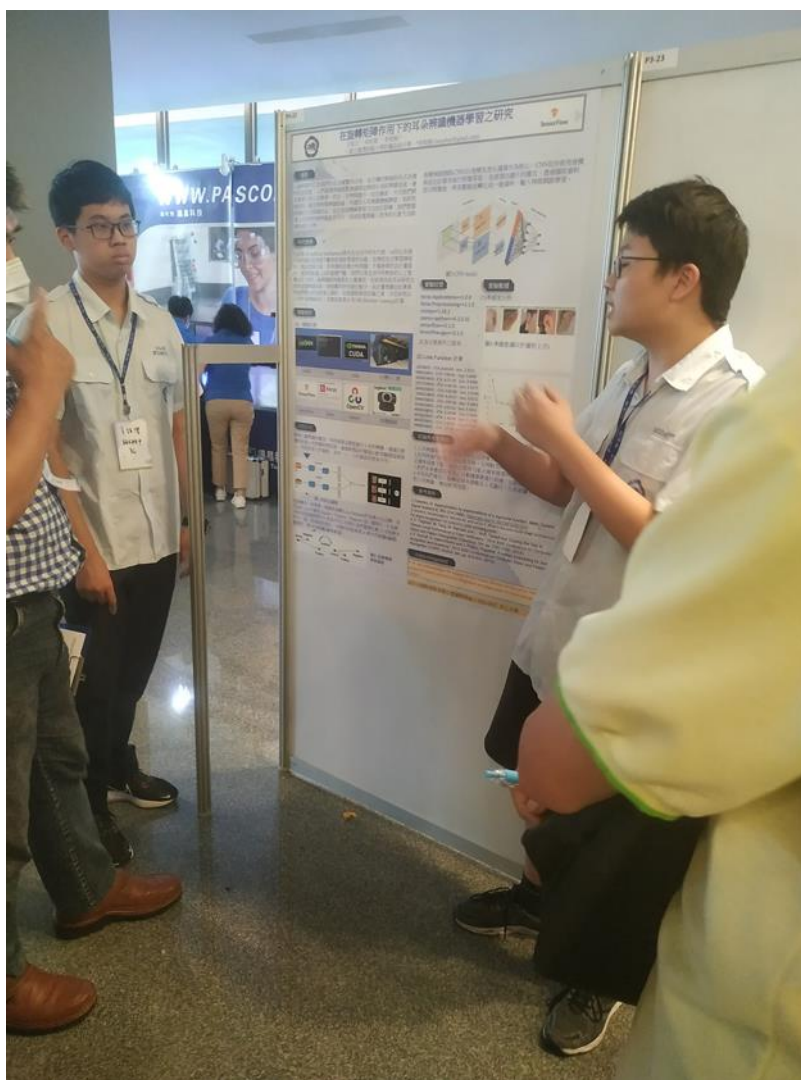
就讀學校 國立臺灣師範大學附屬高級中學

指導教師 李柏翰、莊家翔

作者姓名 王聖文、吳柏澂

關鍵詞 SnSe<sub>2</sub>、量子傳輸

## 作者簡介



我們是來自師大附中的吳柏澂和王聖文，在因緣際會下加入了老師的實驗室學習物理，也漸漸對其產生了興趣。在合作參與多次比賽後，在資訊及物理方面，透過不停的交流及探討，更有著深刻的聯繫。

## 摘要

自從2010年諾貝爾物理獎原子層石墨烯及2016年的諾貝爾物理獎拓樸學，低維度新穎電子相成為材料界的一大課題，讓諸多科學家爭先恐後進行嘗試。而其中石墨烯擁有0.2~0.3 nm 的厚度，電阻率為 $10^{-6} \Omega\text{-cm}$  這項驚人的發現，學者紛紛期待發現更多與石墨烯相仿的材料。因為 SnSe<sub>2</sub>二硒化錫為0.9 eV 的間接帶隙半導體，在地球上的產量豐富，我們對其進行了諸如半導體，二維材料，電晶體特性等研究，我們發現 SnSe<sub>2</sub>是一個不錯的低維度材料。我們針對 SnSe<sub>2</sub>進行量測，經過實驗證實量測出 hole-hole interaction 以及 Weak Localization 的現象，這些都是超導的特性的性質。

Since the 2010 Nobel Prize in physics, atomic layer graphene and the 2016 Nobel Prize for physics topology, low dimensional novel electronic phase have become the major topic in the field of materials, and many scientists are deeply interested in them. Graphene which owns the thickness of 0.2 ~ 0.3 nm and a resistivity of  $10^{-6} \Omega\text{-cm}$  illustrate the amazing discovery, and scholars are looking forward to finding more materials similar to graphene. SnSe<sub>2</sub> owns a 0.9 eV indirect band gap semiconductor and is widely produced on earth. We have studied the properties of SnSe<sub>2</sub>, such as semiconductor, two-dimensional materials and transistors. We found that SnSe<sub>2</sub> is a good low-dimensional material and have measured the verified the phenomena of hole-hole interaction and weak localization, which are important properties of superconductivity.

## 壹、前言

### 一、研究動機

2020 的 5G 逐漸闖進我們的生活中。而帶動 5G 發展的即為無線基地台和電子元件的快速發展。當 GaN 這寬能隙(WBG)半導體材料逐漸擴大其使用範疇時，比傳統的矽半導體材料更能夠承受高電壓、高頻率和高溫工作條件頓時使的新型材料有了用武之地。而半導體的發展迅速，在今年的半導體十大議題當中，半導體不僅結合先前所述的 5G 通訊，更與物聯

網、Machine Learning 做出結合，由此可知，半導體已逐漸成為現今科技主要結合的方向。而透過近年來與超導相關等討論，我們決定進行低維度新穎材料的量測，期望能夠發現當中超導現象及觀測其電性以及 WL。

## 二、研究目的

當超導材料的溫度降至超導臨界溫度時，將會發生電阻為零以及完全反磁的現象，當電流在材料之中流通時將不會有任何損耗，而完全反磁則能排除磁場使磁場無法通過該材料，其不僅可以運用於磁浮列車(利用低溫超導線線圈所製成大磁場低溫超導磁鐵，再利用磁鐵間的吸引、排斥力使得列車可以磁浮在軌道上運行)、風力發電(磁場強度提高，使發電效率提高)。而 Weak localization 則是一物理效應在低溫下發生的電子系統混亂。而在電子系統混亂下，電子運動是擴散性。電子並不會沿著直線移動，而會經歷一系列雜質的隨機散射，從而導致隨機遊走。我們目的即是發掘這種低維度材料是否有超導現象以及是否擁有弱局部效應，進而了解此材料與量子通訊的關聯性。

## 貳、研究方法與過程

### 一、實驗器材

			
燒杯	電磁攪拌加熱器	培養皿	丙酮

圖 1：相關實驗器材與藥品

### 二、分析儀器及軟體

(一)、Oxford triton 200

1.簡介：Triton 是擁有非常高製冷功率的大型無液氦稀釋製冷機，他專為滿足量子技術和凝聚態物理領域非常嚴苛的應用要求而設計。為低於 20 mK 的最低溫度和高達 14T 的磁場強度使其成為無液氦稀釋製冷機。

2.工作原理： $^3\text{He} - ^4\text{He}$  混合液體在 0.87 K 以下發生相分離，分成富  $^3\text{He}$  成分的濃相和貧  $^3\text{He}$  成分的稀相。 $^3\text{He}$  原子質量比  $^4\text{He}$  原子輕，所以濃相浮在稀相上。稀釋致冷利用的是混合液體的一個重要性質：即使到絕對零度，稀相中  $^3\text{He}$  原子的濃度仍保持在 6.4% 的固定數值。

3.量子傳輸：

我們量子傳輸主要使用此台儀器，利用低溫及高磁場進行傳輸。

傳輸電子在不同的自旋情況下，不停翻轉，造成傳輸電子的自旋方向是無法在一般電路中量出。為此我們在傳輸電子的自旋路徑上加入磁性使傳輸電子保持方向不改變。



圖 2(a)：oxford triton 200

(二)、lockin amplifier - SR830(鎖相放大器)

1.簡介:鎖相放大器被拿來量測由環境分離出來的訊號(交流電)，特點是可以從干擾極大的環境中分離出特定的頻率以供測量，有效濾除其他的信號的頻率分量，提取想要的信號幅值和相位，可用於測量微小的電流訊號。

2.使用:我們先利用 oxford triton 200 進行降溫，再利用 keithley 2000 加壓，最後利用 lockin amplifier - SR830 去測試 SnSe<sub>2</sub> 的弱局部效應，進行量子傳輸現象的量測，並觀察其特性。

<p>圖 2(b)lockin amplifier 的工作原理</p>	<p>圖 2(c)lockin amplifier-SR380</p>

### 3. keithley 2400、2000、213

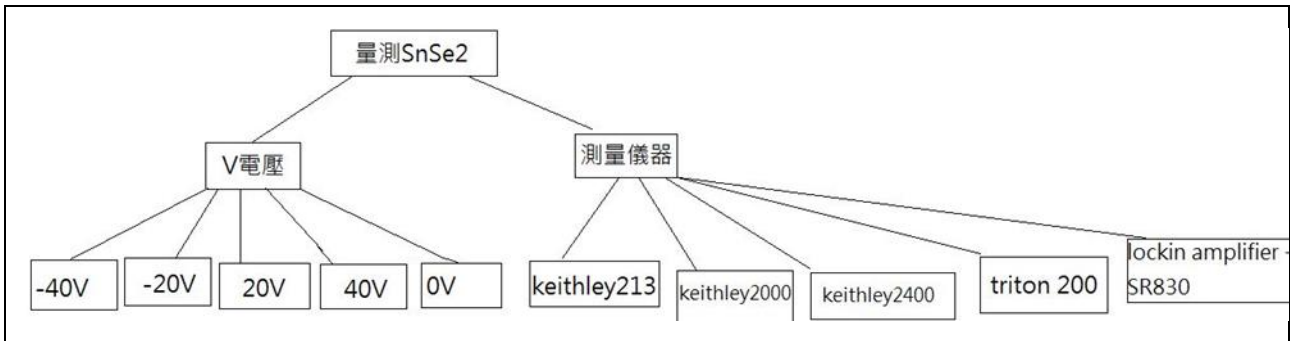
我們主要使用 keithley 2400 進行量測，當我們要測量其超導現象時則以 keithley213 進行測量。其工作原理及簡介詳細敘述於附錄一。

#### (三)、 SnSe<sub>2</sub>成分介紹

	<p>SnSe<sub>2</sub>(二硒化錫，分子量 276.63)，為 Dichalcogenides 元素化合物，其為反磁性固體且不溶於所有溶劑，具半導體的性能。其晶體是六角形結構，屬於間接能隙，其中 Sn 原子層是夾在兩個 Se 原子層之間，並形成穩定的三層結構。</p>
<p>圖 3(a) SnSe<sub>2</sub>二硒化錫電子結構圖</p>	

(四)、研究步驟

1. 研究流程設計如下



2. 實驗步驟：

(1) 拿取 SnSe<sub>2</sub> 樣本將其放置於測量處

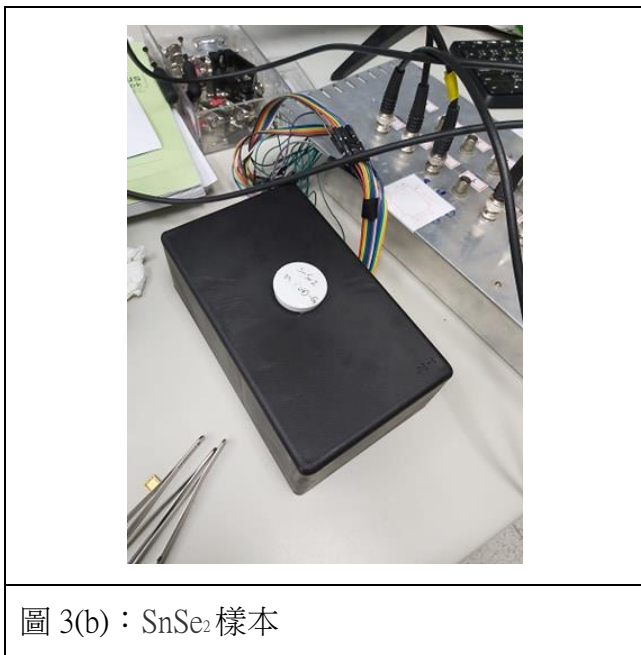


圖 3(b)：SnSe<sub>2</sub> 樣本

(2) 將其接上不同角位。

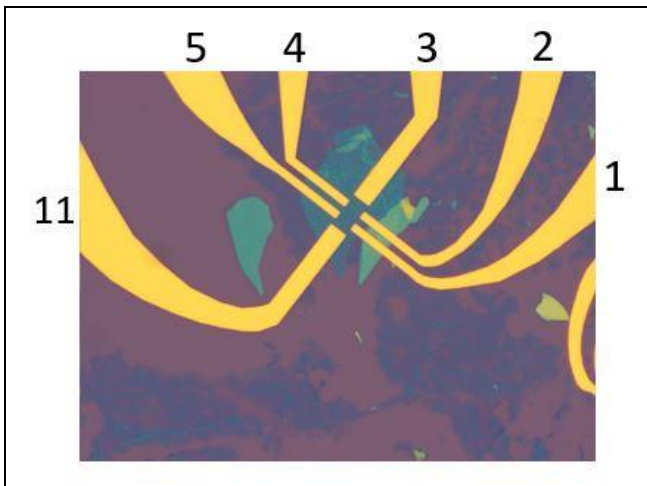


圖 3(c)：接上不同角位 SnSe<sub>2</sub>

(3)同時開啟 keithley 2400、2000、213 同時增加 triton.200 磁場至 12T。



圖 4(a)：keithley 2400、2000、213 測量

(4)確認溫度磁場控制得宜





圖 4(b)：triton 200 監控

(5) 得出結果數據圖

### 3. 理論分析方法

高一下學期的時候，有學過本校所開設的多元選修課程(量子力學隨筆)，知道如何利用 wien2k 第一原理計算軟體與 VASP，來計算各種固態物質的電子態密度(Density of states, DOS)等性質，這對於分析半導體材料，確認材料的性質，是一個很重要的工具。

所謂第一原理計算是指一切從最基本的電子組態著手，而解是基於量子力學原理，針對塊材而言，wien2k 這套軟體是使用科恩－沈呂九方程式(Kohn-Sham equation: KS equation)做密度泛函理論計算，因為牽涉到函數中的電子密度函數的變分原理，所以稱為密度泛函；KS equation 在密度泛函理論裡面指的是與真實體系相關的虛擬體系所滿足的薛定諤方程 (Schrödinger equation)。該虛擬體系中的粒子（通常是電子）在無相互作用的有效勢場中運動，粒子密度在空間各點均與真實系統相同。

KS equation 的公式如下：

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2$$

含有 N 個粒子的 KS 系統的電子密度則由下式給出：

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right) \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r})$$

VASP and Wien2k 軟體之計算邏輯如下：

- (1) 導入原子種類、晶格大小、原子最大邊界等數據，判斷對稱群並初始化。
- (2) 執行自洽計算並且最達到能量最小化收斂，找尋最穩定之電子密度函數。
- (3) 導出檔案，計算 DOS (Density of states)，完成電子態密度計算
- (4) DOS 繪圖分析。(詳細細節如附錄)

## 參、研究結果與討論

### 一、SnSe<sub>2</sub> 半導體特性

我們首先必須確認 SnSe<sub>2</sub> 是否擁有半導體特性。從圖 3(a) 當中可以得知此樣品之 I-V 斜率呈線性，同時其電壓尚未大到出現飽和特性。經過觀察我們得出溫度越高，電阻越低，驗證半導體特性

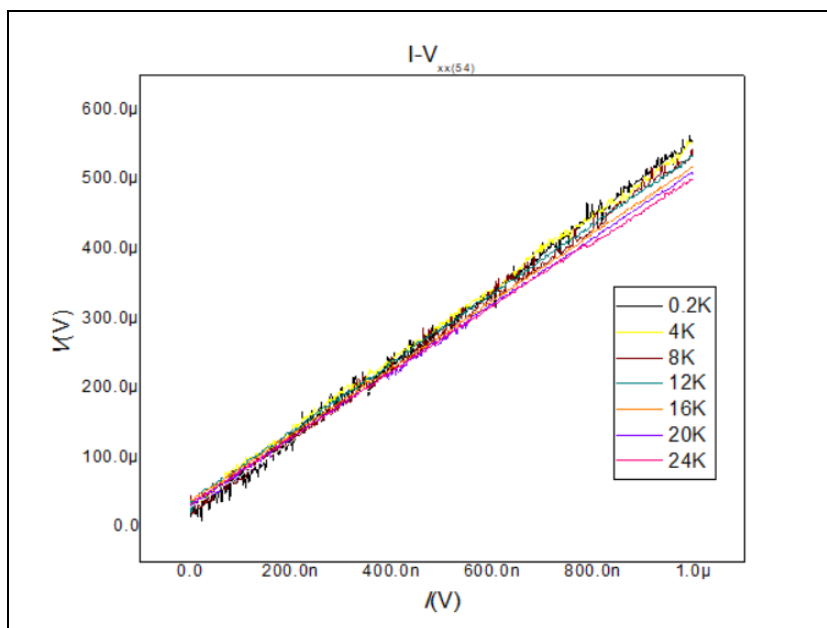
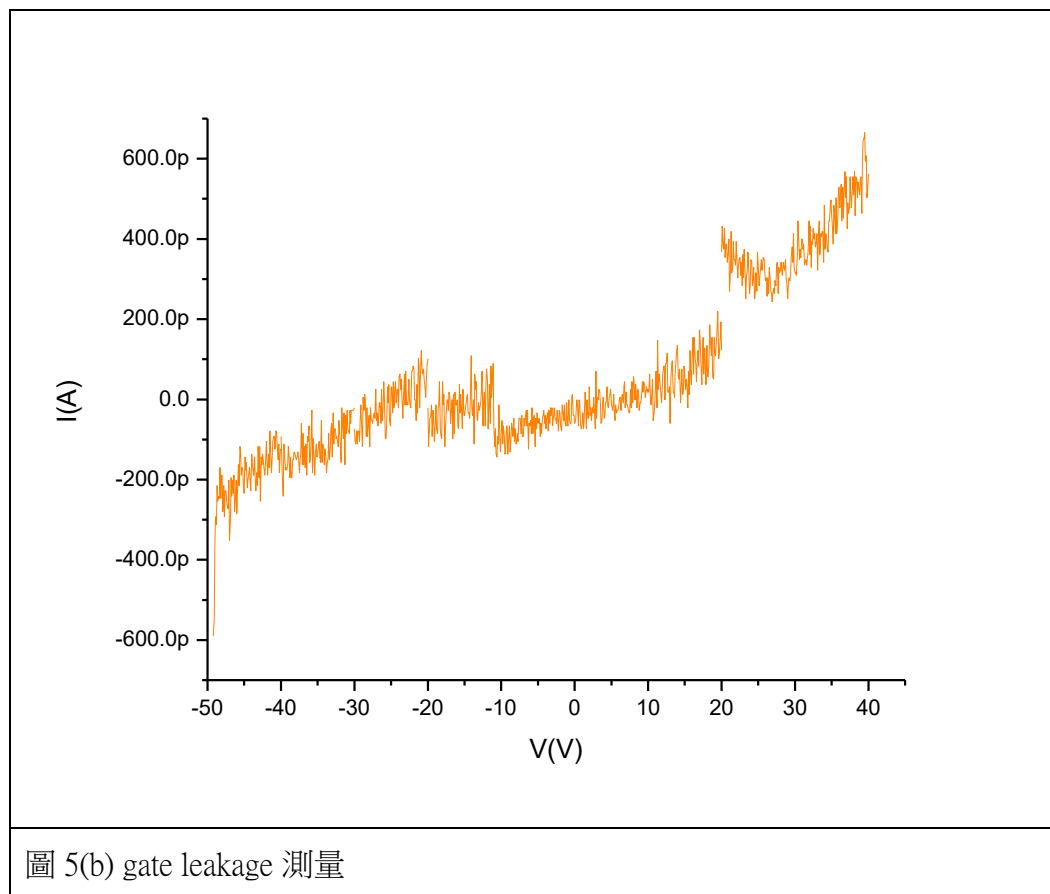


圖 5(a) I<sub>D</sub>-V<sub>D</sub> 變溫量測

### (一) Gate Leakage

為了確認不會發生漏電情形，我們測量 I-V 圖(圖 5(b))發現當我們電壓下至-48V 時發生了 Gate leakage 的現象，Gate leakage 為一種量子現象，其中可移動的電荷載流子（電子或空穴）通過絕緣區域。隨著絕緣區域厚度的減小，洩漏量呈指數增長。在重摻雜的 P 型和 N 型半導體之間的半導體結之間也可能發生。為了避免此狀況，我們打算以 40V 至- 40V 電壓來測量(控制於 $\pm 40V$ )，而當我們的趨勢及數據已經得到，我們再往更大範圍電壓掃，物理意義不大，其次二維材料元件可能因為超過極限的電壓導致元件的風險。



## (二)查找電壓優劣

從圖 5(c)我們發現當  $V_{sd} = 50mV$  時變化十分明顯，反之  $V_{sd} = 1mV$ ，幾乎沒有任何變化。

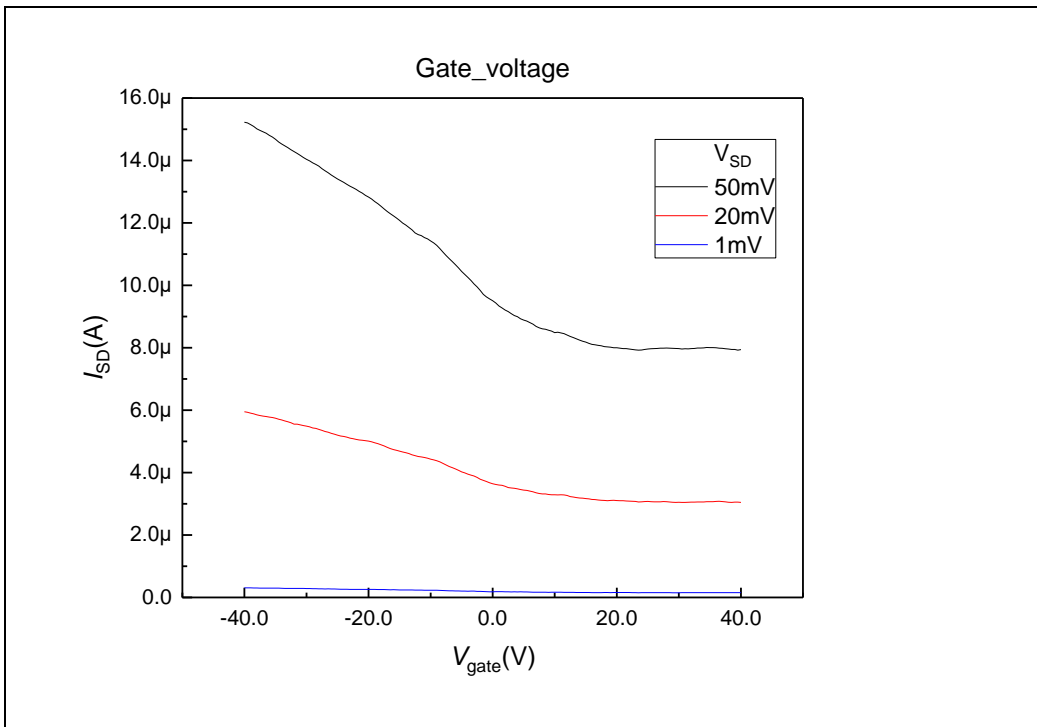


圖 5(c)Gate\_Voltage

(三)改變 Gate 測量  $I_D-V_D$

由圖 5(d)我們可以得知改變電晶體之電壓時，I-V 斜率會呈現線性，但是其電壓尚未大到出現飽和特性。當我們的 Gate voltage 越小，電阻越低，驗證 p-type 的趨勢。

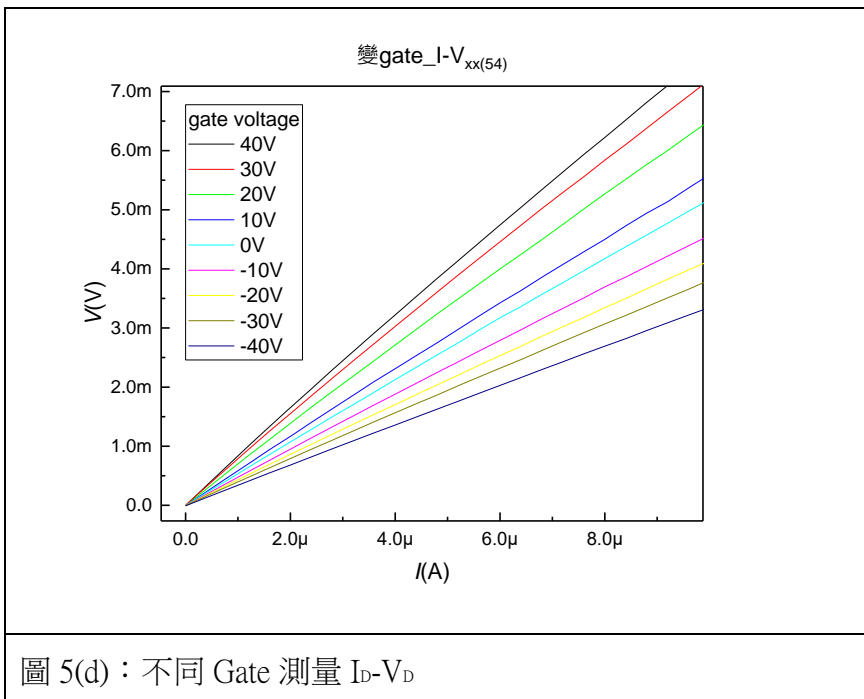


圖 5(d)：不同 Gate 測量  $I_D-V_D$

(四)改變溫度測量  $I_D-V_D$

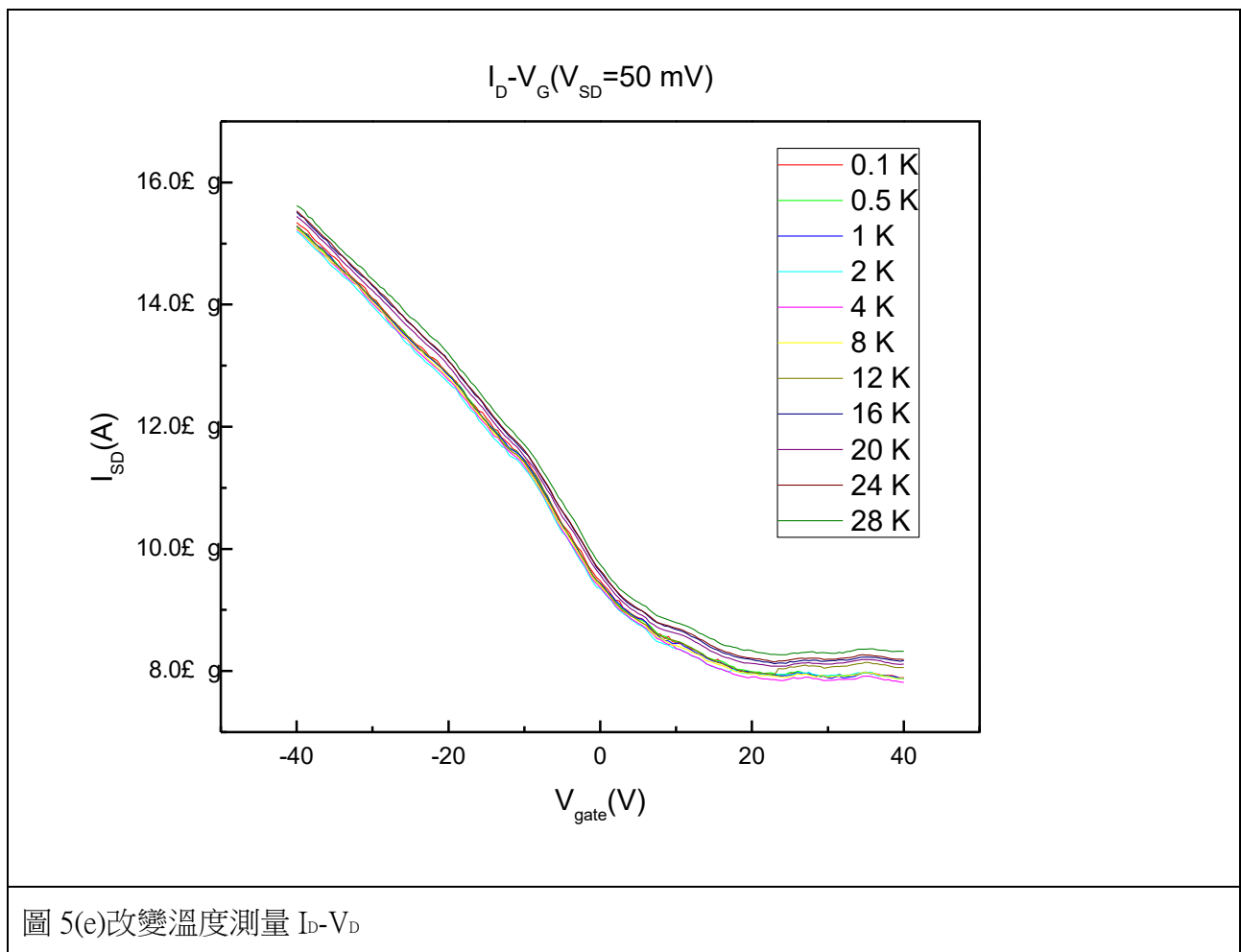
當我們展示 SnSe2 的 transistor 特性，on/off ratio  $\sim 2$  出現了兩個主要原因：

其一：SnSe2 樣品太厚。當  $V_G > 0$  時，曲線會趨於平緩，但仍有大量電流通過，我們推測是因為最大空乏厚度的關係。由霍爾效應推估  $\Delta E (10^6 \text{ eV})$  是遠小於 SnSe2 的能隙 (1.0 eV)，所以可以直接將能隙與載子濃度帶入公式：

$$W_m \sim \frac{2\epsilon_r \epsilon_0 \Phi_{inv}^2}{eN_d} \quad (1)$$

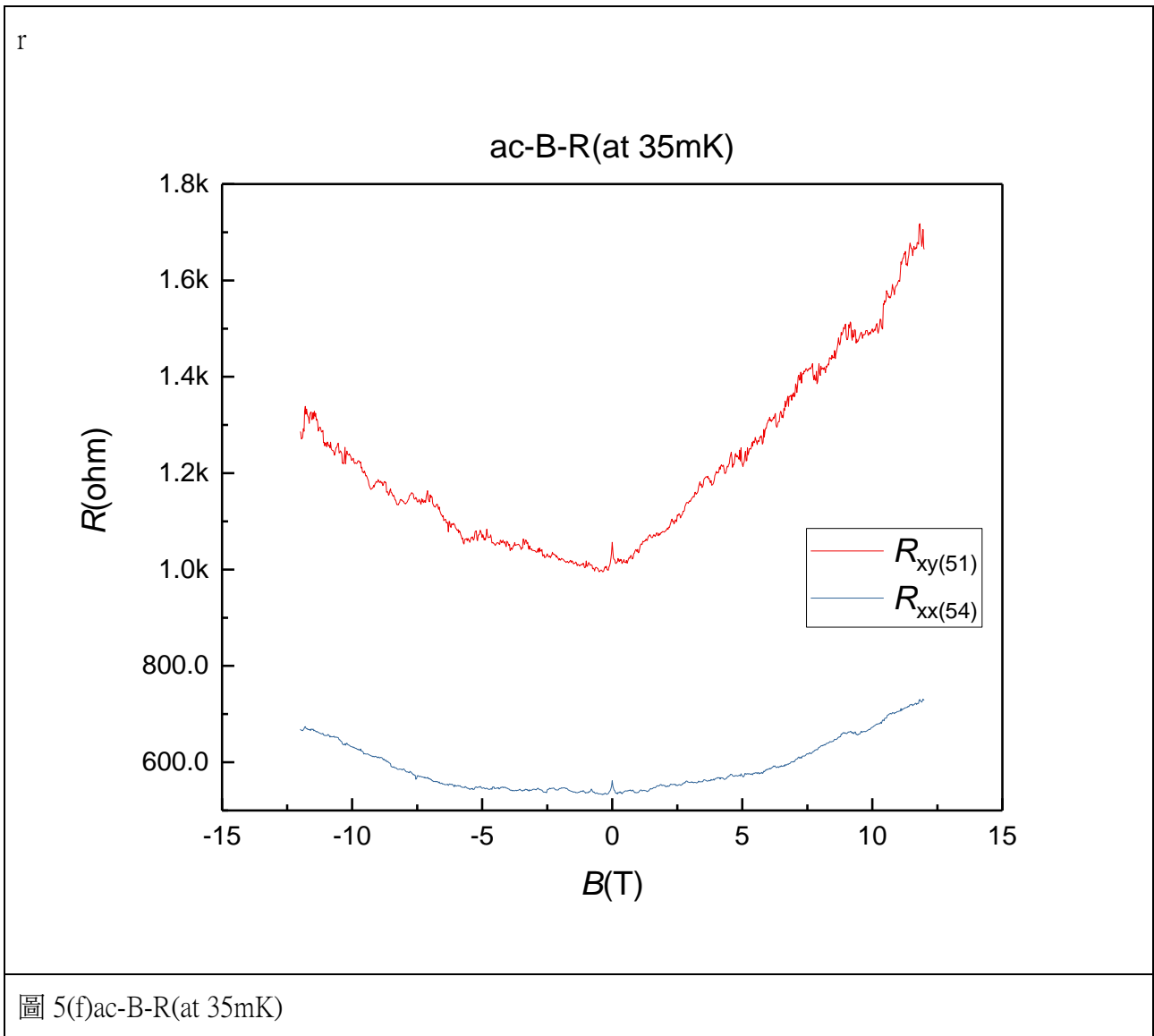
可推估最大空乏厚度為 5.4 nm，小於樣品厚度 (10 nm)，故導致此圖斜率過小。

其二：Back gate 電容太小，我們沒有辦法有效調控樣品的載流子密度 (carrier density)。



### (五) 霍爾效應

我們由圖 5(f) 量得其 mobility 以及 carrier density 但我們推論應該是我們的 mobility 太低、carrier density 太高導致無法觀測到量子霍爾效應。



而從圖 5(g)以及圖 5(h)我們可以看到  $R_{xx}$  與  $R_{xy}$  相加相減除以二已得到不同的分量，從圖 5(g)我們可以得到 carrier density，並進一步得到 mobility。

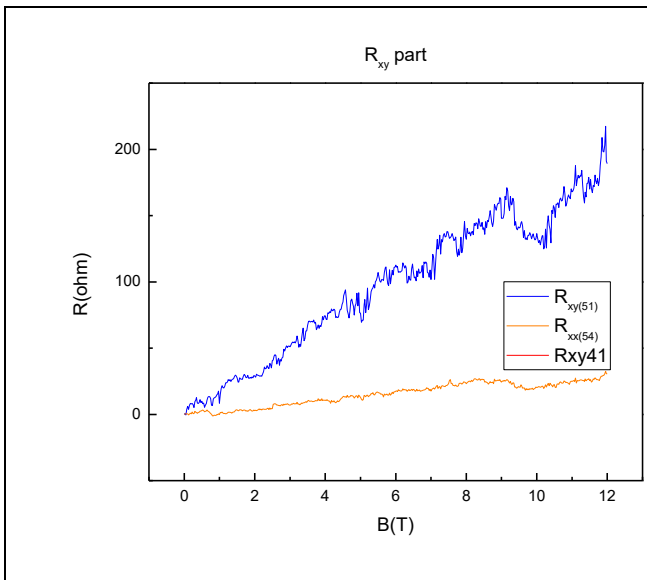


圖 5(g)Rxy part

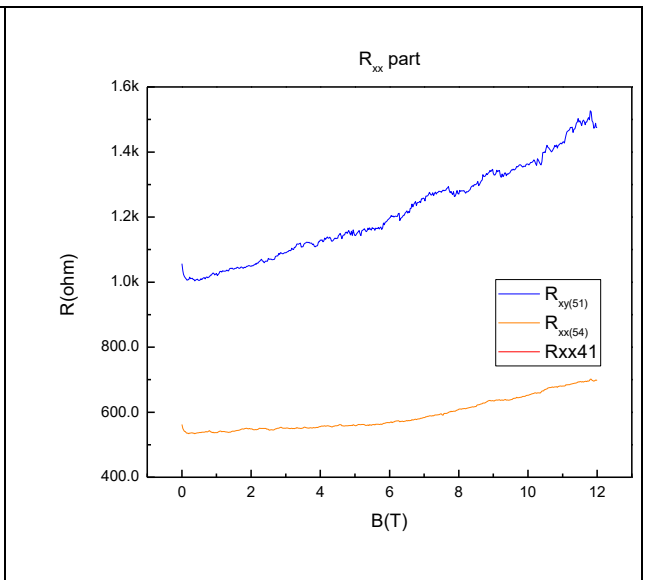


圖 5(h)Rxx part

### (六)Weak Localization

我們於圖 5(f)發現在 0B(T)時，發現於低場低溫區段出現負磁阻的 Weak localization 現象，在溫度升高時效應減弱。當 Gate voltage 越負時 Weak localization 越明顯，跟載子濃度與 mobility 的上升有關。

我們於圖 5(i)至 5(m)進行 40V~40V 的測量 Weak Localization。

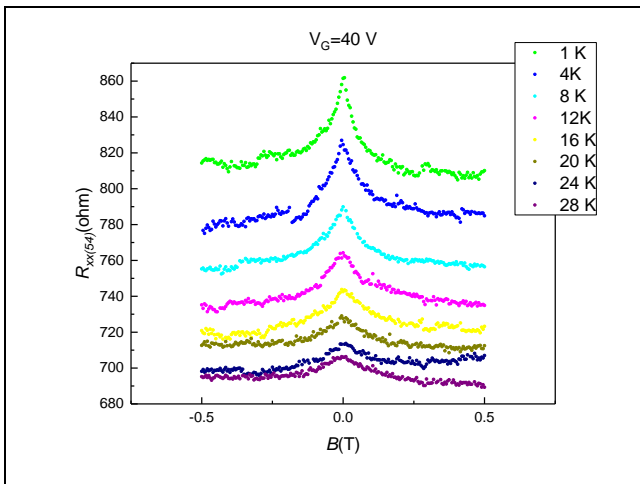


圖 5(i)不同溫度 40VWeak Localization

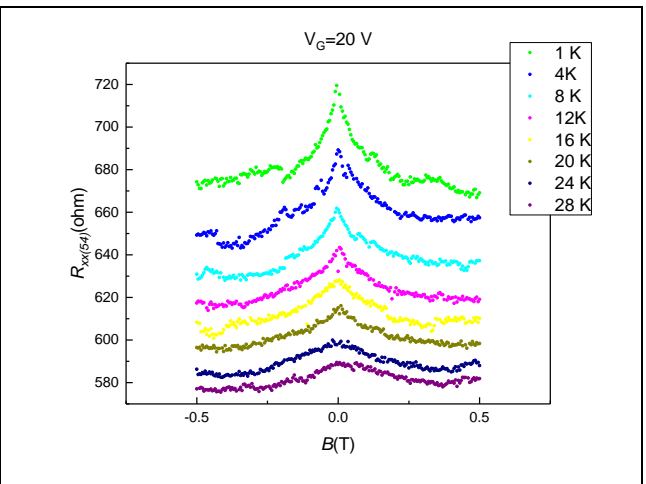


圖 5(j)不同溫度下 20VWeak Localization

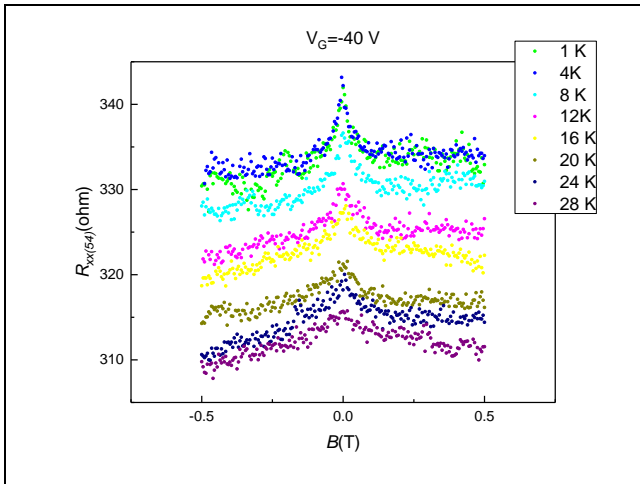


圖 5(k)不同溫度下-40V Weak Localization

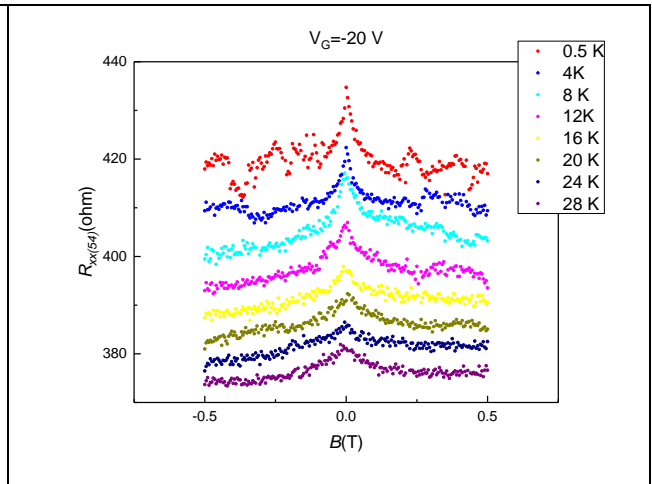


圖 5(l)不同溫度下-20V Weak Localization

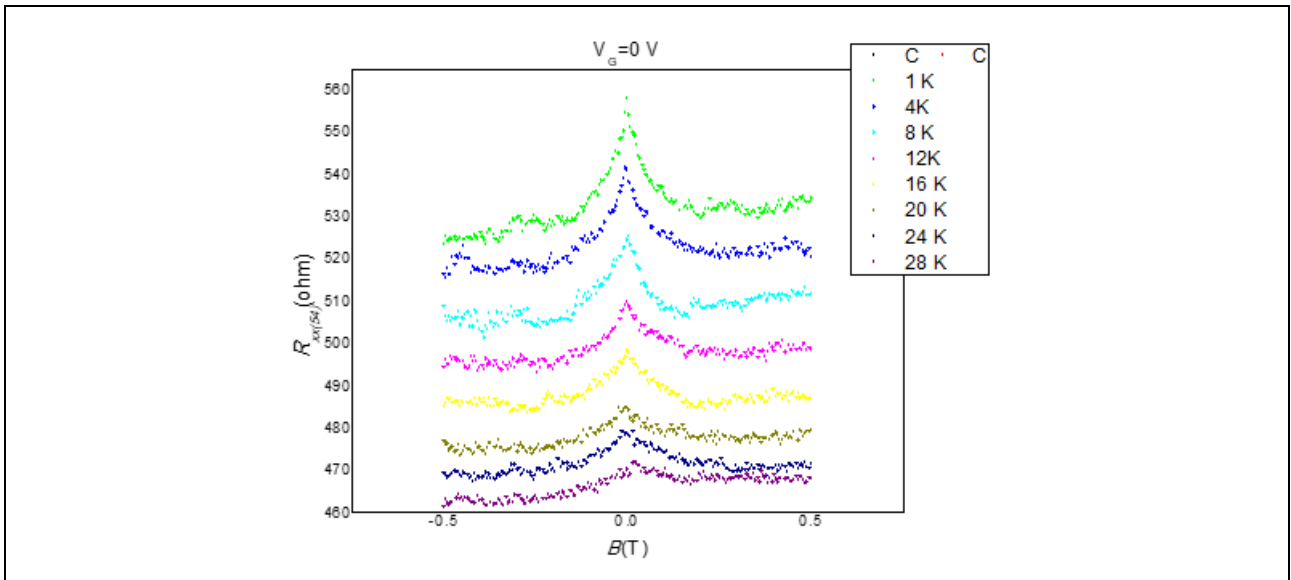


圖 5(m)不同溫度下 0 V , Weak Localization

## 二、第一原理計算分析

### (一)利用 VASP 計算軟體分析 SnSe<sub>2</sub>

表 1: SnSe<sub>2</sub> 理論計算之參數及計算能隙結果

Compound	Bulk-SnSe <sub>2</sub>	2D-SnSe <sub>2</sub>
Structure type	Trigonal	Trigonal 三方晶系
Space group	三方晶系 164:P3m1 /3m	164:P3m1/3m
Lattice constant (unit: Å)	a = 3.81	a = 3.81



	b = 3.81 c = 6.79	b = 3.81 c = 26.79
K- mesh	(8, 8, 5)	(6, 6, 1)
能隙 (Energy gap , eV)/LS-coupling	0.578/0.540 (Indirect band gap)	0.936/0.923 (Indirect band gap)

(二) XRD 分析結構

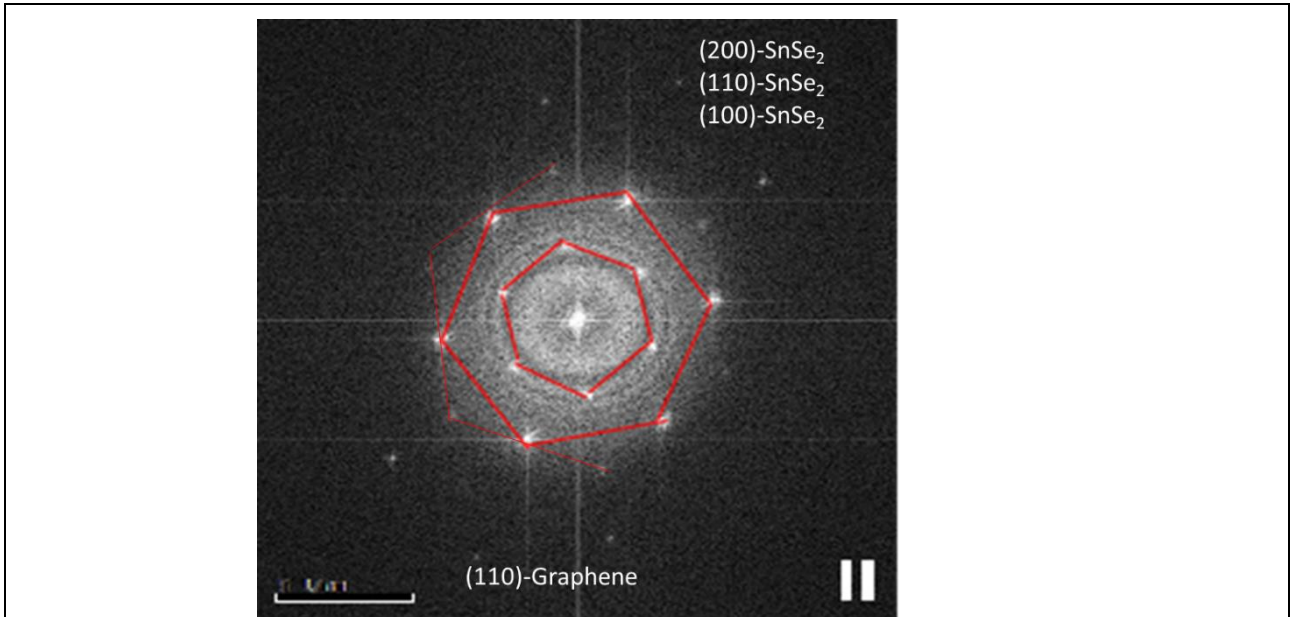
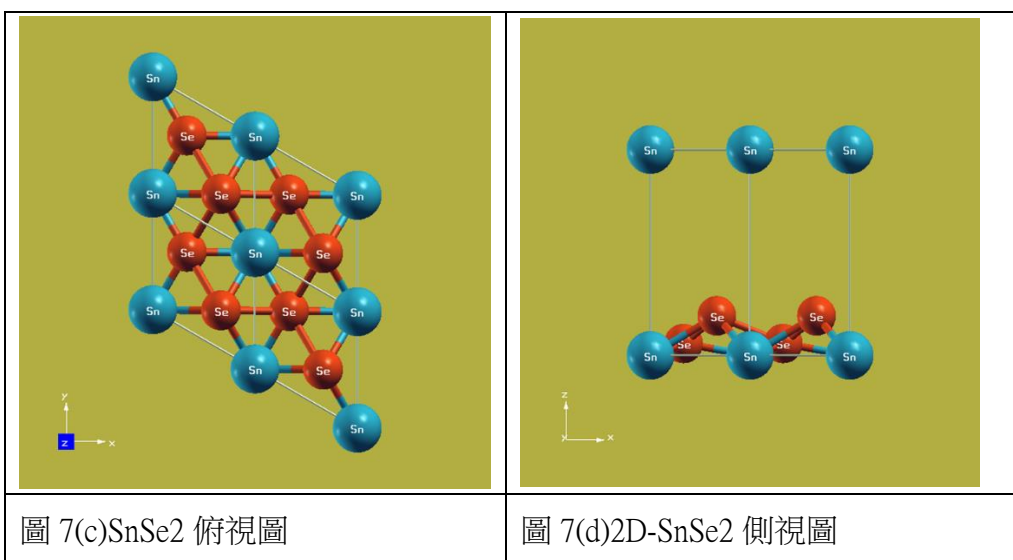
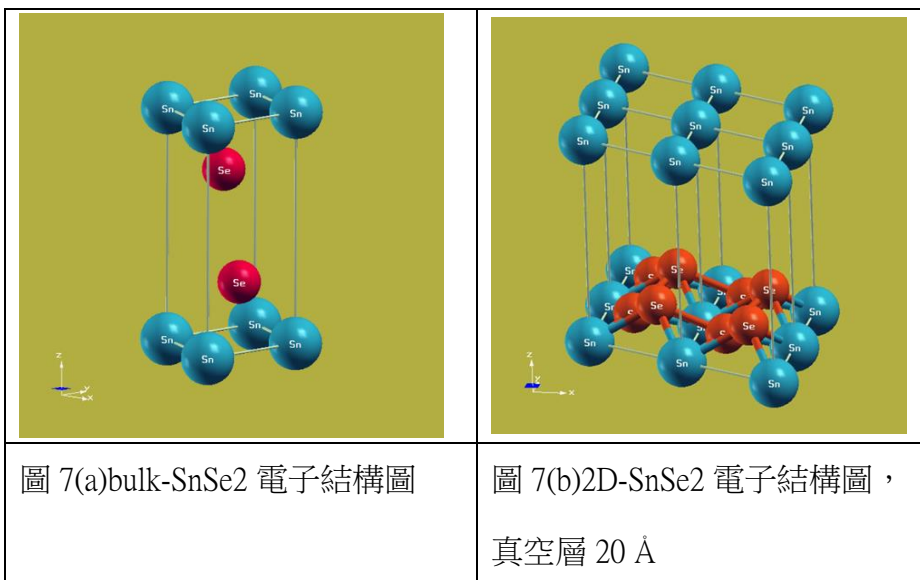


圖 6 考慮 SnSe<sub>2</sub> 長在 Graphene ， 2D-SnSe<sub>2</sub> XRD 實驗繞射圖(Epitaxial growth of SnSe<sub>2</sub> on Graphene:)，得到晶格常數 a = 3.81 Å 。

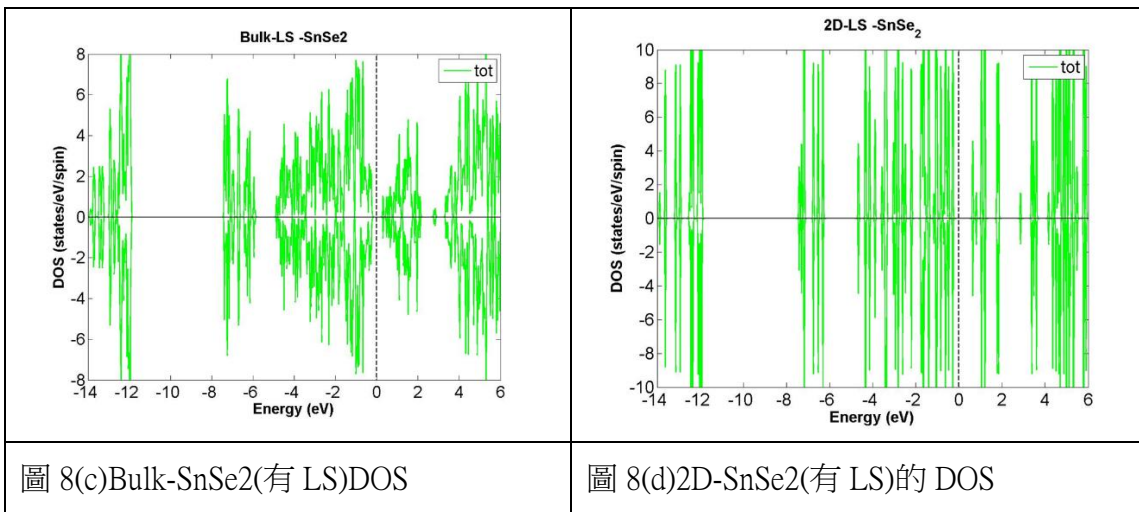
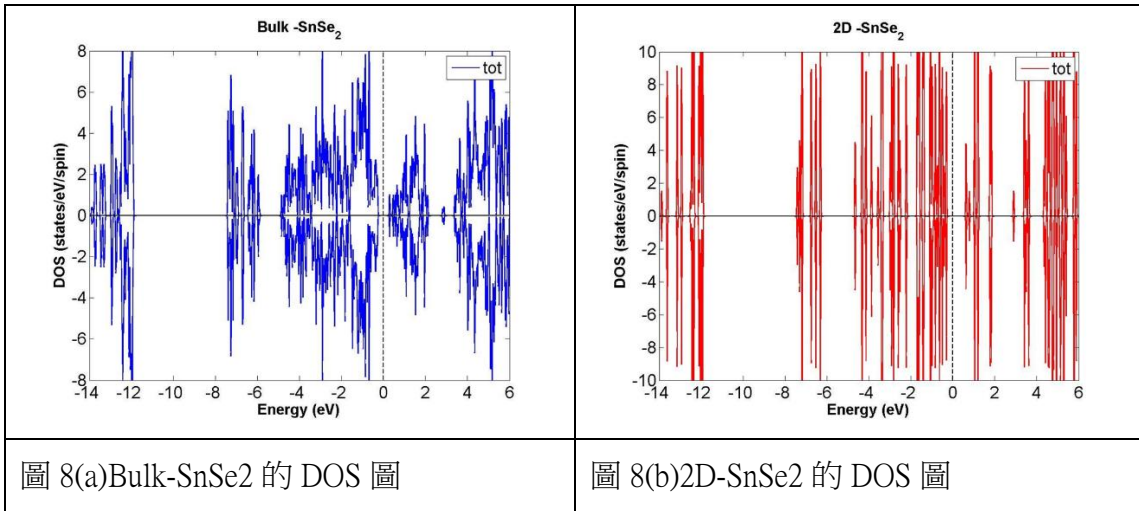
(三).SnSe<sub>2</sub> 電子結構

SnSe<sub>2</sub> 為 Trigonal 三方晶系。 Sn: 原子序 50，電子組態 [Kr]4d<sup>10</sup>5s<sup>2</sup>5p<sup>2</sup>，Se: 原子序 34，電子組態 [Ar] 3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup>4p<sup>4</sup>。因為 Sn 原子序 50，偏重，所以要考慮角動量耦合(LS-coupling)的計算。



(四)電子態密度圖(Density of state: DOS 圖)

有兩類:塊材(Bulk)跟二維(2-D)材料，分別為 圖 7(a) Bulk-SnSe2，圖 7 (b) 2D-SnSe2。圖 8(a) 中可以看到，在塊材時 SnSe<sub>2</sub>已有明顯的 Indirect band gap 為 0.578eV，是屬於小於 1eV 為半導體材料，而與圖 8(b)二維材料進行比較，我們可以發現 Indirect band gap 為 0.936 eV，band gap 被拉開了。圖 8(c)考慮角動量耦合(LS-coupling)，Bulk-SnSe<sub>2</sub> 的 Indirect band gap 為 0.540 eV，圖 8(d)考慮角動量耦合(LS-coupling)，2D-SnSe<sub>2</sub> 的 Indirect band gap 為 0.923 eV，相較於沒有角動量耦合，都稍微縮小。



## 肆、結論與應用

這個實驗讓我們看到 2D-SnSe<sub>2</sub> 長在 Graphene 上的各種性質。我們在 DOS 圖中確認了兩材料為半導體，能隙明顯皆小於 1eV，所以在界面處有機會產生 Junction，然後我們利用 XRD 繞射試驗找出結構參數，經過多方資料比對，於 Trigonal 三方晶系。再來我們利用 wien2k 和 VASP 軟體來進行計算，根據 DOS 圖，對比塊材跟 2 維材料。我們可以發現，band gap 被拉開了，都有相似的結果，考慮角動量耦合(LS-coupling)，2D-SnSe<sub>2</sub> 的 Indirect band gap 為 0.923 eV，相較於沒有角動量耦合，都稍微縮小。而當我們測量完電晶體不同電壓及不同溫度時，我們發現其電阻均沒有達到 0，推測其沒有超導現象。透過量測場效電晶體，經過確認其 Gate leakage 以及選定電壓，我們在改變 Gate 之下量測 ID-VD 以及 ID-VG 我們能夠推

估其 p-type 之趨勢，雖然因 SnSe<sub>2</sub> 厚度超過最大空乏厚度，我們 ID-VG 並沒有明顯的斜率變化。但我們透過霍爾效應，證實了 weak localization 的存在，量測其位於不同 VG 以及溫度之比較發現其位於零磁場時，溫度越接近絕對 0K 時，其弱局部現象越加明顯。

## 伍、參考文獻

### 一、未來展望

(一)再更加確認我們的材料的電性與量子現象，未來可以做更多其餘的實驗去找其他的量子現象。

(二)嘗試其他半導體材料，希望可以找出有量子霍爾效應，或有著奇特能帶分佈材料。

(三)完整測量材料的弱局部效應，我們想知道有關弱局部效應在不同材料會出現什麼不同性質。

(四)將電性量測做得更加完善。

(五)去量測文獻中發現的特性，看看是否吻合。

### 二、參考資料

(一)Chiashain Chuanga, Masaaki Mineharub, Masahiro Matsunagabc, Chieh-Wen Liude, et al .Conductance interference effects in an electron-beam-resist-free chemical vapor deposition graphene device sandwiched between two h-BN sheetsAuthor links open overlay panel:2019.Pages 238-243

(二)Haifeng Qiao ,Yadav P. Kandel, Sreenath K. Manikandan, Andrew N. Jordan, Saeed Fallahi, et al,Conditional teleportation of quantum-dot spin states .Nature Communications volume 11:2020

(三)He Bin,He Xiong,Liu Guo-Qiang,Zhu Can,Wang Jia-Fu,et al. Memristive and magnetoresistance effects of SnSe<sub>2</sub>

(四)Jyun-Hong Chen.Observation of Wigner crystal phase and ripplonlimited mobility behavior in monolayer CVD MoS<sub>2</sub> with grain boundary .Nanotechnology

(五)Yi Tseng . Surface Characterization of 3-D Dirac Semimetal Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> Using a Combined Scanning Tunneling Microscopy and First-principles. Calculation Approach:2016

(六)Yi-Yun Yao. Investigation of SnSe<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub>/h-BN Heterostructure field-effect transistors with graphene contacts:2019

(七) 材料結構網站，SnSe<sub>2</sub> : <https://materialsproject.org/materials/mp-665/>

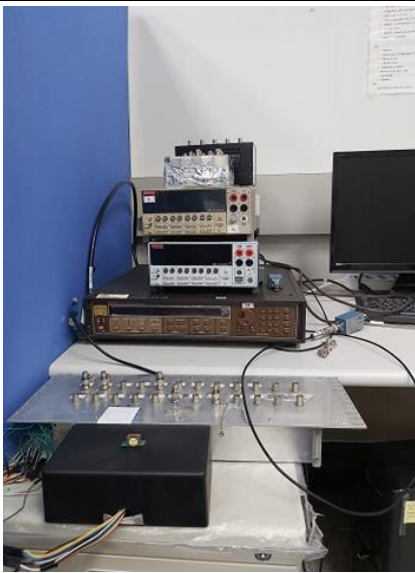
## 附錄

### 附錄一

keithley 2400、2000、213。

(一)簡介：提供四象限精密電壓和電流輸出/負載，以及與量測耦合的電源/負載。每一種 SMU 儀器都同時是高度穩定的直流電源。以 7 位半和 8 位半數位萬用電錶所具備的高速、低雜訊類比/數位轉換器技術為基礎，此一數位萬用電錶可提供速度和準確度。為了取得更大的彈性，後面板內建的卡槽可容納額外的多工器以提供各種多點量測應用。

(二)主要功能為測試半導體裝置，測試電路保護裝置，測試光電子學元件並用於加速壓力測試，我們主要使用 keithley 2400 進行量測，當我們要測量其超導現象時則以 keithley213 進行測量。



附圖 1：最上方為 keithley 2000，中間為 keithley 2400，下方則為 keithley 213

## 附錄二

### 第一原理計算

(一)簡介: 所謂第一原理計算是指一切從最基本的電子組態著手，而解是基於量子力學原理，針對塊材而言，wien2k 這套軟體是使用科恩－沈呂九方程式(Kohn-Sham equation: KS equation)做密度泛函理論計算，因為牽涉到函數中的電子密度函數的變分原理，所以稱為密度泛函；KS equation 在密度泛函理論裡面指的是與真實體系相關的虛擬體系所滿足的薛定諤方程

(Schrödinger equation)。該虛擬體系中的粒子（通常是電子）在無相互作用的有效勢場中運動，粒子密度在空間各點均與真實系統相同。

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2$$

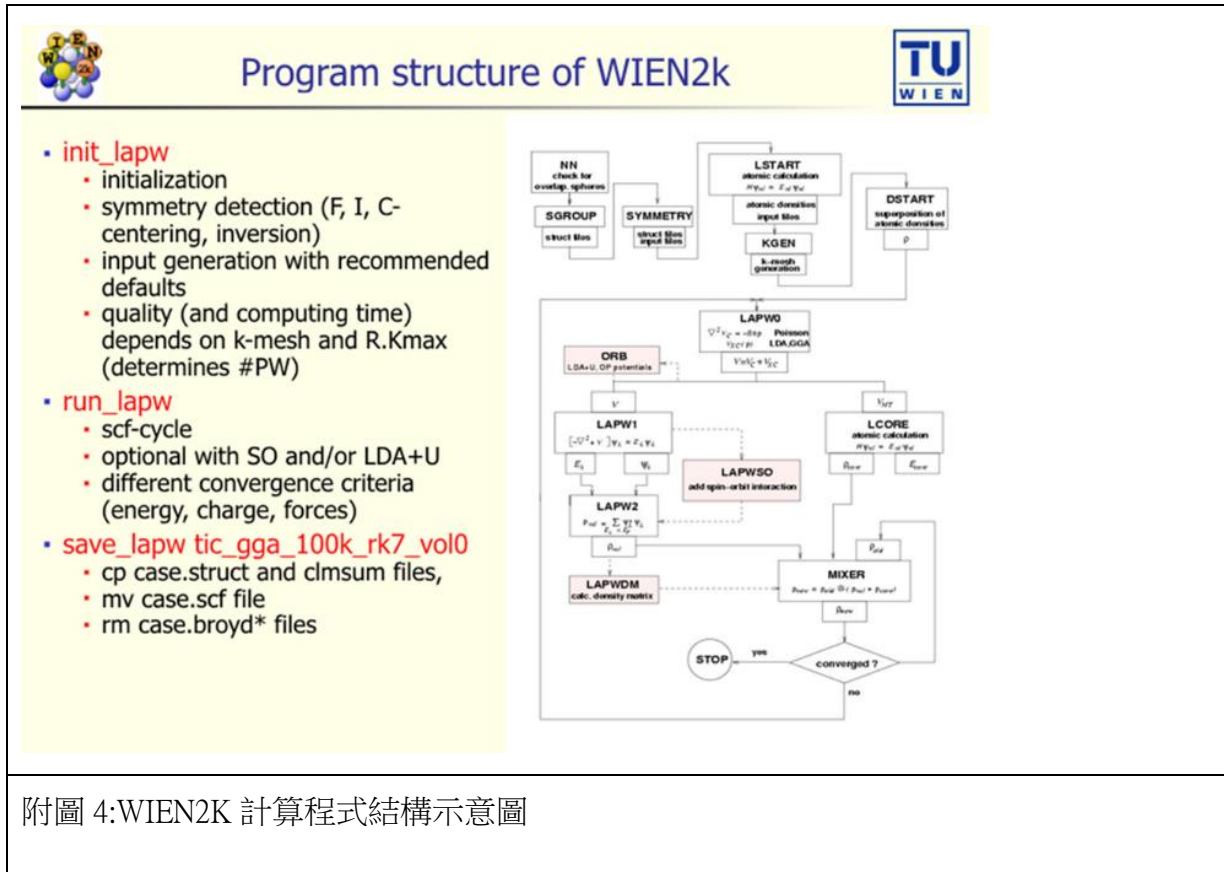
附圖 2:KS equation 的公式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right) \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r})$$

附圖三:含有 N 個粒子的 KS 系統的電子密度由上式給出

## (二)計算邏輯

- 1.導入原子種類、晶格大小、原子最大邊界等數據，判斷對稱群並初始化。
- 2.執行自洽計算並且最達到能量最小化收斂，找尋最穩定之電子密度函數。
- 3.導出檔案，計算 DOS (Density of states)，完成電子態密度計算。
- 4.DOS 繪圖分析，看看理論與實際相差多少。



## 【評語】 160030

本作品對  $\text{SnSe}_2$  二硒化錫進行了諸如半導或超導性質，二維材料，電晶體特性等研究。對於儀器、材料、元件製備與計算分析等方面，熟稔有限。相較於本屆參展的優秀作品而言，本件對於主題與內容的熟悉度、數據嚴謹性與分析完整性仍有進步與充實的空間。