

低温下二硫化钼电子迁移率研究*

董海明†

(中国矿业大学理学院物理系, 徐州 221116)

(2013年6月26日收到; 2013年7月10日收到修改稿)

二硫化钼 (MoS_2) 是已知的二维半导体材料中光电性能最优秀的材料之一. 单原子层厚的 MoS_2 是禁带宽度为 1.8 eV 的二维直接带隙半导体材料, 可以用来发展新型的纳米电子器件和光电功能器件. 本论文利用玻尔兹曼平衡方程输运理论研究低温时 MoS_2 系统的电输运性质, 计算得到了 MoS_2 电子迁移率的解析表达式. 研究发现, 低温时 MoS_2 的迁移率与衬底材料的介电常数的平方成正比; 与系统的电子浓度对带电杂质的浓度的比率 n_e/n_i 成线性关系. 因此, 选用介电常数高的衬底材料, 适当提高 MoS_2 系统的载流子浓度, 同时降低杂质的浓度, 可以有效提高 MoS_2 系统的迁移率. 研究结果为探索以 MoS_2 为基础的新型纳米光电器件的研究和实际应用提供了理论依据.

关键词: 二硫化钼, 迁移率, 电输运, 平衡方程

PACS: 61.82.Fk, 62.25.De, 72.20.Fr, 72.20.Jv

DOI: 10.7498/aps.62.206101

1 引言

硅是现代电子信息和集成电路产业的基础, 半导体材料中有 98% 是硅. 然而, 随着现代科学技术的进步, 集成电路上的晶体管密度越来越大, 密度的增加就越来越困难, 硅材料也即将达到其应用尺寸的极限, 进入后摩尔时代. 各国科学家都在大力研究开发硅材料的替代材料或全新的技术, 从而应用到新一代的半导体上. 超薄二维材料, 如 Graphene, MoS_2 , MoSe_2 , $\text{B}_{1-x}\text{C}_{x+y}\text{N}_{1-y}$ 等, 在纳米电子器件领域有十分重要的应用价值, 一直以来都受到科学家的广泛关注^[1,2]. 2011 年, 瑞士洛桑联邦理工学院的科研人员利用单原子层二硫化钼 (MoS_2) 材料制造出了高电流开关比和较高电子迁移率的低能耗场效应管, 此项技术非常有希望用于下一代纳米电子器件和设备领域, 这将比传统的硅材料或石墨烯更有优势^[3]. 2012 年, 麻省理工学院 (MIT) 的研究人员用机械方法生产出单层 MoS_2 , 用其制造出了多种基本的电子设备^[4]. 这些最新研究成果打开了一个通往全新的电子材料和器件领域的大门, 并且有助于拓展二维材料在多方面的应用.

MoS_2 作为工业润滑剂已使用了几十年, 但直到最近, 它的二维形式才受到重大关注. MoS_2 的一个潜在应用是制造大屏幕显示器, 由于二维 MoS_2 仅有一个原子厚, 不同于传统晶体管所用的硅, 只需使用少量材料便可制造出大块屏幕, 在降低成本和重量的同时, 还能提高能效. 美国加州大学伯克利分校电气工程和计算机科学系教授阿里·杰维认为, 分层材料是“一类极有潜力的未来电子材料”. 单层 MoS_2 材料显示出良好的半导体特性, 有些性能超过现在广泛使用的硅和研究热门石墨烯, 可望成为下一代半导体材料. MoS_2 与石墨烯具有非常相似的结构, 但是其光电性质非常不同, MoS_2 在光电材料和器件的研究和应用领域具有更大的优势^[5].

由于独特的电子结构和性质, 以及在光电器件领域潜在的应用价值, 石墨烯 (graphene) 得到了人们的广泛研究和关注. 单层 MoS_2 的结构与石墨烯结构非常相似^[6], 在单层内, Mo 和 S 原子之间形成共价键, 单层结构十分稳定. MoS_2 具有像石墨一样的层状结构, 因此单层的 MoS_2 也可以像石墨烯一样利用微机械剥离法得到. MoS_2 属于六方晶系, 是禁带宽度为 1.29 eV 的间接带隙半导体, 是典型的

* 中央高校基本科研业务费 (批准号: 2013QNA29) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hmdong@cumt.edu.cn

过渡族 d 电子化合物, 而单层的 MoS₂ 是禁带宽度为 1.8 eV 的直接带隙半导体 [6,7]. MoS₂ 是一种二维材料, 非常薄, 很容易用在纳米技术上, 在制造微型晶体管、发光二极管 (LEDs)、太阳能电池等方面有很大的潜力.

单原子层 MoS₂ 是二维的, 而硅是一种三维材料. MoS₂ 的另一大优势是比硅的能耗更低, 体积更小 [8]. 单层的 MoS₂ 是禁带宽度为 1.8 eV 的直接带隙半导体. 有研究发现, 在制造晶体管时用一种氧化铍介质可使室温下单层 MoS₂ 的电子的运动性大大提高 [9]. 石墨烯的一个重要劣势是没有带隙, 要想在石墨烯上人为造出较大带隙目前还很困难, 因此要想利用石墨烯实现开关功能就非常困难. 由于单层 MoS₂ 就是直接带隙半导体, 所以可以用单层 MoS₂ 制造场效应晶体管, 且在稳定状态下耗能比传统硅晶体管小 10 万倍. 石墨烯的优势在于能够得到超高的载流子迁移率; 而 MoS₂ 的一个重要困难在于载流子迁移率 (与石墨烯相比) 不高 [3,4], 但是其拥有合适的带隙 (禁带), 以及非常高的电流开关比, 使得它非常适合用来制作新一代的纳米光电器件 [3,10]. 另外, 在光电子学应用领域, 单层 MoS₂ 还能与石墨烯共同使用, 制作两者的复合材料, 形成优势互补. 2010 年诺贝尔物理学奖得主诺沃肖洛夫利用一层 MoS₂ 位于两层石墨烯之间组成三明治结构, 研究发现石墨烯“三明治”晶体管能有效地减少电子泄漏, 提高器件的电子输运性能 [11].

综上所述, MoS₂ 尤其是单层的 MoS₂ 拥有优越的电子结构和电学性质, 是一种比石墨烯更有前途的新材料, 非常有希望用于制作新型纳米半导体器件. 国际上已经迅速开展了 MoS₂ 的相关研究工作, 国内相关的研究还非常少 [12]. 目前以 MoS₂ 为基制作新型场效应晶体管器件的一个主要障碍在于其电子迁移率不高 [3,4,11]. 电子迁移率是衡量电子器件最重要的指标之一, 这就大大影响了该材料作为实际器件的应用前景. 因此, 本文研究 MoS₂ 材料的电输运性质, 发展详细的理论模型计算该材料的电子迁移率, 从理论上研究提高 MoS₂ 系统迁移率的方法.

2 理论模型

2.1 电子能带和波函数

单层的 MoS₂ 材料是直接带隙半导体材料, 其

禁带宽度是 1.8 eV. 对于一般的半导体材料, 特别是直接带隙半导体, 当外界所加偏电压不是很大时, 电子的散射主要在费米面附近, 即主要是导带底和价带顶附近 ($\mathbf{k} \rightarrow 0$) 的载流子对输运起主要作用 [13]. 因此, 通过有效质量近似, 求解单电子的薛定谔方程, 可以得到此处附近的载流子的波函数为

$$\Psi_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (1)$$

以及能量本征值为

$$E_{\lambda}(\mathbf{k}) = \frac{\lambda\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2)$$

$\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 是载流子的波矢, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\mathbf{r} = (x, y)$, $\lambda = +1$ 代表电子, $\lambda = -1$ 指代空穴, $m^* = 0.48m_e$, m_e 为自由电子的质量 [6]. 由此可以计算得到系统的费米能 $E_F = \pi\hbar^2 n_{\lambda} / (g_s g_v m^*)$, 以及费米波矢 $\mathbf{k}_F = \sqrt{2\pi n_{\lambda} / g_s g_v}$, 式中 g_s, g_v 分别是自旋兼并能谷兼并, n_{λ} 为载流子的浓度.

2.2 电子 - 电子之间的屏蔽效应

在外场作用下, 载流子之间因屏蔽库仑势的作用发生相互散射, 从而影响载流子的动量分布. 低温下, 载流子之间的屏蔽效应变得尤其重要 [14]. 因此, 要研究低温时 MoS₂ 的电输运性质, 首先应该详细研究载流子之间的屏蔽效应. 一般载流子之间的屏蔽效应可以通过密度 - 密度关联函数确定 [15], 即

$$\Pi_{\lambda'\lambda}(\Omega, \mathbf{q}) = \frac{g_s g_v}{2} \sum_{\mathbf{k}} (1 + \lambda'\lambda A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) \frac{f[E_{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] - f[E_{\lambda}(\mathbf{k})]}{\hbar\Omega + E_{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\lambda}(\mathbf{k}) + i\delta}, \quad (3)$$

$A_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = (k + q\cos\theta) / |\mathbf{k} + \mathbf{q}|$, θ 是 \mathbf{k} 与 \mathbf{q} 的夹角. 这里, 我们考虑电子型掺杂的 MoS₂ 样品 (器件), 只需要考虑电子 - 电子之间的屏蔽效应和导带内的电子跃迁 ($\lambda = \lambda' = +1$). 由上面的密度 - 密度关联函数, 通过无规相近似可以计算得到 MoS₂ 系统低温时的电子 - 电子屏蔽长度

$$q_s = g_s g_v \frac{m^* e^2}{\epsilon \hbar^2}, \quad (4)$$

$\epsilon = 7$ 是 MoS₂ 的平均介电常数 [16].

2.3 电子 - 杂质散射

在极低温的条件下 ($T \rightarrow 0$), 载流子 - 带电杂质散射是载流子主要的散射弛豫通道 [17]. 与三维的

半导体体系一样, 单层二维的 MoS_2 载流子 - 杂质相互作用哈密顿量为

$$H_{c-i} = \frac{Ze^2}{\epsilon'} \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|}, \quad (5)$$

其中, $\mathbf{R} = (r, 0)$ 是 MoS_2 层中载流子在柱坐标系的位置坐标, $\mathbf{R}_a = (r_a, z_a)$ 是带电量为 Z 的杂质的位置坐标, ϵ' 是所用衬底介质的介电常数. 我们将整个二硫化钼 - 衬底系统分离成独立的两部分, 即载流子态 $|\mathbf{k}, \lambda\rangle$ 和杂质态 $|I\rangle$. 这样整个体系的状态就可以写成两者乘积的形式 $|\mathbf{k}, \lambda; I\rangle = |\mathbf{k}, \lambda\rangle |I\rangle$. 不考虑载流子间的屏蔽效应, 载流子与杂质的相互作用矩阵元可以写成

$$U_{\lambda'\lambda}(q, \mathbf{R}_a) = \langle \mathbf{k}', \lambda'; I | H_{c-i} | \mathbf{k}, \lambda; I \rangle \\ = \frac{Ze^2}{\epsilon' q} e^{-q|z_a|} \sqrt{n_i(z_a)} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a}, \quad (6)$$

这里 $\langle I | I \rangle = \sqrt{n_i(z_a)}$, $n_i(z)$ 是杂质在 Z 方向上 (垂直二硫化钼表面) 的分布, 并且认为杂质在 X - Y 平面上均匀分布. $q = (q_x, q_y)$ 是载流子散射过程中动量的改变. 由费米黄金定则, 可以得到稳态下杂质散射时, 载流子从状态 $|\mathbf{k}, \lambda\rangle$ 跃迁到状态 $|\mathbf{k}', \lambda'\rangle$ 的概率

$$W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\lambda'\lambda}(q)|^2 \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \delta[E_{\lambda'}(\mathbf{k}') - E_{\lambda}(\mathbf{k})], \quad (7)$$

其中, $|U_{\lambda'\lambda}(q)|^2 = (Ze^2/\epsilon' q)^2 \int dz n_i(z) e^{-2q|z|}$ 为跃迁矩阵元的平方.

利用二硫化钼 - 衬底系统可以制作 MoS_2 基的场效应管电子器件^[3,5], 该系统可以通过门电压有效地调节载流子的浓度. 在正 (负) 门电压作用下, 电子 (空穴) 会在靠近 MoS_2 的衬底层上留下对应的空穴 (电子). 这种 MoS_2 器件模型与目前研究广泛的石墨烯电子场效应管器件模型一样, 总是不可避免地存在一种带电散射杂质, 一般可以认为其有效的杂质分布可以非常接近 MoS_2 层, 因此存在 $n_i(z) = n_i \delta(z)$ ^[18], n_i 是带电杂质的面密度. 与一般的实验研究一样, 研究中考虑的是二硫化钼 - 氧化硅 - 硅系统. 对于这样一个体系, 在实际数值计算时, MoS_2 的介电常数 $\epsilon \simeq 7$ ^[16], SiO_2 的介电常数是 $\epsilon' \simeq 4.0$ ^[18]. 在实际计算中, 选取的电荷数 $Z = 1$, 电子浓度 n_e 约 10^{13} cm^{-2} , 相应带电杂质浓度 n_i 约为 $10^{12} - 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 这些参数的选取都和实验中实际样品的参数一致^[3,5].

2.4 动量平衡方程

低温时材料的电输运性质反映了材料最基本的电学性质, 对理解和研究 MoS_2 电子器件有非常重要的意义和价值. 低温弱电场时, 对于一个制作良好、可以用于制作实际器件的样品材料, 一般可以忽略缺陷和无序的散射作用, 载流子主要受到带电杂质的散射, 此时载流子散射时遵守动量守恒. 散射前后载流子能量改变非常小. 此情况下能量平衡可以忽略, 动量平衡起决定作用, 只需要利用 MoS_2 系统的动量平衡方程, 就能得到 MoS_2 的载流子输运方程, 便可以研究低温下 MoS_2 系统的稳态电输运特性.

首先从稳态时的玻尔兹曼方程出发, 研究材料在外加稳态电场时的响应. 有电场存在时, 稳态半经典的玻尔兹曼输运方程为

$$-\frac{eF_x}{\hbar} \frac{\partial f_{\lambda}(\mathbf{k})}{\partial k_x} = g_s g_v \sum_{\mathbf{k}', \lambda'} [f_{\lambda'}(\mathbf{k}') W_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f_{\lambda}(\mathbf{k}) W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k})], \quad (8)$$

式中, F_x 为所加电场强度, $W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ 为散射导致的跃迁概率, $f_{\lambda}(\mathbf{k}) = f[E_{\lambda}(\mathbf{k}^*)]$ 是电场存在时载流子的能量分布函数, 其中 $\mathbf{k}_{\lambda}^* = \mathbf{k} - \mathbf{k}_v^{\lambda}$, $\mathbf{k}_v^{\lambda} = m^* \mathbf{v}_{\lambda} / \hbar$ 是由于电场导致载流子在动量空间的动量变化, $\mathbf{v}_{\lambda} = (v_x, 0)$ 是电场 F_x 产生的载流子的漂移速度. 该玻尔兹曼方程平衡方程属于微分积分方程, 一般直接求解上述方程得到分布函数非常困难, 尤其当右边的散射项十分复杂时. 利用平衡方程的办法可以解决上述困难, 在玻尔兹曼方程的两边同时乘以 k_x 然后两端对 $g_s g_v \sum_{\mathbf{k}}$ 求和, 便可整理得到如下动量平衡方程

$$\frac{eF_x}{\hbar} n_{\lambda} = (g_s g_v)^2 \sum_{\substack{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \\ \lambda', \lambda}} (k'_x - k_x) f_{\lambda}(\mathbf{k}) W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (9)$$

动量平衡方程表示外场对载流子系统动量的改变等于散射源 (杂质、缺陷、声子等) 对载流子系统动量的改变. 当电场比较弱时, 载流子的漂移速度远远小于费米速度. 由此可进行弱场下的泰勒展开, 即 $f[E_{\lambda}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_v)] \simeq f[E_{\lambda}(\mathbf{k})] - \lambda \hbar v_x f'(E)$, 这里 $f'(x) = df(x)/dx$. 因此, 上面的动量平衡方程可以化为

$$\frac{eF_x}{\hbar} n_{\lambda} = -16 \sum_{\substack{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \\ \lambda', \lambda}} \hbar v_x k_x (k'_x - k_x) W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (10)$$

低温时 ($T \rightarrow 0$), 考虑电子型掺杂的 MoS_2 样品, 即此时费米面在导带中, $f_{\pm}[E(\mathbf{k})] = -\delta[E_F - E]$.

考虑电子 - 杂质之间的散射, 同时考虑电子 - 电子之间的屏蔽效应, 这样跃迁概率中的跃迁矩阵元就变为包含电子屏蔽效应的有效跃迁矩阵元, 即

$$|U_{\lambda\lambda}(q)|^2 = \left[\frac{Ze^2\sqrt{n_i}}{\epsilon'(q+q_s)} \right]^2, \quad (11)$$

此时, 动量平衡方程 (10) 简化为

$$\frac{F_x}{v_x} = \frac{4Z^2e^3m^*E_{F_i}}{\pi^3\hbar^5\epsilon'^2n_e} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta \cos\alpha \frac{\cos\beta - \cos\alpha}{(q+q_s)^2}, \quad (12)$$

上式中 $q = \hbar E_F \sqrt{(1 - \cos\phi)/m^*}$, ϕ 是 \mathbf{k} 和 \mathbf{k}' 之间的夹角, α 和 β 分别是 \mathbf{k} 和 \mathbf{k}' 与 x 轴的夹角, 并且由矢量分析可知 $\phi = |\alpha - \beta|$.

2.5 迁移率

迁移率是指载流子 (电子和空穴) 在单位电场作用下的平均漂移速度, 即载流子在电场作用下运动速度快慢的量度, 定义为 $\mu_e = -v_x/F_x$ (负号是由于电子运动速度与电场方向相反). 迁移率是衡量半导体导电性能的重要参数, 它决定半导体材料的电导率, 影响器件的工作速度和频率. 根据迁移率的定义, 由动量平衡方程 (12) 可直接分析得到 MoS₂ 低温时的电子迁移率为

$$\frac{1}{\mu_e} = \frac{1}{c} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2\phi}{(\sin\phi+a)^2} d\phi, \quad (13)$$

其中

$$c = \frac{\pi^2\hbar^3\epsilon'^2n_e}{4e^3m^{*2}n_i}, \quad a = \frac{4e^2m^*}{\sqrt{2\pi n_e}\hbar^2\epsilon'}$$

上面的电子迁移率的结果进一步分析可以得到解析的表达式, 即

$$\mu_e = 2c(a^2 - 1)^{3/2} \left\{ \sqrt{a^2 - 1} [(a^2 - 1)\pi - 2a] + 4a(a^2 - 2) \left[\operatorname{arccot} \left(\sqrt{a^2 - 1} \right) - \operatorname{arctan} \left(\frac{a+1}{\sqrt{a^2 - 1}} \right) \right] \right\}^{-1}. \quad (14)$$

通过该解析表达式, 可以非常方便地研究低温时 MoS₂ 系统的电子输运性质, 很明显可以得到 $c \sim \epsilon'^2 \sim n_e/n_i$, 而 $a \sim \sqrt{n_e}^{-1}$, 当电子浓度增大时, $a \rightarrow 0$, 此时即高浓度 MoS₂ 系统的电子迁移率是 $\mu_e = \pi c/2$.

3 结果与讨论

由上面的方程 (13) 和 (14) 可知, 低温时 MoS₂ 的电子迁移率正比于衬底材料的介电常数的平方, 即 $\mu_e \sim c \sim \epsilon'^2$. 由此可知, 选用介电常数较高的材料, 可以有效提高该系统的电子迁移率. 因此, 在最初的关于 MoS₂ 场效应管的电输运性质的研究中, 研究人员增加了一层高介电常数材料二氧化铪 HfO₂ (其介电常数可以高达 25) 来提高载流子的迁移率 [3,9]. 同时, 注意到该研究结果不仅适用于 MoS₂, 也适用于类似场效应管模型的其他半导体材料. 目前技术上应用成熟的衬底材料就是本文理论计算时用的 SiO₂, 但是 SiO₂ 的介电常数相对较低. 目前研究人员正在研究高介电常数的 SiO₂ 衬底或者高介电常数的 SiO₂ 的替代材料, 例如上面提到的 HfO₂.

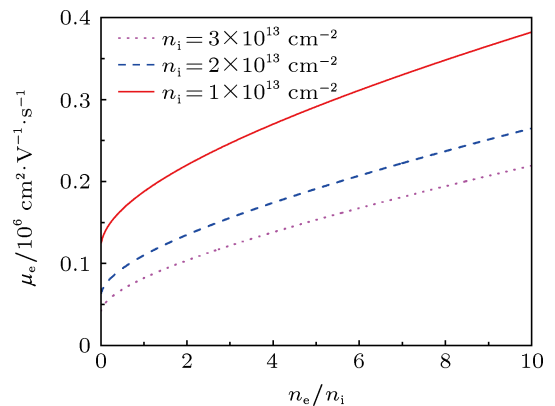


图 1 不同杂质浓度时, MoS₂ 电子迁移率 μ_e 随电子浓度与有效杂质浓度的比率 n_e/n_i 的变化关系

图 1 显示不同杂质浓度时, MoS₂ 电子迁移率 μ_e 随电子浓度与有效杂质浓度的比率 n_e/n_i 的变化关系. 计算时, 分别选取不同的杂质浓度, 逐渐改变电子的浓度, 从而也就改变了电子浓度与有效杂质浓度的比率 n_e/n_i , 由此计算电子的迁移率. 由于是低温下的计算结果, 并且只考虑了带电杂质的散射作用, 因此得到了非常高的迁移率, 并且该计算结果与一般半导体材料中只考虑带电杂质的散射时的计算结果一致 [5,19,20]. 从图 1 中明显看出, 电子迁移率与电子浓度和有效杂质浓度的比率 n_e/n_i 成准线性关系, 即电子迁移率随 n_e/n_i 增大线性增大, 尤其随着比率的增大, 线性关系更加明显, 并且注意到该结果与低温下石墨烯系统的电子迁移率随 n_e/n_i 的变化类似 [17]. 导致上述现象的物理原因是电子浓度越高, 电子 - 电子之间的屏蔽效应就越

弱, 即计算迁移率时 $a \sim 1/\sqrt{n_c}$ 的作用越小, 从而得到 $\mu_c \sim c \sim n_c/n_i$. 由此可得, 适当提高电子浓度, 同时降低带电杂质的浓度, 可以提高 MoS₂ 系统的电子迁移率. 其中的物理原因是: 由于是在低温的条件下, 当载流子运动到电离杂质附近时, 由于库仑势场的作用, 使载流子的运动方向发生改变而产生散射, 从而降低载流子的平均漂移速度; 当电子浓度一定时, 杂质浓度越大, 载流子遭受散射的概率就越大, 遭受散射的载流子就越多, 导致载流子的平均漂移速度就越小, 即 MoS₂ 系统的电子迁移率就越小.

4 结论

单层的 MoS₂ 是禁带宽度为 1.8 eV 的直接带

隙二维半导体材料, 能够制造出高电流开关比的低能耗场效应晶体管, 非常有希望用于制造下一代纳米电子器件和设备. 本文利用半经典的玻尔兹曼动量平衡方程研究了 MoS₂ 低温时的电输运性质. 通过计算研究得到了 MoS₂ 的电子迁移率解析表达式, 研究发现使用高介电常数的材料作为 MoS₂ 电子器件的衬底; 降低 MoS₂ 系统的杂质浓度, 适当提高系统的载流子浓度可以有效提高系统的迁移率. 本文的理论研究结果可以为器件的研究和实际应用提供一定的理论依据. 最后应当指出, 本文仅仅研究了低温时的电输运性质, 尽管如此, 依然得到了一些有价值的研究结果. 实际的电子器件要求在室温下工作. 在后续的研究工作中, 我们将研究系统室温时的电输运性质, 系统研究该材料的电学性质以及作为新型器件的应用价值.

- [1] Castro Neto A H, Novoselov K 2011 *Rep. Prog. Phys.* **74** 082501
- [2] Liu W L, Chen C, Shen Q W 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 227
- [3] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nature Nanotechnol.* **6** 147
- [4] Wang H, Yu L L, Lee Y H 2012 *Nano Lett.* **12** 4674
- [5] Kim S, Konar A, Hwang W S, Lee J H, Lee J Y, Yang J Y, Jung C H, Kim H S, Yoo J B, Choi J Y, Jin Y W, Lee S Y, Jena D D, Choi W, Kim K 2012 *Nature Commun.* **3** 1011
- [6] Mak K F, C Lee H G, Hone J, Shan J, Heinz T F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [7] Yin Z Y, Li H, Li H, Jiang L, Shi Y M, Sun Y H, Lu G, Zhang Q, Chen X D, Zhang H 2012 *ACS Nano* **6** 74
- [8] Alam K, Lake R K 2012 *IEEE Trans. Electron DEC.* **59** 3250
- [9] Wang Q H, Kourosh K Z, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nature Nanotechnol.* **7** 699
- [10] Lee H S, Min S W, Chang Y G, Park M K, Nam T W, Kim H, Kim J H, Ryu S M, Im S 2012 *Nano Lett.* **12** 3695
- [11] Yang H J, Heo J S, Park S J, Song H J, Seo D H 2012 *Science* **336** 1140
- [12] Wu M S, Xu B, Liu G, Ouyang C Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 227102 (in Chinese) [吴木生, 徐波, 刘刚, 欧阳楚英 2012 物理学报 **61** 227102]
- [13] Ye L X 2007 *Semiconductor Physics* (Vol. 1) (BeiJing: Higher Education Press) (in Chinese) [叶良修 2007 半导体物理学 (上卷) (北京高等教育出版社)]
- [14] Lei X L, Ting C S 1985 *J. Phys. C* **18** 77
- [15] Mahan G D 2000 *Many-Particle Physics* (New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers) p325
- [16] Zhang X L, Hayward D O, Mingos D M 2002 *Catalysis Lett.* **84** 225
- [17] Hwang E H, Adam S, Sarma S D 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 186806
- [18] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Zhang D Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [19] Zhang J F, Yue H, Zhang J C, Ni J Y 2008 *Sci. China F* **51** 780
- [20] Ando T 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 437

Investigation on mobility of single-layer MoS₂ at low temperature*

Dong Hai-Ming[†]

(*Department of Physics, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China*)

(Received 26 June 2013; revised manuscript received 10 July 2013)

Abstract

The two-dimensional, single-layer MoS₂ with a direct band-gap of 1.8 eV, which makes it very suitable for nanoelectronic applications, such as field-effect transistors, has aroused great interest because of its distinctive electronic, optical, and catalytic properties. In this paper, we present a detailed theoretical study of the electronic transport property of single-layer MoS₂ on the basis of the usual momentum-balance equation. We obtain the analytical electric mobility at low temperature. It shows that the electric mobility of MoS₂ is linear with respect to substrate dielectric constant squared and the rate between the electron density and charged impurity density at low temperature. It is found that by using relatively high dielectric constant materials as substrates, reducing impurity densities and increasing carrier densities high mobilities in MoS₂-substrate wafer systems can be achieved.

Keywords: MoS₂, mobility, electronic transport, balance-equation

PACS: 61.82.Fk, 62.25.De, 72.20.Fr, 72.20.Jv

DOI: 10.7498/aps.62.206101

* Project supported by the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. 2013QNA29).

[†] Corresponding author. E-mail: hmdong@cumt.edu.cn