

薄膜的均匀压电响应。在厚度为 1 nm 时,测得压电响应系数为 $d_{33}=1 \text{ pm/V}^{[39]}$,这种压电性质与厚度有着紧密的关联。

也有不少的理论报道^[40, 41]证明其他不具有中心对称的二维碲烯具有压电性能。例如,由于具有 $P3_121$ 空间群结构和 D_3^4 对称的二维 Te 分子具有高度定向极化和非中心对称性,这种二维 Te 分子展现出较大的压电性,同时具有自发极化行为^[40]。单层 Te 的 $d_{11}=0.03 \text{ pm/V}^{[40]}$,双层 Te 的 $d_{11}=1.64 \text{ pm/V}$, $d_{33}=15 \text{ pm/V}^{[40]}$ 。此外,压电系数可以通过应变来调节^[40]。 e_{11} 和 d_{11} 与应变之间具有近似线性的关系,这意味着 Te 在高密度柔性力传感器中具有潜在的应用前景,可以识别拉伸和压缩力。在资料[42]中也观察到应变诱导单层碲烯发生相变产生巨压电性,即原本具有中心对称结构的 Te 没有压电性,经过小于 1%的应变后,平均压电系数增大到 $82 \times 10^{-10} \text{ C/m}$ 。另外,双层碲烯的压电系数明显优于单层材料的压电系数,说明压电系数与材料的厚度有很强的依赖性。综上所述,碲烯具有自发极化的压电性能,碲烯为构建强健、可靠、高密度的神经形态计算逻辑存储芯片提供了平台^[40]。具有压电性质的碲烯的相关参数如表 5.3 所示。

表 5.3 几种具有压电性质的碲烯的参数汇总

(括号里面的 ML 表示单层结构, TL 表示双层结构。)

化合物	空间群	点群对称	e_{ij} (10^{-10} C/m)	d_{ij} (pm/V)
$\alpha\text{-Te}$			$82^{[42]}$	$d_{33}=1^{[39]}$
$\text{Te}^{[40]}$	$P3_121$	D_3^4	$e_{11}=80(\text{ML})$ $e_{31}=2(\text{ML})$ $e_{11}=13280(\text{TL})$ $e_{31}=592(\text{TL})$	$d_{11}=0.03(\text{ML})$ $d_{11}=1.64(\text{TL}),$ $d_{31}=0.04(\text{TL})$ $d_{33}=15(\text{TL})$ $d_{33}=20(\text{exp.})$
本征结构 $\beta\text{-Te}^{[41]}$	$P2/m$	C_{2h}^1	0	0
应变结构 $\beta\text{-Te}^{[41]}$	$P2/m$	C_{2h}^1	$e_{21}=-2.52$ $e_{22}=-12.76$ $e_{23}=-0.09$ $e_{26}=-0.23$	$d_{21}=36.69$ $d_{22}=-310.32$ $d_{23}=-15.18$ $d_{26}=-5.14$
$\beta\text{-Te}^{[41]}$	$P2$	C_2^1	$e_{21}=-1.77$ $e_{22}=-9.25$ $e_{23}=-0.05$ $e_{26}=0.78$	$d_{21}=25.79$ $d_{22}=-298.78$ $d_{23}=12.12$ $d_{26}=15.54$

5.7 拓扑性质

通过第一性原理预测了四方硒烯和四方碲烯具有特殊的椅子状弯曲结构并且具有非平凡拓扑性质^[43]。这种特殊的结构在费米能级附近产生各向异性能带色散，通过自旋轨道耦合打开的相当大的带隙（约 0.1 eV）使四方硒烯和四方碲烯拓扑绝缘体具有非平凡的边缘态，如图 5.4 所示。四方硒烯和四方碲烯的瓦尼尔电荷中心（WCC）波段（黑线）和参考线（红色虚线）只相交一次， $Z_2=1$ （非平凡），说明两个系统都是拓扑绝缘体。拓扑绝缘体最重要的特征之一是它们具有自旋和动量锁定的无间隙螺旋边缘态。另外，这种新型二维元素材料可以在合适的衬底上生长，如 Au (100) 表面。因此，四方硒烯和四方碲烯是新型电子和自旋电子有前途的应用材料。

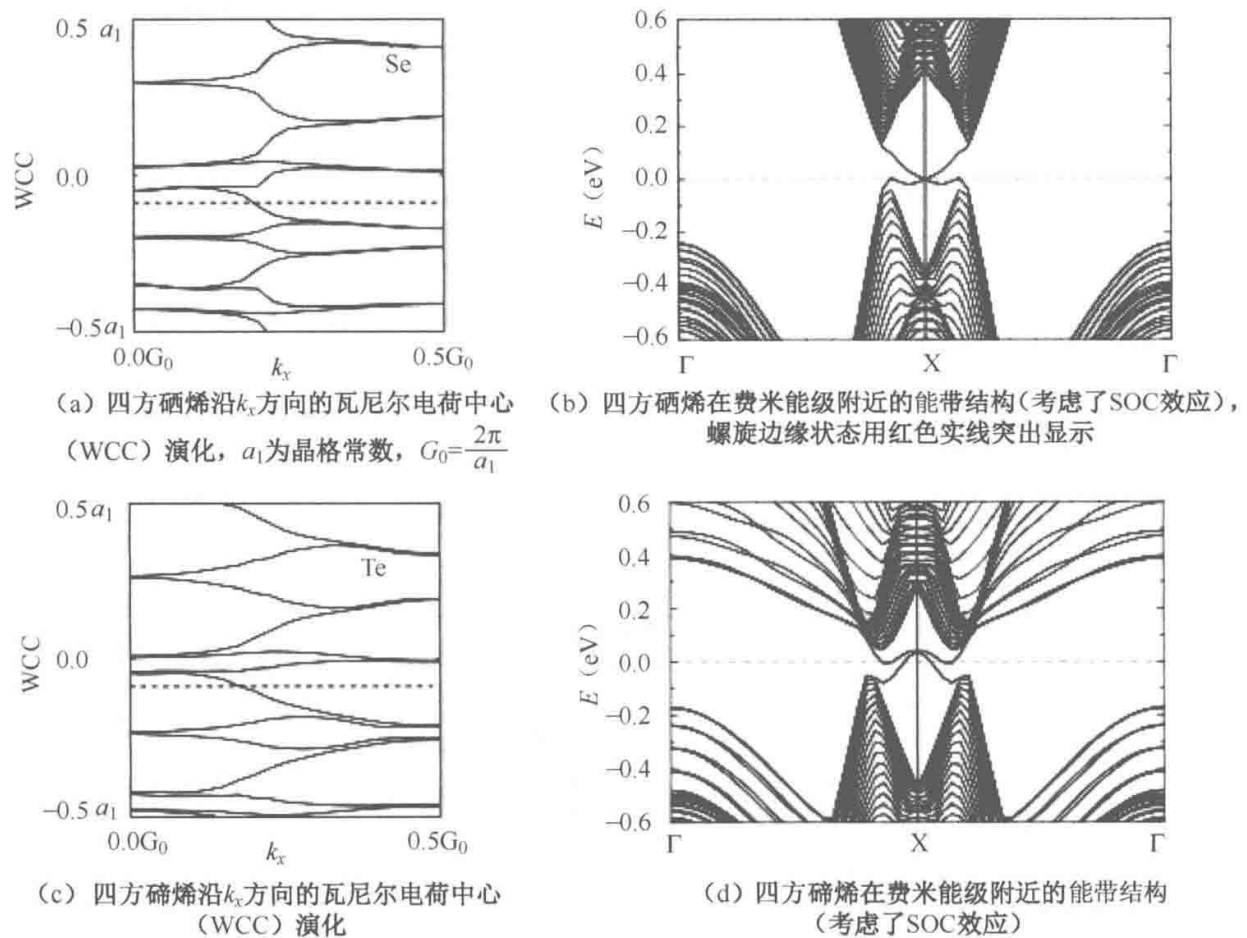


图 5.4 四方硒烯和碲烯的瓦尼尔电荷中心演化和能带结构图^[43]