

[收藏本站](#)[设为首页](#)[English](#) [联系我们](#) [网站地图](#) [邮箱](#) [旧版回顾](#)

面向世界科技前沿，面向国家重大需求，面向国民经济主战场，率先实现科学技术跨越发展，率先建成国家创新人才高地，率先建成国家高水平科技智库，率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



官方微博

官方微信

[首页](#) [组织机构](#) [科学研究](#) [人才教育](#) [学部与院士](#) [资源条件](#) [科学普及](#) [党建与创新文化](#) [信息公开](#) [专题](#)[搜索](#)

首页 &gt; 科研进展

## 中国科大等在电子超快相干转移动力学及电子-空穴复合的 微观机理研究中取得进展

文章来源：中国科学技术大学 发布时间：2018-03-26 【字号：[小](#) [中](#) [大](#)】[我要分享](#)

中国科学技术大学教授赵瑾研究组与美国匹兹堡大学教授Hrvoje Petek合作，在金属纳米颗粒与石墨界面的电子超快相干转移及掺杂半导体中电子-空穴复合的微观机理研究中取得新进展。

通常，金属/半导体（半金属）异质界面的电子转移需要首先激发热电子，然后热电子跨越界面势垒（例如肖特基势垒），进而完成电子转移。然而，热电子的寿命很短，势垒的存在极大地限制了电子转移的效率。高效的电子转移通常依赖于特定的物理过程，例如质子耦合电子转移、共振相干等。基于超快光学的实验方法例如瞬态光谱、和频光谱等被广泛用来表征电荷转移，但目前还没有实验方法可以在电荷转移的超快过程中直接描述相干这一物理过程。Hrvoje Petek与赵瑾合作，通过发展多维相干时间分辨光电子能谱技术与第一性原理计算的结合，证实了Ag/Graphite界面超快电荷转移过程的相干性。实验发现，Ag在石墨表面吸附所产生的占据界面态中的电子，在双光子激发下，转移到石墨的未占据层间态。通过对三维时间分辨率的傅里叶变换分析结合跃迁偶极矩的理论计算，获得了界面电子转移过程中共振相干的直接证据，并揭示这一电子转移过程在 $<10$  fs超快时间内完成。相关成果发表在Physical Review Letters上，Hrvoje Petek与赵瑾教授为共同通讯作者，第一作者为博士谭世俊。

此外，赵瑾研究组研究了半导体杂质掺杂导致的激发态电子-空穴的复合问题。大量理论工作提出，半导体材料中离子掺杂可以改变半导体的能隙与光吸收性质，可用于提高半导体材料太阳能转化效率。然而，离子掺杂在改变半导体能隙的同时也引入了可能的电子-空穴复合中心，什么样的掺杂会导致电子-空穴的迅速复合，仍未有研究从第一性原理计算的角度给出清晰图像。赵瑾研究组以掺杂TiO<sub>2</sub>为原型材料，利用自己发展的Hefei-NAMD程序研究了掺杂半导体中的电子-空穴复合动力学及其物理机制。研究发现，掺杂离子引入的杂质声子的局域程度是决定电子-空穴复合的关键因素。以TiO<sub>2</sub>为例，非饱和共掺杂（如Cr-N掺杂）会引入非常弥散的杂质声子，与周边的TiO<sub>2</sub>原子有很强的耦合，导致电子-空穴在几个皮秒之内复合。相反，饱和共掺杂（如V-N掺杂）引入的杂质模式非常局域，与周边的TiO<sub>2</sub>原子耦合很弱，电子-空穴复合的时间尺度可以保持在纳秒量级。更进一步的计算表明，TiO<sub>2</sub>中电子-空穴复合的时间尺度与杂质声子的局域度存在指数关系，因此杂质声子的局域程度可以作为一个判断半导体材料中电子-空穴复合时间的重要因子。相关研究成果发表在Nano Letters上，物理系博士生张丽丽与微尺度物质科学国家研究中心博士郑奇靖为共同第一作者，赵瑾为通讯作者。

上述研究工作得到了科技部、国家自然科学基金委、中科院等的资助。

论文链接：[1](#) [2](#)

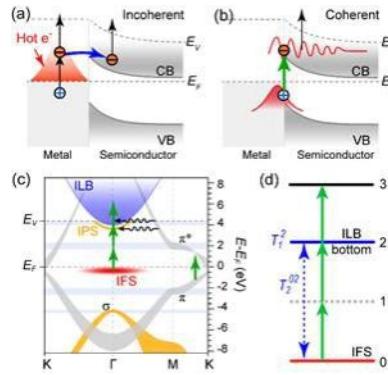


图1. Ag/Graphite界面超快相干电荷转移

### 热点新闻

#### 中国散裂中子源通过国家验收

中科院“百人计划”“千人计划”青年项...

我国成功发射两颗北斗导航卫星

中科院与青海省举行科技合作座谈会

“4米量级高精度碳化硅非球面反射镜集成...

中科院与天津市举行工作会谈

### 视频推荐

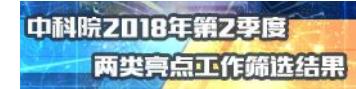


【新闻联播】“率先行动”  
计划 领跑科技体制改革



【中国新闻】楚雄禄丰发现  
恐龙新属种——程氏星宿龙

### 专题推荐



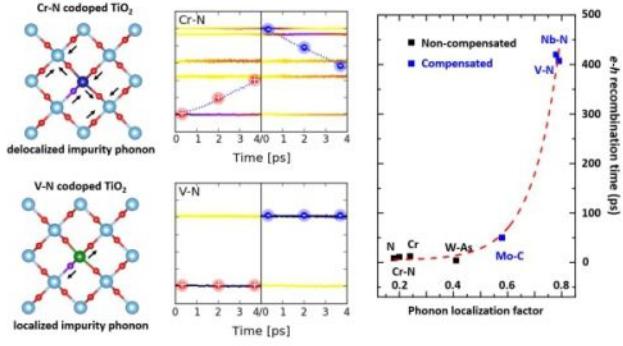
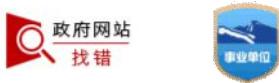


图2. 声子局域度影响电子-空穴复合时间

(责任编辑: 侯茜)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们  
地址: 北京市三里河路52号 邮编: 100864