文章编号:1000-1638(2026)05-0521-11 DOI:10.13484/j.nmgdxxbzk.20260508

二维窄带隙半导体$NaGaSb_2Te_6$的电子结构与光电输运性质*

刘延昭,李 凯,张 敏
(内蒙古师范大学物理与电子信息学院,呼和浩特 010022)

摘要:二维(2D)窄带隙半导体能够有效响应低能红外光子,是红外光电探测器的重要候选材料。采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算方法,系统研究了2D $NaGaSb_2Te_6$的结构稳定性、电子输运性质和光学响应,以评估其在红外光探测中的应用潜力。结果表明,2D $NaGaSb_2Te_6$具有负的形成能和较低剥离能,同时具有良好的热力学和动力学稳定性。考虑自旋-轨道耦合(SOC)效应,采用HSE06杂化泛函修正带隙的电子结构计算结果显示,2D $NaGaSb_2Te_6$是直接带隙半导体,带隙值为0.96 eV。电子和空穴迁移率分别达到2 147.80 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$和750.20 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$。光学性质分析表明,该材料在近红外区域具有显著吸收响应,在红外光和可见光区域分别表现出10^4 cm^{-1}和10^5 cm^{-1}量级的吸收系数。上述结果表明,2D $NaGaSb_2Te_6$兼具良好的稳定性、窄直接带隙、优异载流子输运能力和强光吸收特性,是一种具有潜力的2D红外光探测材料。

关键词:二维$NaGaSb_2Te_6$;电子结构;光学性质;第一性原理计算
中图分类号:O469 **文献标志码**:A

红外光探测技术能够实现对低能光子的有效识别与信号转换,在夜视成像、环境监测、光通信、生物医学检测、遥感探测等领域具有重要应用价值。传统红外探测材料主要包括HgCdTe[1]、InSb[2]、InGaAs[3]等窄带隙体相半导体材料,这些材料已在商业红外探测器中得到广泛应用。其中,HgCdTe具有组分可调带隙和较宽的红外响应范围,InSb具有较高载流子迁移率和良好的中波红外响应特性,InGaAs则广泛应用于近红外和短波红外探测。然而,传统体相红外材料通常存在制备工艺复杂、外延生长条件苛刻、低温工作需求明显、系统集成难度较高以及器件微型化受限等问题,难以充分满足新一代低功耗、柔性化、微型化和高集成度红外光电器件的发展需求[4-6]。

自石墨烯问世以来,二维(2D)材料因其原子级厚度、强光-物质相互作用、柔性可集成、表面悬挂键少以及能带结构可调等特点,为红外光电材料的开发提供了新的研究平台[7-9]。石墨烯具有超高载流子迁移率和宽谱吸收特性,但其零带隙特征会导致暗电流较大和本征光电转换效率受限[10]。黑磷具有层数依赖的窄带隙和较高载流子迁移率,在近红外和中红外响应方面表现出明显优势,但环境稳定性仍然是限制其实际应用的重要因素[11]。部分过渡金属硫族化合物具有较好的结构稳定性和成熟的2D制备基础,但其带隙通常较宽或呈间接带隙特征,对低能红外光子的吸收能力有限[12]。因此,探索兼具稳定性、窄带隙、强红外吸收和良好载流子输运能力的新型2D半导体材料,已成为红外

* **收稿日期**:2026-07-11;**修回日期**:2026-08-28
基金项目:内蒙古自然科学基金项目(2024MS01004)
作者简介:刘延昭(2002—),男(蒙古族),内蒙古通辽人,2024级硕士研究生。E-mail:1193404462@qq.com
通信作者:张 敏(1973—),女,山西忻州人,教授,博士。主要从事新能源材料的设计与物理性能计算。E-mail:zhangm@imnu.edu.cn

光电材料研究的重要方向。

在此背景下,含Te、Sb、Bi等重p区元素的2D材料逐渐成为2D红外光电材料研究中的重要方向。这类元素的p轨道对带边电子态贡献较强,并且自旋-轨道耦合(SOC)效应较明显,有利于调节带隙和低能光学跃迁。近年来,相关2D硫族化合物在红外光电领域的实验研究也取得了一系列进展。2024年,Ma等[13]报道了2D $PtTe_2$中红外光电材料研究,说明Te基2D体系在低能光子响应方面具有较好的应用基础。同年,Yu等[14]制备了各向异性范德华碲烯材料,结果表明碲烯的窄带隙、面内各向异性和较好的环境稳定性有利于近红外和偏振敏感光电响应。此外,Kim等[15]通过分子束外延方法在h-BN衬底上合成了高质量$PtSe_2$,并观察到其宽谱和快速光响应特性。这些研究表明,重元素参与的2D硫族化合物可以通过轨道组成和层状结构调节光电性质,为设计新型2D红外材料提供了有效思路。

理论计算也为2D窄带隙材料的筛选提供了重要依据。Li等[16]基于第一性原理计算预测了2D $YOBiS_2$,发现其具有稳定结构、直接窄带隙、高载流子迁移率和宽谱吸收特性。Shen等[17]研究了单层$PdTeI_2$的结构稳定性和光电性质,结果表明该材料在红外和可见光范围内具有较强吸收能力,并具有较好的电子输运性能。这类研究表明,通过元素组成设计、重元素引入和低维结构调控,可以在2D材料中获得适合红外响应的窄带隙电子结构。因此,基于第一性原理计算开展新型2D半导体的预测,对于拓展红外光电材料体系具有实际意义。

除了传统2D硫族化合物外,层状多元硫族化合物也为新型2D半导体设计提供了结构基础。铜铟硫代磷酸盐$CuInP_2S_6$(Copper indium thiophosphate,CIPS)是典型的范德华层状多元硫族化合物,具有可剥离的层状结构和较丰富的元素替代空间[18-19]。已有研究表明,CIPS量子点[20]、$CuInP_2Se_6$[21]和$LiInP_2S_6$[22]等相关层状金属硫/硒代磷酸盐材料具有低维结构特征和可调光电性质。与2D材料相比,这类多元层状材料的组成自由度更高,不同阳离子和阴离子之间的成键作用与轨道耦合也为调节电子结构提供了更多可能。因此,以CIPS类层状结构为基础进行元素替代,是构筑新型2D多元半导体的一种可行策略。

基于上述材料设计思路,若在CIPS类层状结构中引入Sb和Te等重p区元素,有望增强带边态轨道杂化和SOC效应,从而降低材料带隙并提高其对低能红外光子的响应能力。相比于依赖异质结构、外场调控或复杂器件结构提升红外响应的研究路线,从材料本征结构出发预测窄直接带隙2D半导体,更有助于发现具有内在红外响应能力的新型候选材料。

本文以CIPS类层状结构启发的2D多元硫族化合物$NaGaSb_2Te_6$作为研究对象,采用第一性原理计算,系统研究2D $NaGaSb_2Te_6$的结构稳定性、电子结构、载流子输运性质和光学响应。通过形成能、剥离能、声子谱和分子动力学模拟评估其结构稳定性;结合杂化泛函和SOC效应分析其电子结构,并基于形变势理论研究其本征载流子输运性能;进一步计算其光学响应特性,评估其在红外波段的光吸收能力和光电探测应用前景。结果表明,2D $NaGaSb_2Te_6$兼具窄直接带隙、良好的稳定性和红外光响应能力,有望成为一种具有应用潜力的新型2D红外光探测材料。

1 模型构建与计算方法

所有第一性原理计算均在密度泛函理论的框架下进行,采用Vienna Ab initio simulation package(VASP)软件包[23]完成,电子-离子相互作用采用投影缀加平面波(PAW)方法描述。电子交换-关联作用采用广义梯度近似(GGA)下的Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)泛函处理[24]。为了避免周期性边界条件下相邻层之间的相互作用,z轴方向设置了3 nm的真空层。结构优化过程中,离子弛豫收敛阈值设为10^{-5} eV,原子间作用力收敛标准设为0.1 eV·nm^{-1}。采用密度泛函微扰理论(DFPT)计算其声子色散关系,以评估2D $NaGaSb_2Te_6$的动力学稳定性,并运用分子动力学(AIMD)模拟进一步考察材料的热稳定性。具体模拟时,进行3×3×1的扩胞(共90个原子),初始温度设置为300 K,温度控制

采用Nosé算法[25]，浴火时间为10 ps，时间步长为1 fs。平面波截断能设置为500 eV，自洽计算采用以Γ点为中心的9×9×1的Monkhorst-Pack取点方式。性质计算选取布里渊区高对称路径K-Γ-M-K进行计算[26]。考虑SOC效应，采用HSE06[27]杂化泛函计算方法对2D $NaGaSb_2Te_6$的带隙结果进行修正。

对于2D $NaGaSb_2Te_6$的载流子输运性质研究，采用形变势（DP）[28]理论计算其室温下的载流子迁移率，施加的应变范围为－2%～2%，迁移率计算公式为[29]

$$\mu_{2D}=\frac{e\hbar^3 C_{2D}}{k_B T m^* m_d E_1^2}$$

其中，e、$\hbar$、k_B和T分别代表电子的电荷、普朗克常数、玻尔兹曼常数和温度；E_1为形变势常数；C_{2D}为弹性刚度常数，可通过拟合能量-应变曲线计算得到；m^*为载流子有效质量；m_d是由$m_d=\sqrt{m_x^*\times m_y^*}$计算得出的平均有效质量。

光学性质的计算结果来源于复介电函数$\varepsilon(\omega)$，其定义为$\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega)$，其中$\varepsilon_1(\omega)$和$\varepsilon_2(\omega)$分别为介电函数的实部和虚部，i为虚数单位。$\varepsilon_2(\omega)$的计算公式为

$$\varepsilon_2(\omega)=\frac{4\pi^2 e^2}{\Omega}\lim_{q\to 0}\frac{1}{q^2}\sum_{c,v,k}2\omega_k\delta(\varepsilon_{ck}-\varepsilon_{vk}-\omega)\times\left\langle u_{ck+e_\alpha q}|u_{ck}\right\rangle\left\langle u_{ck+e_\beta q}|u_{vk}\right\rangle^*$$

在此基础上，利用Kramers-Kronig关系[30]，得到介电函数的实部$\varepsilon_1(\omega)$为

$$\varepsilon_1(\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega')\omega'}{\omega'^2-\omega^2}\mathrm{d}\omega'$$

其中，P表示柯西主值。

根据已知的介电函数的实部和虚部，可计算出吸收系数、能量损失谱、消光系数、折射率和反射率，这些参数都是表征材料光学性质的重要指标。光吸收系数的计算公式为

$$\alpha(\omega)=\sqrt{2}\,\omega\sqrt{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)}-\varepsilon_1(\omega)}$$

能量损失谱公式为

$$L(\omega)=\frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)}$$

折射率和消光系数分别表示为

$$n(\omega)=\sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)}+\varepsilon_1(\omega)}{2}}$$

$$k_e(\omega)=\sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)}-\varepsilon_1(\omega)}{2}}$$

反射率表示为

$$R(\omega)=\left|\sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)}-1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)}+1}}\right|^2$$

2　结果与讨论

2.1　结构与稳定性分析

2D $NaGaSb_2Te_6$的晶体结构如图1(a)和(b)所示。该材料属于三方晶系，空间群为P3，空间群编号为No. 143。其原胞由1个Na原子、1个Ga原子、2个Sb原子和6个Te原子组成。结构中，由Te原子构成层状阴离子框架，Na、Ga原子以及Sb-Sb原子对有序分布于层内，分别形成Na-Te、Ga-Te和Sb-Te相关配位结构。Na、Ga和Sb-Sb原子对在层内呈规则排列，使整个单层形成有序的二维层状网络。

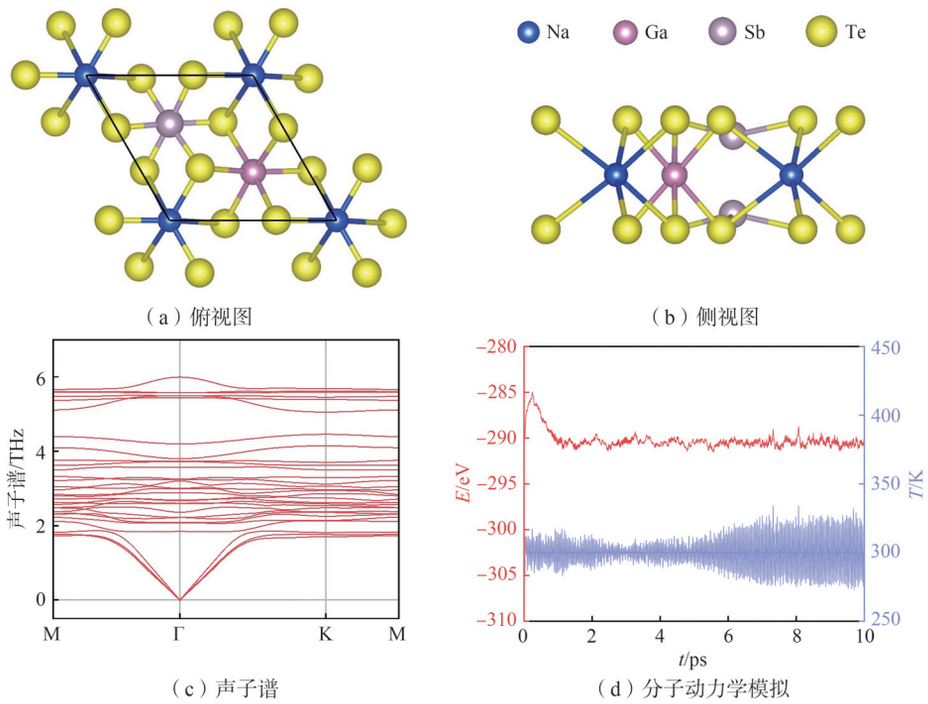


图 1 2D $NaGaSb_2Te_6$的晶体结构与稳定性表征

Fig. 1 Crystal structure and stability characterization of a 2D $NaGaSb_2Te_6$

为系统评估 2D $NaGaSb_2Te_6$的结构稳定性和实验制备可行性,计算其形成能、声子谱、分子动力学、剥离能和力学性质。首先,通过形成能评估材料的热力学稳定性。形成能反映了体系相对于组成元素参考态的能量变化,是衡量材料热力学稳定性的重要指标,其计算公式为

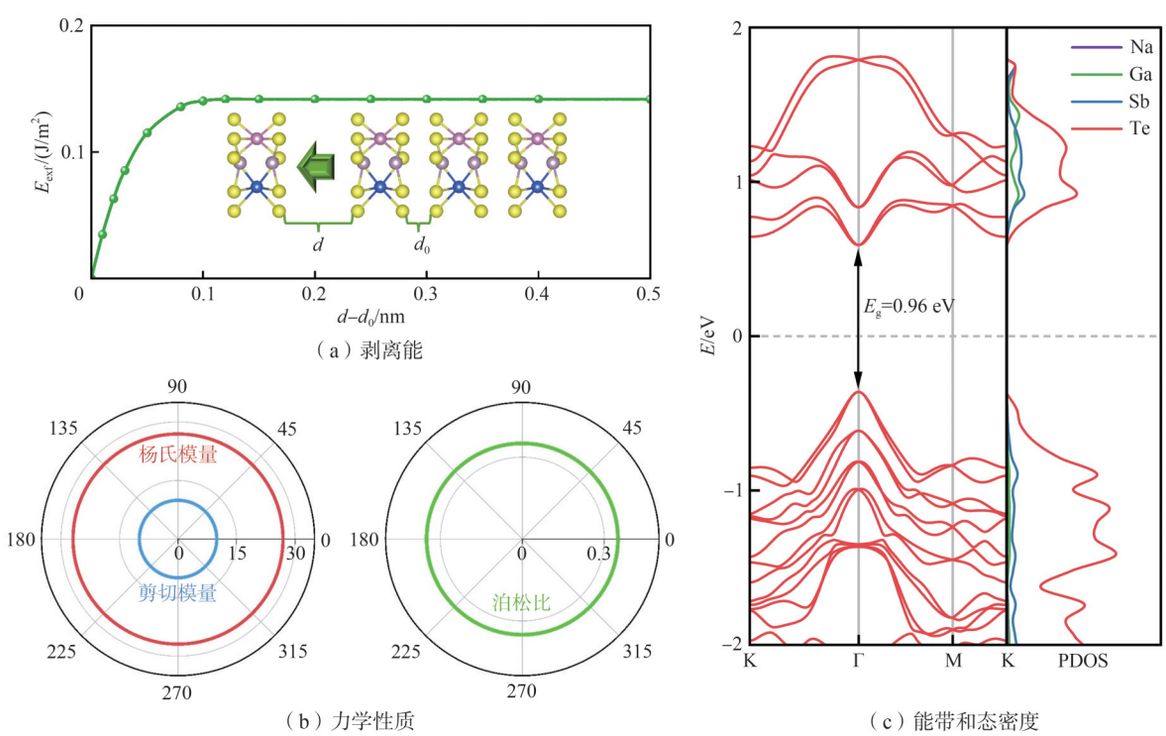
$$E_{\text{form}}=\frac{E_{NaGaSb_2Te_6}-[E_{Na}+E_{Ga}+2E_{Sb}+6E_{Te}]}{10}$$

其中,$E_{NaGaSb_2Te_6}$是 2D $NaGaSb_2Te_6$结构弛豫后的总能量,E_{Na}、E_{Ga}、E_{Sb}和E_{Te}分别是 Na、Ga、Sb 和 Te 固体单质结构弛豫后的每个原子的平均能量。计算结果表明,2D $NaGaSb_2Te_6$的形成能为-0.67 eV/atom。负形成能表明该材料的形成过程在能量上是有利的,其单层结构相对于相应元素参考态具有较好的热力学稳定性。为进一步评估该结果的合理性,将其与典型 2D 材料的形成能进行比较(表 1)。可以看出,2D $NaGaSb_2Te_6$的形成能高于 2D MoS_2的-2.44 eV/atom[31],表明其热力学稳定性弱于高度稳定的过渡金属硫化物 2D MoS_2,但是却明显低于石墨烯(5×10^{-3} eV/atom[31])以及 2D InSe(-0.52 eV/atom[16])的形成能,说明该材料具有较好的热力学稳定性。使用 DFPT 方法计算声子谱,以验证其动力学稳定性。如图 1(c)所示,整个布里渊区内未出现明显虚频,表明 2D $NaGaSb_2Te_6$ 具有良好的动力学稳定性。为进一步考察其热稳定性,进行了 AIMD 模拟,结果如图 1(d)所示。经过 10 ps 的模拟后,体系总能量在初始弛豫后迅速趋于稳定,并始终在约-290 eV 附近小幅波动;温度则围绕设定值正常振荡,未观察到明显的能量漂移。上述结果表明,2D $NaGaSb_2Te_6$具有有限温度的热稳定性。

为评估 2D $NaGaSb_2Te_6$的实验制备可行性,进一步计算其剥离能(E_{exf})。剥离能可用于衡量从层状母体中分离出单层结构时需要克服的层间相互作用强度。通常,较低的剥离能意味着较弱的层间耦合,从而表明该材料有望通过机械剥离或液相剥离等方法获得单层结构。E_{exf}的计算公式可表示为$E_{exf}=(E_1-E)/S$,其中,S是样品表面积,E和E_1分别为剥离前后的结构总能。这里以 4 层 $NaGaSb_2Te_6$结构为模型,计算从中剥离出单层 $NaGaSb_2Te_6$所需的能量。如图 2(a)所示,每层间距为d_0,剥离距离Δd的计算公式为$\Delta d=d-d_0$,结果显示,随着剥离距离Δd的增加,E_{exf}的数值首先快速增大,当$\Delta d\geqslant0.1$ nm时,E_{exf}基本收敛到稳定值,稳定值约为 0.14 J/m^2。该结果表明,当层间距足够大时,相邻层之间

的相互作用已基本消失，而稳定值可以视为将单层从层状母体中分离出来需要克服的单位面积能量。表1进一步比较了2D $NaGaSb_2Te_6$与典型2D材料的剥离能。2D $NaGaSb_2Te_6$的剥离能略高于2D InSe（0.08 J/m^2）[16]，但明显低于2D MoS_2（0.30 J/m^2）[32]和石墨烯（0.37 J/m^2）[32]的剥离能。考虑到2D MoS_2和石墨烯皆可通过机械剥离等方法获得稳定单层，2D $NaGaSb_2Te_6$较低的剥离能说明其层间结合相对较弱。由此推测，在能够获得相应层状母体的前提下，2D $NaGaSb_2Te_6$具有较高的机械剥离可行性。

图2(b)进一步展示了2D $NaGaSb_2Te_6$面内杨氏模量E、剪切模量G和泊松比ν的角度依赖关系。红色、蓝色和绿色曲线均接近理想圆形，说明上述弹性参数随面内方向变化很小，表明2D $NaGaSb_2Te_6$具有近似各向同性的面内力学响应。由表1可知，2D $NaGaSb_2Te_6$的杨氏模量和剪切模量分别为26.91 N/m和9.92 N/m，说明该材料能够对微小的拉伸和剪切形变产生稳定的弹性响应。其杨氏模量低于2D InSe、2D MoS_2和石墨烯的50.22 N/m[16]、120.68 N/m[31]和352.20 N/m[33]，剪切模量也低于相应的19.31 N/m[16]、48.17 N/m[31]和148.70 N/m[33]，表明2D $NaGaSb_2Te_6$面内晶格相对柔软，对外部应变具有较高的响应能力，因而更适合柔性电子器件以及应变工程调控。2D $NaGaSb_2Te_6$的泊松比为0.36，高于2D InSe、2D MoS_2和石墨烯的0.30[16]、0.25[31]和0.19[33]，表明该材料受到单轴拉伸时会产生相对显著的横向收缩。依据Born-Huang准则[34]，2D $NaGaSb_2Te_6$满足$C_{11}>0$、$C_{11}>C_{12}$和$C_{66}>0$的基本弹性稳定条件，具有一定的力学稳定性。



（a）剥离能　（b）力学性质　（c）能带和态密度

图2　层状$NaGaSb_2Te_6$母体的单层剥离能、2D $NaGaSb_2Te_6$的力学性质、电子能带结构和态密度

Fig. 2　Monolayer exfoliation energy of the layered $NaGaSb_2Te_6$ parent structure and the mechanical properties, electronic band structure, and density of states of a 2D $NaGaSb_2Te_6$

2.2　电子结构与载流子输运性质

为系统评估2D $NaGaSb_2Te_6$的电子输运性质，计算其能带结构、载流子有效质量和迁移率。鉴于PBE泛函计算得到的半导体带隙通常低于实验测量值，本文采用精度更高的HSE06杂化泛函描述其电子结构。同时，考虑到Sb和Te重元素可能会引起显著的SOC效应，因此相关计算均包含SOC修正。图2(c)给出了2D $NaGaSb_2Te_6$沿K-Γ-M-K高对称路径[26]的能带结构和元素分辨态密度

(PDOS)。结果表明,2D $NaGaSb_2Te_6$为直接带隙半导体,其价带顶(VBM)和导带底(CBM)均位于Γ点,HSE06+SOC计算得到的带隙值为0.96 eV。较窄的直接带隙有利于带间光学跃迁,说明该材料在近红外光电探测领域具有潜在应用价值。从能带色散关系来看,2D $NaGaSb_2Te_6$同时具有色散显著的带边态和态密度较高的深能级电子态,前者有利于载流子输运,后者则可能提供较为丰富的光学跃迁通道。PDOS结果表明,价带顶附近的电子态主要由Te贡献,并伴随少量Sb电子态;导带底附近同样以Te电子态为主,同时包含一定的Sb和Ga成分。

表1 2D $NaGaSb_2Te_6$、2D InSe、2D MoS_2和石墨烯材料的形成能、剥离能、杨氏模量、剪切模量和泊松比

Table 1 Data of the formation energy, cleavage energy, Young´s modulus, shear modulus and Poisson´s ratio of 2D $NaGaSb_2Te_6$, 2D InSe, 2D MoS_2 and graphene

材料	形成能/(eV/atom)	剥离能/(J/m^2)	杨氏模量/(N/m)	剪切模量/(N/m)	泊松比
2D $NaGaSb_2Te_6$	−0.67	0.14	26.91	9.92	0.36
2D InSe	−0.52[16]	0.08[16]	50.22[16]	19.31[16]	0.30[16]
2D MoS_2	−2.44[31]	0.30[32]	120.68[31]	48.17[31]	0.25[31]
石墨烯	5×10^{-3}[31]	0.37[32]	352.20[33]	148.70[33]	0.19[33]

载流子有效质量和迁移率是评价半导体材料输运性能的重要参数,直接影响载流子的分离、迁移和收集效率。因此,本文进一步基于形变势理论计算了2D $NaGaSb_2Te_6$的有效质量和载流子迁移率,相关结果列于表2。2D $NaGaSb_2Te_6$电子(空穴)沿x和y方向的有效质量分别为0.28 m_0(0.18 m_0)和0.22 m_0(0.20 m_0)。电子有效质量表现出一定的方向差异,而空穴有效质量在两个方向上较为接近,表明其空穴输运具有近似各向同性特征。基于形变势理论计算得到,2D $NaGaSb_2Te_6$电子沿x和y方向的迁移率分别为1 860.90 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$和2 147.80 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$,$y$方向迁移率略高,这主要归因于该方向的电子有效质量较小。其电子迁移率高于2D InSe的1 619.51 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$[16]和1 779.16 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$[35],并且显著高于2D MoS_2的72.16 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$[36]和60.32 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$[36],分别约为2D MoS_2对应方向的25.8倍和35.6倍,表明2D $NaGaSb_2Te_6$具有较优的电子输运能力。更值得注意的是,2D $NaGaSb_2Te_6$的空穴迁移率沿x和y方向分别达到750.20 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$和732.20 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$,两个方向迁移率接近,表现出高度各向同性的空穴输运特征。该值不仅显著高于2D MoS_2[37],也远高于2D InSe的134.90 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$[16]和65.70 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$[16]。较高且近似各向同性的空穴迁移率有利于降低器件性能对晶体取向的依赖,并提高载流子收集效率。

表2 2D $NaGaSb_2Te_6$、2D InSe和2D MoS_2在300 K时x和y方向的电子和空穴中的载流子有效质量m^*、形变势常数E_1、面内弹性模量C_{2D}、载流子迁移率μ和载流子动量弛豫时间τ

Table 2 Data of the effective mass m^*, deformation potential constant E_1, in-plane elastic modulus C_{2D}, carrier mobility μ and carrier momentum relaxation time τ of the electron and hole parts along the x and y directions of 2D $NaGaSb_2Te_6$, 2D InSe and 2D MoS_2 at 300K

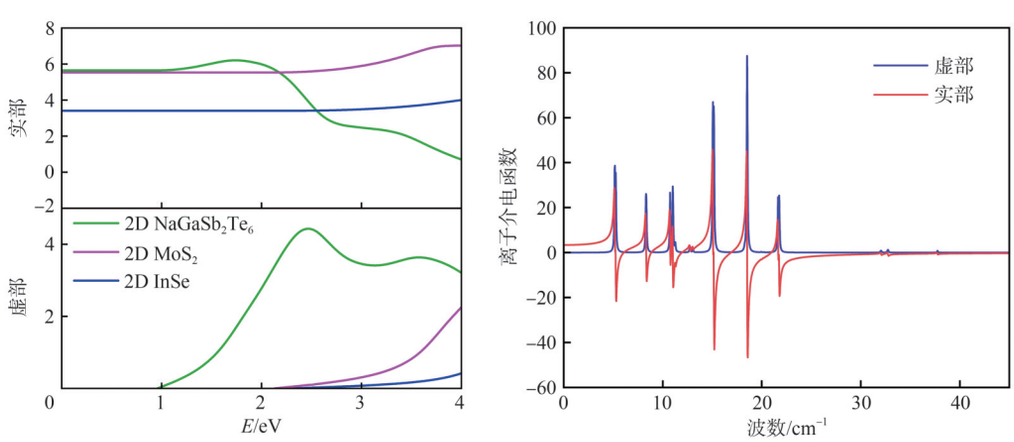
载流子类型	材料	m^*/m_0		E_1/eV		C_{2D}/(eV/m^2)		μ/($cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$)		τ/fs	
		x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
电子	2D $NaGaSb_2Te_6$	0.28	0.22	1.91	2.04	22.10	22.86	1860.90	2147.80	296.31	268.71
	2D InSe[16]	0.18	0.19	4.27	3.97	45.99	46.10	1619.51	1779.16[35]	173.41	192.23
	2D MoS_2[16]	0.46	0.48	10.88	11.36	127.44	128.16	72.16[36]	60.32[36]	18.87	16.46
空穴	2D $NaGaSb_2Te_6$	0.18	0.20	4.29	4.19	22.10	22.86	750.20	732.20	76.79	83.27
	2D InSe[16]	2.14	2.02	1.28	1.89	45.99	46.10	134.90	65.70	164.17	75.47
	2D MoS_2[16]	0.57	0.60	5.29	5.77	127.44	128.16	200.52[37]	152.18	64.99	51.92

在形变势模型中，载流子迁移率由有效质量、形变势常数和面内弹性模量共同决定。2D $NaGaSb_2Te_6$ 较高的电子迁移率主要与较小的电子有效质量和形变势常数有关。其电子沿 x 和 y 方向的形变势常数分别为 1.91 eV 和 2.04 eV，明显小于空穴的 4.29 eV 和 4.19 eV。由于载流子迁移率与形变势常数的平方成反比，空穴虽然具有较小的有效质量，其迁移率仍低于电子。空穴的有效质量、形变势常数和弹性模量在两个方向上相差较小，这与其近似各向同性的输运特征相对应。本文采用的形变势模型只考虑了理想晶格中的长波声学声子散射，未计入缺陷、杂质、衬底和电极界面等因素，因此实际器件中的载流子迁移率以及载流子动量弛豫时间 τ 可能低于计算结果。

2.3　光学性质

为进一步评估 2D $NaGaSb_2Te_6$ 的光学响应效果，计算了其介电函数的电子贡献和离子贡献，结果如图 3 所示。电子介电将函数部分与 2D MoS_2 和 2D InSe 进行了比较，由图 3(a)可见，2D $NaGaSb_2Te_6$ 的静态电子介电常数约为 5.6，接近 2D MoS_2(5.5[31])，且明显高于 2D InSe(3.4[38])，说明其具有较强的电子极化和介电屏蔽能力。2D $NaGaSb_2Te_6$ 电子介电函数虚部在 1.0 eV 附近开始明显增强，与其 HSE06＋SOC 带隙值 0.96 eV 基本一致，表明低能光学响应主要来源于直接带间跃迁。该带隙对应的截止波长约为 1.29 μm，位于近红外区域。虚部在约 2.5 eV 处出现主峰，并在 3.5～3.8 eV 范围内形成次级峰，说明该材料在近红外至可见光范围内具有较丰富的光学跃迁通道。相比 2D MoS_2 和 2D InSe，2D $NaGaSb_2Te_6$ 的光学响应起始能量更低，并在 1～4 eV 范围内表现出较强的介电损耗，这主要归因于其窄直接带隙特征。

图 3(b)给出了 2D $NaGaSb_2Te_6$ 的离子介电贡献。在 5～22 cm^{-1} 范围内，介电函数虚部出现多个声子共振峰，实部也呈现明显色散，说明其在低频区域具有显著的晶格极化响应，对应频率为 0.15～0.66 THz，位于远红外/太赫兹范围。当波数高于约 25 cm^{-1} 后，离子介电贡献迅速减弱，材料的光学响应主要由电子跃迁主导。由于静态介电常数是描述其晶格极化的关键参数，需进一步讨论其静态介电常数(总静态介电常数为 $\varepsilon(0)=\varepsilon_{elec}+\varepsilon_{ion}$)，对于 2D $NaGaSb_2Te_6$，电子和离子部分对静态介电常数的贡献分别为 5.6 和 3.4，其总静态介电常数为 9。较大的静态介电常数说明该材料具有显著的晶格极化特性，可对带电杂质和缺陷引起的局域库仑相互作用产生有效屏蔽，从而提高载流子的传输性能。



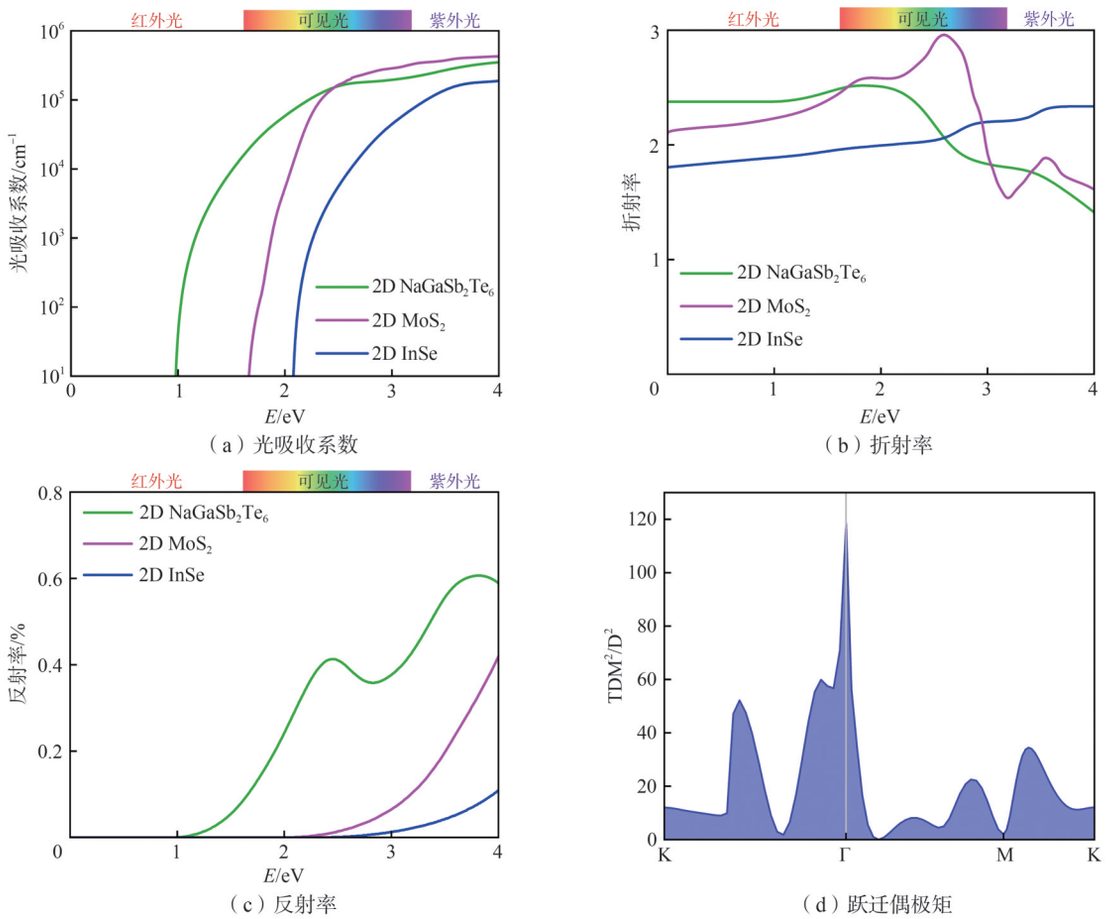
(a) 电子介电函数的实部与虚部　　(b) 离子介电函数的实部与虚部

图 3　2D $NaGaSb_2Te_6$ 的电子与离子介电函数随波数的变化

Fig. 3　Electronic and ionic dielectric functions of a 2D $NaGaSb_2Te_6$ as functions of wavenumber

在介电函数分析的基础上，进一步计算 2D $NaGaSb_2Te_6$ 的吸收系数、折射率和反射率，并与 2D MoS_2 和 2D InSe 进行比较，结果如图 4(a)—(c)所示。由图 4(a)可见，2D $NaGaSb_2Te_6$ 的吸收边明显低于 2D InSe[39] 和 2D MoS_2[40]，说明其能够响应更低能量、更长波长的入射光子。随着光子能量增加，其吸收系数迅速增大，并在红外区域达到 10^4 cm^{-1} 量级，表明 2D $NaGaSb_2Te_6$ 具有良好的近红外

吸收能力和较宽的光谱响应范围。如图4(b)所示,2D $NaGaSb_2Te_6$的低频折射率约为2.35,高于2D InSe[41],并与2D MoS_2[40]接近,说明其具有较强的低能光极化响应。其折射率在1.8 eV附近达到局部峰值,随后随光子能量增加而逐渐下降,表现出明显的光学色散特征。如图4(c)所示,2D $NaGaSb_2Te_6$在近红外低能区域具有较低反射率,有利于降低表面反射损失并提高入射光利用率。综合来看,低吸收阈值、较强近红外吸收以及有限的反射损失均表明2D $NaGaSb_2Te_6$具有良好的近红外光响应潜力。



(a) 光吸收系数 (b) 折射率

(c) 反射率 (d) 跃迁偶极矩

图4 2D $NaGaSb_2Te_6$、2D MoS_2和2D InSe随光子能量变化的光学性质以及2D $NaGaSb_2Te_6$的跃迁偶极矩

Fig. 4 Photon-energy-dependent optical properties of 2D $NaGaSb_2Te_6$, 2D MoS_2, and 2D InSe, together with the transition dipole moment of a 2D $NaGaSb_2Te_6$

为了从微观角度判断带边跃迁是否满足光学选择定则,进一步计算了2D $NaGaSb_2Te_6$价带顶与导带底之间的跃迁偶极矩,如图4(d)所示。结果表明,跃迁偶极矩沿K-Γ-M-K路径具有明显的波矢依赖性,并在Γ点附近达到最大值,说明其带边直接跃迁具有较强的光学允许特征,这与其在约0.96 eV处出现的近红外吸收边一致,进一步从微观层面证实2D $NaGaSb_2Te_6$的直接带隙光学跃迁特征。除Γ点附近的主峰外,其他波矢位置也存在多个次级峰,说明在较高能量范围内还具有丰富的带间跃迁通道。窄直接带隙与较大的带边跃迁偶极矩共同赋予2D $NaGaSb_2Te_6$良好的近红外光响应潜力。

结合上述电子结构、载流子输运和光学性质,可以进一步评估2D $NaGaSb_2Te_6$作为近红外光敏材料的应用潜力。2D $NaGaSb_2Te_6$具有0.96 eV的直接带隙,对应约1.29 μm的近红外光子能量,较大的带边跃迁偶极矩和明显的近红外吸收有利于光生载流子的产生,而较高的电子和空穴迁移率则有利于载流子的面内输运。上述结果表明,2D $NaGaSb_2Te_6$在光吸收和载流子输运两个关键环节均

表现出有利的本征物性，具备作为2D近红外光探测候选材料的潜力。需要指出的是，实际器件的响应率、探测率和响应速度还受电极接触、载流子寿命、暗电流和噪声等因素影响，本文的评价主要基于材料本征电子结构、输运和光学性质，并不涉及具体器件结构及其器件级性能。

3　结论

本文基于第一性原理计算方法，系统研究了2D $NaGaSb_2Te_6$ 的结构稳定性、电子输运性质和光学响应。结果表明，2D $NaGaSb_2Te_6$ 具有负的形成能（−0.67 eV/atom）和较低的剥离能（0.14 J/m^2），声子谱中未出现虚频，且在300 K下经过10 ps的AIMD模拟后结构保持完整，说明其具有良好的热力学、动力学和热稳定性，并具备一定的单层制备可行性。电子结构计算表明，2D $NaGaSb_2Te_6$ 是一种窄直接带隙半导体，带隙值为0.96 eV，适合响应近红外光。其电子迁移率沿 x 和 y 方向分别为1 860.90 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$ 和2 147.80 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$，空穴迁移率分别达到750.20 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$ 和732.20 $cm^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}$，表明该材料具有良好的双极性载流子输运能力。光学计算显示，2D $NaGaSb_2Te_6$ 的吸收边延伸至近红外区域，吸收系数在红外和可见光区域分别达到 10^4 cm^{-1} 和 10^5 cm^{-1} 量级，同时在近红外区域具有较低的反射损失。此外，Γ点附近较强的跃迁偶极矩说明其带边直接跃迁不存在明显的光学禁阻效应，有利于近红外光吸收。综上，2D $NaGaSb_2Te_6$ 兼具良好的结构稳定性、较低剥离能、较高载流子迁移率和显著的近红外光学响应，是一种具有潜力的2D近红外光电探测候选材料。

参考文献：

[1] Akhavan N D, Umana-Membreno G A, Gu R, et al. Design principles for high QE HgCdTe infrared photodetectors for eSWIR applications[J]. Journal of Electronic Materials, 2022, 51(9): 4742-4751.

[2] Zhang K, Wang Y F, Wang H L, et al. Sulfur-passivated InSb nanowires for infrared photodetectors[J]. ACS Applied Nano Materials, 2023, 6(8): 6810-6819.

[3] Tillement J, Cervera C, Baylet J, et al. Design and characterization of 5 μm pitch InGaAs photodiodes using in situ doping and shallow Mesa architecture for SWIR sensing[J]. Sensors, 2023, 23(22): 9219.

[4] Rogalski A. Infrared detectors: Status and trends[J]. Progress in Quantum Electronics, 2003, 27(2): 59-210.

[5] Elbanna A, Jiang H, Fu Q D, et al. 2D material infrared photonics and plasmonics[J]. ACS Nano, 2023, 17(5): 4134-4179.

[6] Zulfiqar M W, Nisar S, Dastgeer G, et al. 2D material-based infrared photodetectors: Recent progress, challenges, and perspectives[J]. Nanoscale, 2025, 17(31): 17881-17918.

[7] Ma H X, Xing Y H, Cui B Y, et al. Recent advances in two-dimensional layered and non-layered materials hybrid heterostructures[J]. Chinese Physics B, 2022, 31(10): 108502.

[8] Peng Z R, Lin R F, Li Z, et al. Two-dimensional materials-based integrated hardware[J]. Science China Information Sciences, 2023, 66(6): 160401.

[9] Li C, Tareen A K, Long J, et al. Two dimensional borophene nanomaterials: Recent developments for novel renewable energy storage applications[J]. Progress in Solid State Chemistry, 2023, 71: 100416.

[10] Sun M Y, Wang S, Liang Y B, et al. Flexible graphene field-effect transistors and their application in flexible biomedical sensing[J]. Nano-Micro Letters, 2024, 17(1): 34.

[11] Han R Y, Feng S, Sun D M, et al. Properties and photodetector applications of two-dimensional black arsenic phosphorus and black phosphorus[J]. Science China Information Sciences, 2021, 64(4): 140402.

[12] Chen Z Q, Shi J A, Huang J Q, et al. Large-area non-stoichiometric phase transition in transition metal chalcogenide films[J]. Nature Materials, 2026, 25(4): 573-580.

[13] Ma L X, Lin S, Ma H, et al. Silicon waveguide-integrated platinum telluride midinfrared photodetector with high responsivity and high speed[J]. ACS Nano, 2024, 18(32): 21236-21245.

[14] Yu J, Mu H R, Wang P, et al. Anisotropic van der waals tellurene-based multifunctional, polarization-sensitive, in-

line optical device[J]. ACS Nano,2024,18(29):19099-19109.
[15] Kim H S,Kwon G,Jeong J,et al. Broadband and ultrafast photodetector based on $PtSe_2$ synthesized on hBN using molecular beam epitaxy[J]. Applied Surface Science,2023,638:158103.
[16] Li K,Zhang M,Shi J J. Two-dimensional $YOBiS_2$ with narrow bandgap and high carrier mobility for infrared photodetector[J]. Physics Letters A,2025,529:130062.
[17] Shen H M,Yu M Y,Liu C,et al. Promising optoelectronic properties and potential infrared photodetection applications of two-dimensional monolayer $PdTeI_2$[J]. Results in Physics,2023,53:106935.
[18] Xu T X,Guo X B,Zhang D,et al. Emerging van der Waals material $CuInP_2S_6$:Physical properties,theories and applications[J]. Journal of Materials Chemistry A,2024,12(45):31028-31058.
[19] Liu H L,Yu S Q,Wang Y Y,et al. Excited-state properties of $CuInP_2S_6$ monolayer as photocatalyst for water splitting[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters,2022,13(8):1972-1978.
[20] Zhang J T,Xu W,Wang L M,et al. Colossal vacancy effect of 2D $CuInP_2S_6$ quantum dots for enhanced broadband photodetection[J]. Crystal Growth & Design,2023,23(2):1259-1268.
[21] Sun F P,Xu H J,Hong W T,et al. 2D $CuInP_2Se_6$ in high-sensitivity UV-vis and X-ray detection[J]. Advanced Functional Materials,2024,34(22):2313776.
[22] Mohammadi P,Bordoloi A,Singh S. First-principles discovery of novel $LiInP_2S_6$ polymorphs with promising optoelectronic responses[J]. The Journal of Physical Chemistry C,2026,130(13):4936.
[23] Kresse G,Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical Review B,1996,54(16):11169-11186.
[24] Blöchl P E. Projector augmented-wave method[J]. Physical Review B,1994,50(24):17953-17979.
[25] Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods[J]. The Journal of Chemical Physics,1984,81(1):511-519.
[26] Setyawan W,Curtarolo S. High-throughput electronic band structure calculations:Challenges and tools[J]. Computational Materials Science,2010,49(2):299-312.
[27] Krukau A V,Vydrov O A,Izmaylov A F,et al. Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals[J]. The Journal of Chemical Physics,2006,125(22):224106.
[28] Sun F,Hong A J. Re-understanding of the deformation potential constant in the single crystal silicon[J]. Materials Today Communications,2024,38:108316.
[29] Bardeen J,Shockley W. Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals[J]. Physical Review,1950,80(1):72.
[30] Gajdoš M,Hummer K,Kresse G,et al. Linear optical properties in the projector-augmented wave methodology[J]. Physical Review B,2006,73(4):045112.
[31] Wang V,Tang G,Liu Y C,et al. High-throughput computational screening of two-dimensional semiconductors[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters,2022,13(50):11581-11594.
[32] Yan C,Yi J Q,Li D,et al. FeP_2 monolayer:Isoelectronic analogue of MoS_2 with excellent electronic and optical properties[J]. Physical Chemistry Chemical Physics,2022,24(21):13376-13383.
[33] Andrew R C,Mapasha R E,Ukpong A M,et al. Mechanical properties of graphene and boronitrene[J]. Physical Review B,2012,85(12):125428.
[34] Mouhat F,Coudert F X. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems[J]. Physical Review B,2014,90(22):224104.
[35] He Y,Zhang M,Shi J J,et al. Improvement of visible-light photocatalytic efficiency in a novel $InSe/Zr_2CO_2$ heterostructure for overall water splitting[J]. The Journal of Physical Chemistry C,2019,123(20):12781-12790.
[36] Phuc H V,Hieu N N,Hoi B D,et al. Tuning the electronic properties,effective mass and carrier mobility of MoS_2 monolayer by strain engineering:First-principle calculations[J]. Journal of Electronic Materials,2018,47(1):730-736.
[37] Cai Y Q,Zhang G,Zhang Y W. Polarity-reversed robust carrier mobility in monolayer MoS_2 nanoribbons[J]. Journal of the American Chemical Society,2014,136(17):6269-6275.

[38] Hieu N N, Ilyasov V V, Vu T V, et al. First principles study of optical properties of molybdenum disulfide: From bulk to monolayer[J]. Superlattices and Microstructures, 2018, 115: 10-18.

[39] 李凯, 张敏, 翟翔宇, 等. 新型二维材料 APO(A=Hf, Zr)光电性能的第一性原理研究[J]. 内蒙古大学学报(自然科学版), 2024, 55(2): 138-145.

[40] Dong H M, Guo S D, Duan Y F, et al. Electronic and optical properties of single-layer MoS_2[J]. Frontiers of Physics, 2018, 13(4): 137307.

[41] Huang X Y, Cao Q L, Wan M J, et al. Electronic and optical properties of BP, InSe monolayer and BP/InSe heterojunction with promising photoelectronic performance[J]. Materials, 2022, 15(18): 6214.

Electronic Properties and Optoelectronic Transport Properties of the Two-Dimensional Narrow-Bandgap Semiconductor $NaGaSb_2Te_6$

LIU Yanzhao, LI Kai, ZHANG Min

(*College of Physics and Electronic Information*, *Inner Mongolia Normal University*, *Hohhot* 010022, *China*)

Abstract: Two-dimensional (2D) narrow-bandgap semiconductors can effectively respond to low-energy infrared photons and are therefore important candidate materials for infrared photodetectors. The structural stability, electronic transport properties, and optical response of a 2D $NaGaSb_2Te_6$ are systematically investigated to evaluate its potential for infrared photodetection applications. The results show that 2D $NaGaSb_2Te_6$ possesses a negative formation energy and a relatively low exfoliation energy, together with good thermodynamic and dynamic stability. Electronic properties calculations considering spin-orbit coupling (SOC) and using the HSE06 hybrid functional for band-gap correction reveal that 2D $NaGaSb_2Te_6$ is a direct-bandgap semiconductor with a band gap of 0.96 eV. The electron and hole mobilities reach 2 147.80 $cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$ and 750.20 $cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$, respectively. Optical property analysis indicates that the material exhibits a pronounced absorption response in the near-infrared region and shows absorption coefficients on the order of 10^4 cm^{-1} and 10^5 cm^{-1} in the infrared and visible-light region. These results suggest that 2D $NaGaSb_2Te_6$ combines good stability, a narrow direct band gap, excellent carrier transport capability, and strong light absorption, making it a promising 2D material for infrared photodetection.

Key words: 2D $NaGaSb_2Te_6$; electronic property; optical property; first-principles calculation