

不同相 NbS₂ 与 GeS₂ 构成的二维金属-半导体异质结的电接触性质*

李景辉 曹胜果[†] 韩佳凝 李占海 张振华[‡]

(长沙理工大学, 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114)

(2024 年 4 月 16 日收到; 2024 年 5 月 23 日收到修改稿)

金属-半导体异质结 (MSJ) 是研发新型器件的基础. 本文考虑利用不同相的金属 H-和 T-NbS₂ 与半导体 GeS₂ 组成不同的二维范德瓦耳斯 MSJ, 并对它们的结构稳定性、电子特性以及电接触性质进行深入研究, 重点在探索 MSJ 电接触性质对不同相金属的依赖关系. 计算的结合能、声子谱、AIMD 模拟以及力学性质研究表明, 两异质结高度稳定, 可实验制备, 且用于电子器件设计可行. 本征态 H-NbS₂/GeS₂ 和 T-NbS₂/GeS₂ 异质结分别形成了 p 型肖特基接触和准 n 型欧姆接触. 同时发现它们的肖特基势垒高度 (SBH) 和电接触类型可以通过外加电场和双轴应变来有效调控. 例如, 对于 H-NbS₂/GeS₂ 异质结, 无论施加正/负电场或平面双轴压缩, 均能实现欧姆接触, 而 T-NbS₂/GeS₂ 异质结, 仅在施加负电场时, 才能实现欧姆接触, 但需要的负电场很低, 平面双轴拉伸能导致其实现准欧姆接触. 也就是说, 当以半导体 GeS₂ 单层为场效应晶体管沟道材料, 与不同相的金属 NbS₂ 接触形成 MSJ 时, 其界面肖特基势垒有明显区别, 且在不同情形 (本征或物理调控) 中各有优势. 所以, 本研究对于理解 H(T)-NbS₂/GeS₂ 异质结电接触的物理机制具有重要意义, 特别是为如何选择合适金属电极以研发高性能电子器件提供了理论参考.

关键词: 金属-半导体异质结, 肖特基势垒, 肖特基接触, 欧姆接触, 物理场调控

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv, 73.30.+y

DOI: 10.7498/aps.73.20240530

1 引言

最近研究表明, 通过堆叠两种或更多不同的二维 (2D) 材料构建范德瓦耳斯异质结 (vdWHs) 已成为改善 2D 材料的性能并扩展其应用范围的常用策略^[1-3], 它不仅能结合不同 2D 材料的优点, 而且还能引入新的物理特性^[4,5]. vdWHs 在实验中成功实现并得到实际应用后不久便成为热点, 迄今已合成许多 vdWHs, 如石墨烯/h-BN^[6]、石墨烯/磷烯^[7]、石墨烯/MoS₂^[8] 以及石墨烯/PbI₂^[9] 等已被实验/理论探索. 除石墨烯之外, MoS₂/BP^[10], ZrS₃/MXY

($M = \text{Mo}, \text{W}; X, Y = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$)^[11] 以及各种 vdWHs 也已被理论研究用于基于器件的应用^[12,13]. vdWH 是材料设计领域一个令人兴奋的新机遇, 不同的单层材料通过集成或杂化实现了优于单个组分的电子和光电特性^[14,15]. 此外, vdWHs 被认为是构建下一代纳米器件有前途的方法.

2D 金属-半导体垂直异质结在纳米器件设计中起着至关重要的作用^[16,17], 当金属性与半导体性 2D 材料接触构成异质结 (MSJ) 时, 由于两单层存在费米能级差, 载流子会发生转移^[18], 并产生内建电场, 使得接触后的半导体能带发生弯曲, 即在金属-半导体界面上形成能带的费米钉扎 (FLP)

* 国家自然科学基金 (批准号: 61771076) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: caoshengguo@stu.csust.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn

效应, 从而形成界面的肖特基势垒^[19]. 肖特基势垒的存在往往导致界面电阻过高, 阻碍载流子在半导体器件中输运, 严重影响其性能^[20]. 目前, 有两种方法可以降低界面电阻: 一种是减小界面势垒宽度, 使载流子可以隧穿势垒; 另一种是降低肖特基势垒高度 (SBH), 使载流子可以平稳地跃过势垒^[21]. 欧姆接触是金属和半导体之间的另一种接触方式, 指 SBH 为零的情况. 形成欧姆接触时, 半导体的电阻值最低, 能实现载流子的有效注入. 因此, 降低 SBH 以形成低电阻的欧姆接触成为实现高性能器件的前提条件.

1 T 相 GeS₂ 是典型的 IV (A) 族二硫化物, 它是间接带隙为 0.73 eV 的半导体, 具有较高的载流子迁移率和晶格热导率^[22], 其单层可以通过化学气相沉积法 (CVD) 合成^[23,24]. 迄今为止, GeS₂ 纳米片的各种物理性质已经得到了广泛的研究. Gao 等^[25] 研究了 Pd 修饰 GeS₂ 单层的吸附行为及电子、光学和气敏特性. Ruan 等^[26] 研究发现拉伸应变可提高单层 GeS₂ 的热电性能. Mao 和 Zhang^[27] 研究了双层 GeS₂ 在外加电场和应变下对其结构、电子和光学性质的影响. 最近, 2D NbS₂ 因其可用作新型金属电极而备受关注, 它可以通过机械/化学剥离方法合成^[28]. Shin 等^[29] 研究了 NbS₂/MoS₂ 异质结中的电荷传输, 他们计算了 NbS₂ 和 MoS₂ 的功函数, 并进一步测量了相关的肖特基势垒, 结果表明该势垒会影响电荷转移并导致 NbS₂ 下方 MoS₂ 中的载流子耗尽, 此外, 他们还发现 NbS₂ 和 MoS₂ 之间的 vdW 界面有利于平面内的载流子传输, 而且可以通过施加偏压和栅极电压来调节电荷传输. Kim 等^[30] 报道了 2D NbS₂ 纳米片的室温 NO₂ 传感特性及其传感机制, 研究表明, 根据合成条件不同, 具有不同边缘构型的 NbS₂ 纳米片的传感能力也不同, 这项研究拓宽了 2D NbS₂ 在气敏应用领域的潜力. 此外, NbS₂ 单层被认为是用于未来应用有前景的能量存储^[31] 材料.

为了一步探索不同相金属性 NbS₂ (H 或 T 相) 单层与半导体性 GeS₂ 单层的物理特性, 并扩展其应用范围和发现新的物理现象, 考虑将其组成 2D 范德瓦耳斯 MSJ, 对它们的结构稳定性、电子特性以及电接触性质进行深入研究, 重点在于发现不同相金属单层与同一半导体单层构成 MSJ 时电接触性质的规律. 计算的结合能、声子谱、AIMD 模拟以及力学性质研究表明, 两异质结是高度稳定

的. 在本征态时, H-NbS₂/GeS₂ 和 T-NbS₂/GeS₂ 异质结分别形成了 p 型肖特基接触和准 n 型欧姆接触, 肖特基势垒小, 隧穿势垒电阻低, 在电子器件中具有重要的应用潜力. 同时发现对于 H-NbS₂/GeS₂ 异质结, 无论施加正/负电场或平面双轴压缩, 均能实现欧姆接触, 而 T-NbS₂/GeS₂ 异质结, 仅在施加负电场时, 才能实现欧姆接触, 但需要的负电场很低, 平面双轴拉伸能导致其实现准欧姆接触. 所以, 本研究为如何选择合适金属电极以研发高性能电子器件提供了理论参考.

2 计算细节

模型的几何优化、结构稳定性的评估、电子结构与力学性质的计算都采用基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理方法. 所有这些计算均在 Atomistix ToolKit (ATK) 软件包^[32] 中实现, 它已被广泛应用于研究低维材料^[33-36]. 在计算中为求解 Kohn-Sham 方程, 采用广义梯度近似 (GGA) 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 函数^[37] 作为交换关联势, 采用 Troullier-Martin 模守恒赝势^[38] 描述原子实与价电子间的相互作用. 价电子的波函数由原子轨道的线性组合 (LCAO) 展开, 其基函数组选用 DZP (Double ζ + Polarization)^[39]. 为了适当地考虑界面效应, 计算中包含了界面偶极子校正和 Grimme 的 DFT-D3 方法色散校正^[40]. 使用 25 \times 25 \times 1 的 Γ 中心 k 点网格对第一布里渊区进行采样, 且采用周期性边界条件. 为了达到计算效率与精度平衡, 将能量截断半径设定为 150 Ry, 用以控制实空间积分网格区间的尺寸以及泊松方程的求解. 在研究的模型中, 为了消除模型与其“像”之间的相互作用, 在 z 方向设置了一个大于 2 nm 的真空层. 结构优化的标准为使原子间相互作用的残存力小于 0.01 eV/Å, 晶格内应力小于 0.01 GPa. 所有模型的稳定性、电子结构及其后续计算均在几何结构优化之后进行, 能量收敛标准为 10⁻⁵ eV. 为了简单起见, 将所有体系的费米能级设置为零.

3 结果与讨论

3.1 异质构建与稳定性

在构建异质结之前, 首先研究了各孤立单层的几何结构及电子性质. H-NbS₂, T-NbS₂ 与 GeS₂

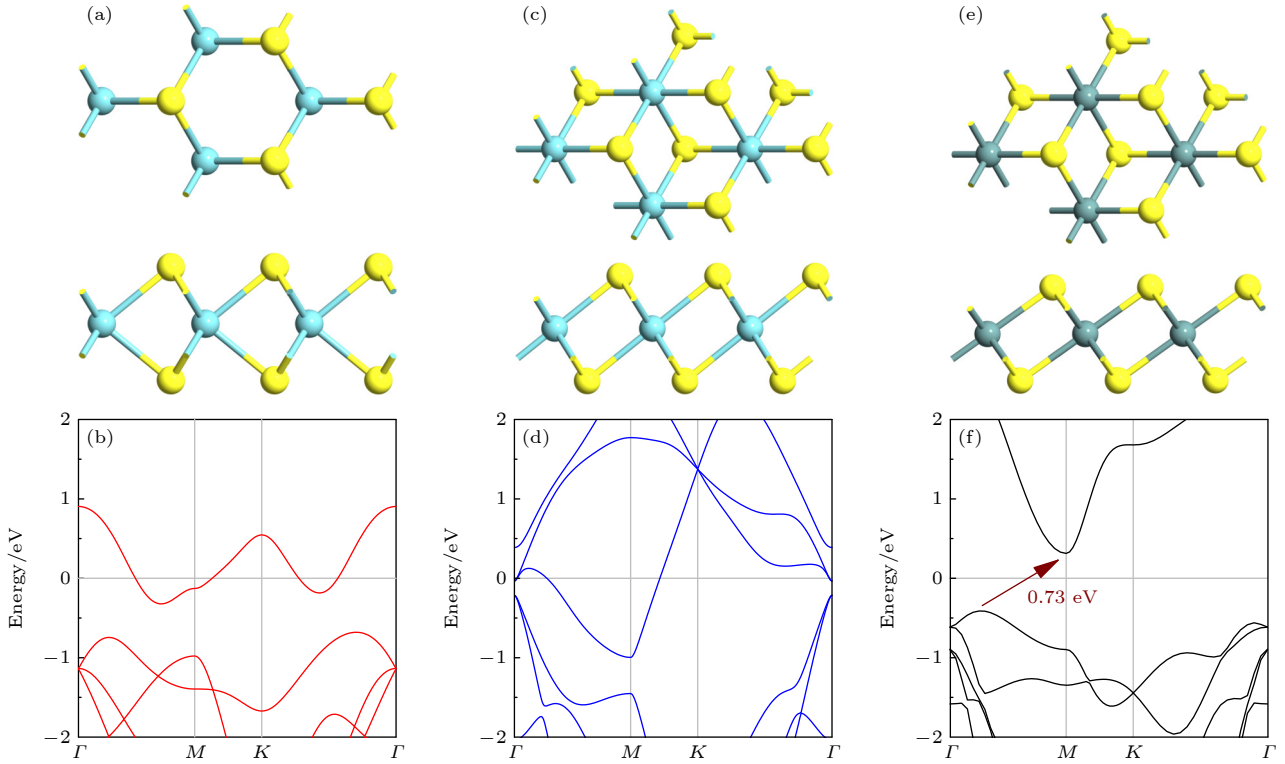

 图 1 单层原子结构正视图与侧视图 (a) H-NbS₂; (c) T-NbS₂; (e) GeS₂. 单层能带结构 (b) H-NbS₂; (d) T-NbS₂; (f) GeS₂

 Fig. 1. Top and side views of single-layer atomic structures: (a) H-NbS₂; (c) T-NbS₂; (e) GeS₂. Single-layer energy band structures: (b) H-NbS₂; (d) T-NbS₂; (f) GeS₂.

晶体分别属于 $P\bar{3}m1$, $P6m2$ 与 $P\bar{3}m1$ 空间群. 单层原子结构如图 1(a), (c), (e) 所示, H-NbS₂, T-NbS₂ 与 GeS₂ 单层晶格常数分别为 3.37, 3.39 与 3.43 Å, 厚度分别为 3.16, 3.12 与 2.82 Å, 计算的功函数分别为 6.33, 5.46 与 5.84 eV. 计算的能带结构表明, H-, T-NbS₂ 为无磁金属 (见图 1(b), (d)), GeS₂ 是间接带隙为 0.73 eV 的半导体 (见图 1(f)), 这些结果与以前的研究非常接近 [23,41].

对 3 种单层材料, 采用 1×1 的单胞来构建 H(T)-NbS₂/GeS₂ 异质结单胞. 用晶格失配率与平均绝对应变定量描述异质结的晶格匹配情况. 晶格失配率定义为 $\sigma = (\alpha_1 - \alpha_2)/\alpha_1$, 平均绝对应变定义为 $\varepsilon^{\alpha\nu} = (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{12} + \varepsilon_{22})/3$. 式中 α_1 和 α_2 分别是 GeS₂ 和 NbS₂ 的晶格常数, ε_{11} , ε_{12} 与 ε_{22} 是二维应变张量矩阵分量 [42]. 计算得 H(T)-NbS₂/GeS₂ 异质结的晶格失配率为 1.75% (1.17%), 平均绝对应变为 1.13% (0.67%). 这些结果表明构成的异质结中两单层材料具有较高的晶格匹配度. 进一步将 GeS₂ 层固定 (避免其受到机械应变的影响), 仅对 H(T)-NbS₂ 单层施加小拉伸应变, 使异质结两单层晶格完全匹配. 为了贴近实验情形, 在构建异

质结时, 考虑 6 种典型的堆垛方式, 分别命名为 A1—A6, 其优化后的正视图与侧视图如图 2(a) 所示. 这里我们考虑下层 GeS₂ 不动, 移动上层 NbS₂ 来实现不同的堆垛, 其中 A1—A3 堆垛为 NbS₂ 层的 Nb 原子分别与 GeS₂ 层中的 Ge 原子、上层 S 原子以及下层 S 原子对齐. 此后, 将 NbS₂ 单层绕水平轴翻转 180°, 用同样的对齐方法可以得到 A4—A6 堆垛结构. 从图 2(a) 可以看出, 不同堆垛方式的 NbS₂/GeS₂ 异质结优化后均保留了单层结构的完整性, 没有发生可见的形变.

为了筛选能量最稳结构, 计算 6 种堆垛方式的结合能 E_b , 其定义为

$$E_b = \frac{E_{\text{vdWH}} - E_{\text{NbS}_2} - E_{\text{GeS}_2}}{A}, \quad (1)$$

其中, E_{vdWH} , E_{NbS_2} 及 E_{GeS_2} 分别为 NbS₂/GeS₂ 异质结、单层 NbS₂ 以及单层 GeS₂ 的总能量, A 表示异质结界面面积. 计算结果如图 2(b) 所示, H(T)-NbS₂/GeS₂ 异质结在不同堆垛情况下的结合能均为负值, 这说明所有对齐方式均是稳定的. H-NbS₂/GeS₂ 异质结能量最低的结构是 A1 堆垛, T-NbS₂/GeS₂ 异质结也是 A1 堆垛, 在图 2(a) 中由两个橙色阴影区标出, 为简洁起见, 在下文中称为

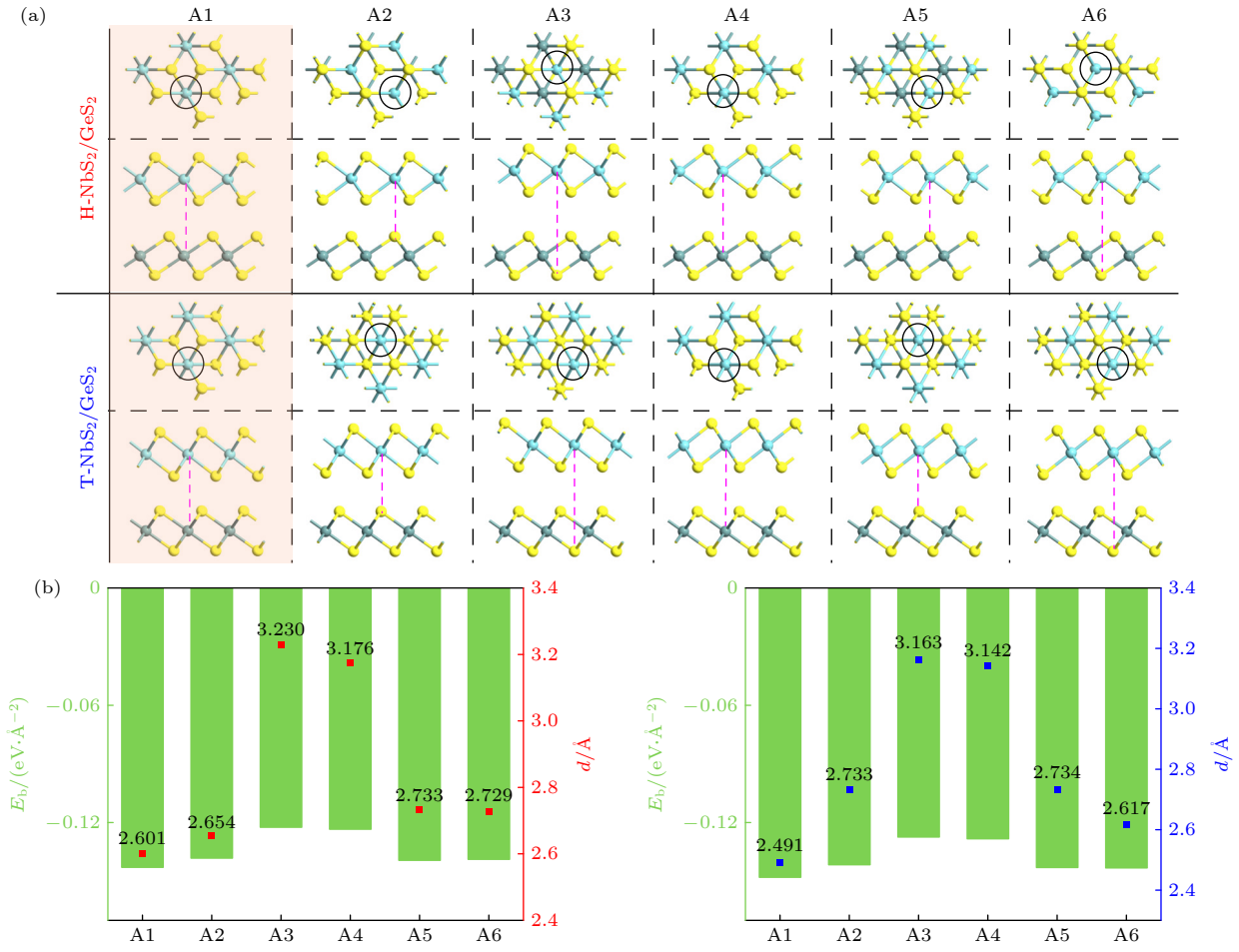


图 2 (a) H-NbS₂/GeS₂ (上图) 和 T-NbS₂/GeS₂ (下图) 的 6 种堆垛方式 A1—A6, 图中两个橙色阴影区域为最稳堆垛结构; (b) 6 种堆垛方式的 H-NbS₂/GeS₂ (左图) 和 T-NbS₂/GeS₂ (右图) 的优化层间距及对应的结合能

Fig. 2. (a) Six stacking modes A1-A6 for H-NbS₂/GeS₂ (top panel) and T-NbS₂/GeS₂ (bottom panel), with the two orange shaded regions in the figure showing the most stable stacking structures; (b) optimized interlayer spacing and corresponding binding energy of H-NbS₂/GeS₂ (left panel) and T-NbS₂/GeS₂ (right panel) for the six stacking modes.

H-A1 和 T-A1. 同时, 不同堆垛情况下的优化层间距分布在 2.491—3.23 Å 之间, 均大于两个 S 原子的共价半径之和, 这意味着在我们构建的异质结是 vdWHs, 即 NbS₂ 和 GeS₂ 单层仅通过 vdW 相互作用结合在一起, 而在界面处没有形成任何化学键. H-A1 和 T-A1 的结合能分别为 $-0.143 \text{ eV}/\text{Å}^2$ 和 $-0.148 \text{ eV}/\text{Å}^2$, 它们的结合能比多数 vdWHs 更低, 如 TaS₂/MoSi₂N₄^[43], Graphene/WSeTe^[44], NbS₂/BSe^[45] 等, 其原因主要是 H (T)-A1 异质结中 2.601 (2.491) Å 的层间距离相对较小; 然而, H (T)-A1 异质结的结合能仍然与其他 vdWHs 结果相当, 如 WSe₂/Zr₂C^[46] 和 Sb/WTe₂^[47], 这表明 H (T)-A1 异质结具有良好的能量稳定性.

为了评估 NbS₂/GeS₂ 异质结的动力学稳定性, 计算了 H-A1 和 T-A1 的声子谱, 如图 3(a), (b) 所示. 显然, 除在 Γ 点附近出现可忽略的小虚频之外, 在

布里渊区的其他地方没有出现虚频, 这一结果表明 NbS₂/GeS₂ 异质结具有较高的动力学稳定性. 为了检验 NbS₂/GeS₂ 异质结的热稳定性, 以 H-A1 和 T-A1 为例, 使用 NVT 系综中的 Nose Hoover 热浴方案在室温下 (300 K) 调用 3 个并发调温器对其进行分子动力学模拟 (AIMD), 整个模拟持续 5 ps, 模拟结果如图 3(c), (d) 所示. 显然, 模拟过程中热浴温度始终在 300 K 附近波动, 体系总能随时间的变化很小, 且可以发现异质结几何结构中的原子只是轻微地偏离原平衡位置, 但没有出现几何重构或键断裂现象. 这些结果表明 NbS₂/GeS₂ 异质结在室温条件下具有良好的热力学稳定性. 为了检验 AIMD 模拟选择的总模拟时间及积分步长是否合理, 计算了 H(T)-NbS₂/GeS₂ 范德瓦耳斯异质结所有支 (声学支和光学支) 在 Γ (0, 0, 0) 点处的振动模式. 结果表明, 与范德瓦耳斯层间“呼吸”

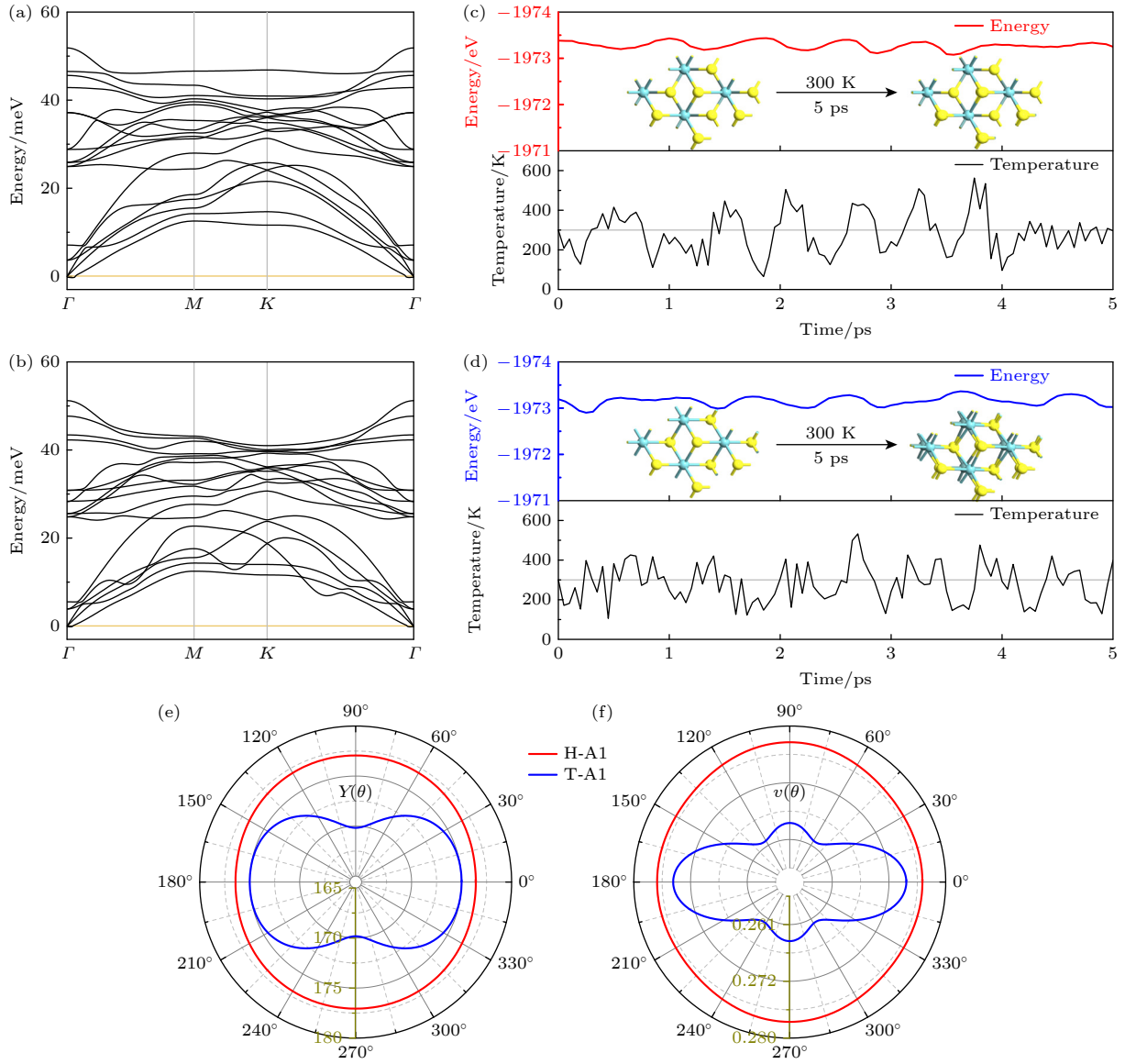


图3 (a) H-A1和(b) T-A1的声子谱. (c) H-A1和(d) T-A1 300 K的AIMD模拟. H-A1和T-A1的(e) 杨氏模量 Y 和(f) 泊松比 ν 随面内角 θ 的变化

Fig. 3. Phonon spectra of (a) H-A1 and (b) T-A1. AIMD simulations at 300 K of (c) H-A1 and (d) T-A1. Variation of (e) Young's modulus Y and (f) Poisson's ratio ν with the in-plane angle for H-A1 and T-A1.

(层进层出) 相关的 H-NbS₂/GeS₂ (T-NbS₂/GeS₂) 模(mode) 为 5 (5), 能量为 7.09 (5.52) meV, 波数为 57.19 (44.56) cm⁻¹, 声子群速度为 24.95 (16.51) m/s. 计算得 H-NbS₂/GeS₂ 与 T-NbS₂/GeS₂ 范德瓦耳斯异质结的振动周期分别为 0.25 与 0.43 ps, 两数值均比总模拟时间 (5 ps) 小 1 个数量级, 且比 AIMD 的积分步长 dt (1 fs) 大 2 个数量级. 因此, 我们的 AIMD 模拟选择的总模拟时间及积分步长是合理的.

下文讨论异质结的力学 (机械) 稳定性. 我们使用应力-应变关系 $\sigma = C \cdot \varepsilon$ 计算 NbS₂/GeS₂ 异质结的弹性常数, 其中 σ , C 和 ε 分别是应力张

量、弹性常数和应变张量矩阵. 我们对 H-A1 和 T-A1 的菱形晶胞施加 0.2% 的最大应变, 以确保系统既处于线性应变范围内, 又能在应力作用下发生显著变化. 计算得到 H-A1 (T-A1) 的 4 个独立弹性常数分别为 $C_{11} = 191.10$ (188.79), $C_{12} = 53.07$ (50.28), $C_{22} = 191.79$ (183.21) 和 $C_{66} = 69.27$ (68.55) N/m. 显然, H-A1 和 T-A1 都满足 Born-Huang 稳定性准则^[48]: $C_{11} > |C_{12}|$, $C_{22} > 0$, $C_{66} > 0$, $C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0$, 这意味着两个异质结都是力学稳定的. 基于这些弹性常数, 利用下列公式可以得出杨氏模量 $Y(\theta)$ 和泊松比 $\nu(\theta)$ 随面内角 θ 的变化关系^[49]:

$$Y(\theta) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}\sin^4\theta + \ell\sin^2\theta\cos^2\theta + C_{22}\cos^4\theta}, \quad (2)$$

$$v(\theta) = \frac{C_{12}(\sin^4\theta + \cos^4\theta) - \chi\sin^2\theta\cos^2\theta}{C_{11}\sin^4\theta + \ell\sin^2\theta\cos^2\theta + C_{22}\cos^4\theta}, \quad (3)$$

其中,

$$\ell = (C_{11}C_{22} - C_{12}^2)/C_{66} - 2C_{12},$$

$$\chi = (C_{12}^2 - C_{11}C_{22})/C_{66} + C_{11} + C_{22}.$$

H-A1 和 T-A1 的 $Y(\theta)$ 和 $v(\theta)$ 如图 3(e), (f) 所示, H-A1 的 $Y(\theta)$ 和 $v(\theta)$ 是准各向同性的, 而 T-A1 的 $Y(\theta)$ 和 $v(\theta)$ 是各向异性的. 此外, H-A1 的杨氏模量和泊松比总是大于 T-A1 的杨氏模量和泊松比, 这与具有不同相 (H 相或 T 相) 的 NbS₂ 单层原子结构不同有关. 计算得到 H-A1 (T-A1) 最小的杨氏模量为 176.42 (169.82) N/m, 比 SnS/SnSSe 异质结 (76.246—85.913 N/m)^[50] 更高, 且与 MoS₂ (~170 N/m)^[51] 相当, 这表明 T-A1 和 H-A1 具有与 MoS₂ 单层相同的机械强度. 与此同时, 计算得到的泊松比处于合适的范围内 (0—0.5)^[52], 这意味着 T-A1 和 H-A1 可以用来做电极或沟道材料.

为了进一步检验异质结用于保持平面结构抵抗其自身重力的刚度, 使用 $\bar{h}/L \approx (\rho g L / Y^{2D})^{1/3}$ 计算 NbS₂/GeS₂ 异质结的平面外形变, 其中, \bar{h} , L , ρ , g 和 Y^{2D} 分别表示平面外形变、异质结的近宏观长度、表面密度、重力加速度以及 2D 杨氏模量 $Y^{2D} = (C_{11}^2 - C_{12}^2)/C_{11}$. 计算得到 T-A1 和 H-A1 的表面密度均为 4.8×10^{-6} kg/m², 取 L 为 100 μm, 则两异质结的 \bar{h}/L 均为 2.99×10^4 , 也就是说, 在 100 μm 范围内, NbS₂/GeS₂ 异质结产生的重力弯曲仅为 10^{-4} 数量级. 这一结果表明在近宏观尺寸内, 两种异质结不仅能支撑自身重力, 还能承受额外负载及各种意外冲击.

总之, 计算的结合能、声子谱、AIMD 模拟以及力学性质研究表明, NbS₂/GeS₂ 异质结高度稳定, 完全可能实验制备, 且用于电子器件设计可行.

3.2 异质结电子结构及电接触性质

计算得到的 H-A1 与 T-A1 的投影能带 (PBS) 分别如图 4(a), (b) 所示, 其中红 (蓝) 色能带表示由 H(T)-NbS₂ 贡献, 黑色能带由 GeS₂ 贡献. 可以看出, 各孤立单层时的能带结构特征在异质结中能较好保留, 这也进一步说明了异质结层间相互作用

是弱的 vdW 相互作用. 此外, 能看到 GeS₂ 的投影能带结构在 H-A1 (T-A1) 中有一定的上 (下) 移, 如何理解这一现象? 由于金属与半导体间费米能级存在差异, 构成异质结后电子将通过界面进行转移, 例如在 H-A1 中, 由于 H-NbS₂ 层的费米能级 (-6.33 eV) 低于 GeS₂ 层的费米能级 (-5.84 eV), 所以电子会自发地从 GeS₂ 层转移至 H-NbS₂ 层, 使得 GeS₂ 层为 p 型掺杂, 导致其费米能级下移, 这等效于 GeS₂ 的投影能带结构相对费米能级上移. 而在 T-A1 中, 情况刚好相反, 由于 T-NbS₂ 层的费米能级 (-5.46 eV) 高于 GeS₂ 层的费米能级 (-5.84 eV), 所以电子会自发地从 T-NbS₂ 层转移至 GeS₂ 层, 使得 GeS₂ 层为 n 型掺杂, 导致其费米能级上移, 这等效于 GeS₂ 的投影能带结构相对费米能级下移.

为了清楚呈现 H-A1 和 T-A1 界面上的电荷转移, 计算了沿 z 轴方向的电荷密度差 $\Delta\rho(z)$, 定义为

$$\Delta\rho(z) = \rho_{\text{NbS}_2/\text{GeS}_2}(z) - \rho_{\text{NbS}_2}(z) - \rho_{\text{GeS}_2}(z), \quad (4)$$

其中 $\rho_{\text{NbS}_2/\text{GeS}_2}(z)$, $\rho_{\text{NbS}_2}(z)$ 及 $\rho_{\text{GeS}_2}(z)$ 分别表示 H-A1 (T-A1)、孤立单层 NbS₂ 与 GeS₂ 在 z 轴方向的电荷密度, 计算结果如图 4(c), (d) 所示, 其中正值表示得到电子, 负值表示失去电子. 可以看出, 对于 H-A1, 整体而言, GeS₂ 层失电子而 H-NbS₂ 层得电子, 这导致了 GeS₂ (H-NbS₂) 层的 p (n) 型掺杂. 而对于 T-A1, 整体而言, 其界面处电荷转移方向与 H-A1 相反, 使得 GeS₂ (T-NbS₂) 层的 n (p) 型掺杂, 这些结果与上述分析一致.

为了更直观了解这两个异质结的电荷转移情况, 计算 H-A1 和 T-A1 的空间电荷密度差, 其定义为

$$\Delta\rho(x, y, z) = \rho_{\text{NbS}_2/\text{GeS}_2}(x, y, z) - \rho_{\text{NbS}_2}(x, y, z) - \rho_{\text{GeS}_2}(x, y, z), \quad (5)$$

其中 $\rho_{\text{NbS}_2/\text{GeS}_2}(x, y, z)$, $\rho_{\text{NbS}_2}(x, y, z)$ 及 $\rho_{\text{GeS}_2}(x, y, z)$ 分别表示 H-A1 (T-A1)、孤立单层 NbS₂ 与孤立单层 GeS₂ 在 (x, y, z) 处的电荷密度. 计算结果如图 4(c), (d) 中插图所示, 红色 (蓝色) 表示电子的累积 (耗尽). 可以直观地看到, 对于 H-A1, 电子从 GeS₂ 层转移到 H-NbS₂ 层, 而在 T-A1 中, 电子从 T-NbS₂ 层转移到 GeS₂ 层, 这与上述计算的沿 z 轴方向的电荷密度差结果相一致. 电子转移导致两单层间形成内建电场 E_{in} , 所以在 H-A1 中, 内建电场由 GeS₂

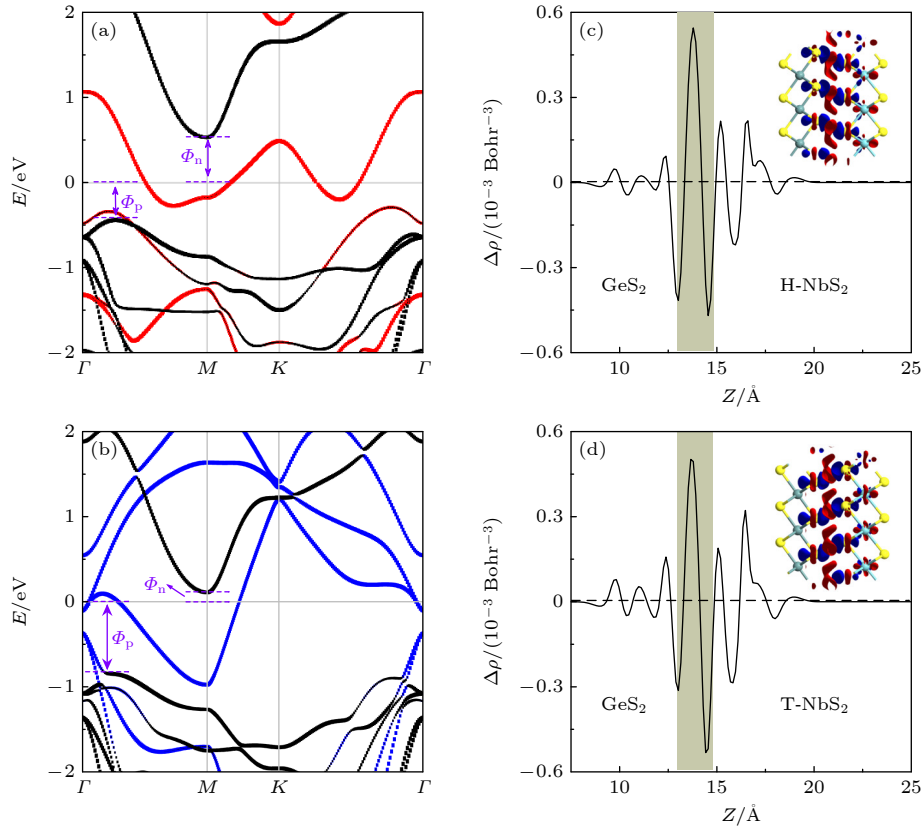


图 4 异质结投影能带结构 (a) H-A1, (b) T-A1. 沿 z 轴方向的电荷密度差及三维电荷密度差 (c) H-A1, (d) T-A1; 插图中红色和蓝色分别代表电子积累和消耗, 等值面设为 $0.0005 \text{ e}/\text{\AA}^3$

Fig. 4. Projected band structures of heterojunctions: (a) H-A1; (b) T-A1. Charge density difference along the z -axis direction and three-dimensional charge density difference: (c) H-A1; (d) T-A1, where the red and blue in the inset represent electron accumulation and depletion, respectively, and the isosurfaces are set to $0.0005 \text{ e}/\text{\AA}^3$.

层指向 H-NbS₂ 层, 而在 T-A1 中, 内建电场从 T-NbS₂ 层指向 GeS₂ 层.

下面讨论半导体-金属异质结的电接触性质. 基于金属-半导体异质结的 Schottky-Mott 规则^[46], n 型 SBH (Φ_n) 定义为半导体层的导带最低 (CBM, E_C) 与费米能级 (E_F) 之间的能量差, p 型 SBH (Φ_p) 定义为费米能级 (E_F) 与半导体层的价带最高 (VBM, E_V) 之间的能量差, 即

$$\Phi_n = E_C - E_F, \quad \Phi_p = E_F - E_V, \quad (6)$$

如果 SBH 满足 $\Phi_n < \Phi_p$ ($\Phi_n > \Phi_p$), 则对应 n (p) 型肖特基接触. 若 Φ_n 或 $\Phi_p \leq 0$, 便形成了欧姆接触. 从图 4(a), (b) 所示的投影能带结构可以看出, 由于只有弱的 vdW 相互作用, NbS₂ 和 GeS₂ 层之间没有发生明显的轨道杂化, 这使得 NbS₂/GeS₂ 异质结避免了 FLP. H-A1 和 T-A1 的 Φ_n (Φ_p) 分别为 0.534 (0.434) 和 0.11 (0.845) eV, 这表明 H-A1 和 T-A1 在金属-半导体界面处分别形成 p 型肖特基接触和准 n 型欧姆接触. T-A1 所形成的 Φ_n 低

于多数金属-半导体异质结, 例如, 石墨烯/InS^[53], 石墨烯/WS₂^[54], 石墨烯/WSSe^[21], 石墨烯/MoSi₂N₄^[55] 和石墨烯/PbI₂^[56] 分别形成 $\Phi_n = 0.17, 0.22, 0.35, 0.68$ 和 0.89 eV 的 n 型肖特基接触. 这表明 T-A1 异质结对于设计高性能 FETs 更有利.

3.3 异质结电接触性质的物理调控效应

首先研究 T-A1 和 H-A1 电接触性质的外部电场效应, 定义电场的正方向为从 NbS₂ 层指向 GeS₂ 层的方向, 反之为电场的负方向. 图 5(a), (b) 呈现了 NbS₂/GeS₂ 异质结的 SBH 随外电场变化关系, 其中酒红色线对 n 型肖特基势垒高度 Φ_n , 橄榄绿色线对应 p 型肖特基势垒高度 Φ_p , 显然, 外电场对 NbS₂/GeS₂ 异质结电接触性质有明显地调制效应. 对于 H-A1, 如图 5(a) 所示, 当对异质结施加正外电场时, 随着电场强度的增大, Φ_n 持续增大, 而 Φ_p 持续减小, 虽然异质结保持 p 型肖特基接触不变, 但当电场强度为 $1 \text{ V}/\text{\AA}$ 时, Φ_p 减为 0.02 eV ,

即 GeS₂ 的 VBM 非常接近费米能级. 进一步增大电场强度到 1.1 V/Å 时, Φ_p 减小为 0 eV, 即此时在外电场的作用下, 异质结从 p 型肖特基接触转变为 p 型欧姆接触. 而对于负外电场, 当电场强度为 -0.05 V/Å, 出现了 $\Phi_n = \Phi_p$ 的情况. 进一步反向增大电场强度, 出现 $\Phi_n < \Phi_p$, 即异质结的接触方式从原来的 p 型肖特基接触转变为 n 型肖特基接

触. 此后, 随着电场强度继续反向增大, Φ_n 持续减小, 而 Φ_p 持续增大, 当电场强度增大到 -1 V/Å 时, Φ_n 减为 0 eV, 即此时异质结从 n 型肖特基接触转变为 n 型欧姆接触. 另外, 注意到在电场强度增大到 -0.9 V/Å 后, Φ_n 随电场强度的增大而骤然减小, 对应于 GeS₂ 带隙随场强反向增大而减小 (图 5(c)), 这与 GeS₂ 在高负电场作用下诱导的静电极化及

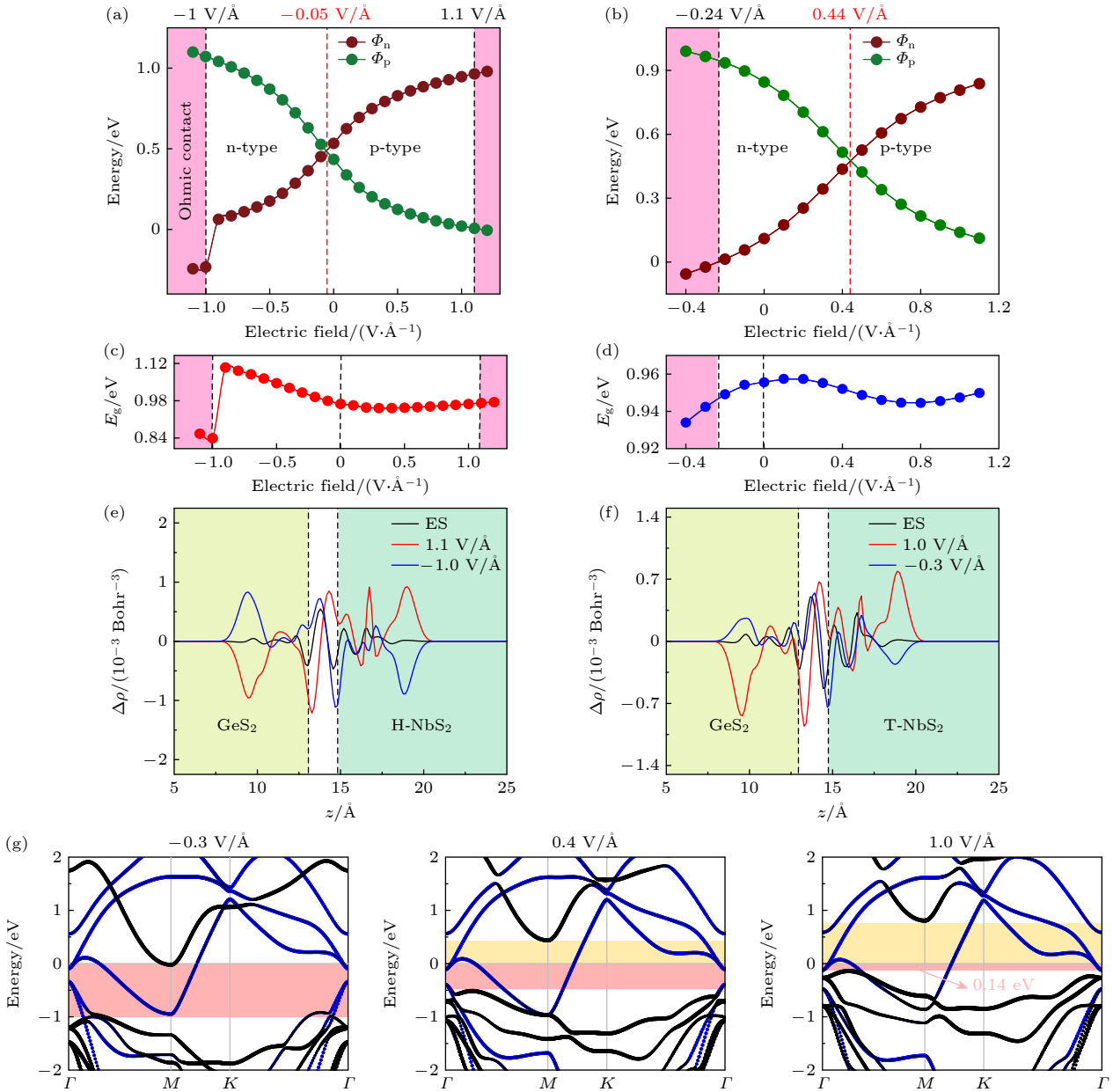


图 5 外电场调制效应, 肖特基势垒高度与电场的关系 (a) H-A1; (b) T-A1. 异质结中 GeS₂ 单层的带隙与电场的关系 (c) H-A1; (d) T-A1. 不同电场下异质结沿 z 轴方向的电荷密度差 (e) H-A1; (f) T-A1. (g) T-A1 的投影能带结构随外电场变化情况, 其中蓝色表示 T-NbS₂ 层的贡献, 黑色表示 GeS₂ 层的贡献, 上下两个方框分别表示 Φ_n 和 Φ_p .

Fig. 5. External electric field modulation effect, Schottky barrier height versus electric field: (a) H-A1; (b) T-A1. Band gap of GeS₂ monolayer in heterojunction versus electric field: (c) H-A1; (d) T-A1. Difference in charge density of heterojunction along z-axis with different electric fields: (e) H-A1; (f) T-A1. (g) Variation of the projected energy-band structure with the external electric field for T-A1, where the blue denotes the contribution of T-NbS₂ layer, and the black denotes the contribution of GeS₂ layer, and top and bottom boxes indicate Φ_n and Φ_p , respectively.

从 H-NbS₂ 层向 GeS₂ 层的高浓度 n 型掺杂进而改变了 GeS₂ 层内静电势分布与功函数有关. 而对于 T-A1, 如图 5(b) 所示, 当施加正外电场大于 0.44 V/Å 时, Φ_n 的值逐渐超过了 Φ_p 的值, 即异质结的接触方式从原来的 n 型肖特基接触转变为 p 型肖特基接触. 随着电场强度继续增大, Φ_p 持续减小, 而 Φ_n 持续增大, 虽在计算的正电场范围内, 未能实现欧姆接触, 但在正外加电场为 1 V/Å 时, 其 $\Phi_p = 0.14$ eV, 实现了准 p 型欧姆接触. 施加负外加电场时, Φ_n 持续减小, 而 Φ_p 持续增大, 当外加负电场绝对值大于 0.24 V/Å 时, Φ_n 的值从正变为负, 意味着 T-A1 肖特基结变为了 n 型欧姆接触. 图 5(d) 为 T-A1 的带隙随外电场的变化, 可以看出, 带隙变化范围是非常小的. 总之, 没有外部电场时, H-A1 是 p 型肖特基接触, 而 T-A1 是准 n 型欧姆接触, 但施加较高的外电场后, 两种异质结都出现了欧姆接触.

图 5(e), (f) 给出了在平衡状态 (ES, 也即本征情况) 和实现欧姆接触的特定电场作用下两个异质结沿 z 轴方向的电荷密度差. 可以看出, 处于 ES 时, 在 H-A1 中, GeS₂ 层为电子耗尽, H-NbS₂ 层为电子积累, 而在 T-A1 中, T-NbS₂ 层为电子耗尽, GeS₂ 层为电子积累, 但是由于层间转移电子较少, 所以两单层中电子的得失并不明显, 使得内建电场也很弱. 外电场的施加, 明显地改变了这种状况, 即电荷密度差曲线出现更大的波动和不对称性, 尤其是在电场强度较高的情况下. 施加正 (负) 电场时, GeS₂ 层总是明显地失去 (得到) 电子, 而 NbS₂ 层总是明显地得到 (失去) 电子. 这是因为电子总是逆着电场方向飘移所致. 值得指出的是由于外电场比内建电场强很多, 所以两单层之间的合场强主要由外电场决定.

为了更详细地呈现外电场效应, 以 T-A1 为例, 计算了 3 个典型外电场对应的投影能带结构, 如图 5(g) 所示, 同时为了体现 Φ_n 和 Φ_p 细节的变化, 用不同颜色进行填充, 其中浅黄 (浅红) 色表示 Φ_n (Φ_p). 从图中可以看出, 当外加电场从 $E = -0.3$ V/Å 到 0.4 V/Å 再到 1 V/Å 改变时, GeS₂ 层能带相对 T-NbS₂ 层能带发生明显移动, 即 GeS₂ 层能带明显向上移动, 其 CBM (VBM) 不断远离 (靠近) 异质结费米能级, 随着电场的作用, 逐渐实现了从 n 型欧姆接触到肖特基接触再到准 p 型欧姆接触连续过渡. 如何解释这一现象呢? 这与外电场在

两个单层上产生的附加静电势能有关. 当施加从 T-NbS₂ 层指向 GeS₂ 层的正外加电场时, 导致 T-NbS₂ (GeS₂) 层静电势能上降低 (升高). 例如, 正外加电场从 $E = 0.4$ V/Å 增大到 $E = 1$ V/Å 时, T-NbS₂ 层的能带结构向下移动, GeS₂ 层的能带结构向上移动, 并且实现准 p 型欧姆接触. 而施加负外加电场时, 情况正好相反, T-NbS₂ 层上的静电势能较高, 而 GeS₂ 层上的静电势能较低, 使得 T-NbS₂ 层能带结构整体上移, 而 GeS₂ 层能带结构整体下移, 故在此过程中, 出现了 n 型肖特基接触向 n 型欧姆接触的转变.

除了外电场, 平面双轴应变通常也对 SBH 和电接触性有着重要的影响. 平面双轴应变同时施加在异质结晶格的两个轴向上, 使得异质结的晶格在平面内受到拉应力或压应力作用. 双轴应变的应变系数 $\varepsilon = (a - a_0) / a_0$, 其中 a_0 和 a 分别代表异质结在平衡状态和应变下的晶格常数, 两个轴向取相同的应变. 如果应变系数 $\varepsilon < 0$, 代表压缩应变; 反之, 如果应变系数 $\varepsilon > 0$, 则代表拉伸应变. 如图 6(a), (b) 所示, H-A1 和 T-A1 的 SBH 由双轴应变灵活调控. H-A1 在正双轴应变下, 随着应变强度的增大, 其 Φ_n (Φ_p) 值连续减小 (增大); 在负双轴应变下, Φ_n 值先增大, 在达到 -8% 应变强度后减小, 而 Φ_p 值连续减小. T-A1 在正双轴应变下, Φ_n 值随着应变强度的增大而略微减小, Φ_p 值连续减小; 在负双轴应变下, Φ_n 值随着应变强度的增大而增大, Φ_p 值连续减小. 对于 H-A1, 肖特基接触类型的转变发生在拉伸状态, 而对于 T-A1, 肖特基接触类型的转变发生在压缩状态. 值得注意的是, H-A1 在压缩应变 $\varepsilon = -11.51\%$ 时表现为 p 型欧姆接触; T-A1 虽在应变范围内始终保持肖特基接触不变, 但在拉伸应变 $\varepsilon = 8\%$ 时其 Φ_n 仅为 0.09 eV, 实现了准 n 型欧姆接触. 此外, 带隙受双轴应变调节的具体情况是: H-A1 随着压缩程度的增加, 其带隙连续减小, 随着拉伸增大其带隙几乎不变 (图 6(c)); T-A1 随着压缩 (拉伸) 程度的增加, 带隙连续减小 (图 6(d)). 图 6(e), (f) 为本征和双轴应变时异质结电荷密度相对孤立单层情况的密度差, 可以看出, 在欧姆接触 (H-A1 在 $\varepsilon = -11.51\%$) 和低势垒肖特基接触 (T-A1 在 $\varepsilon = 8\%$) 时, 异质结界面处存在明显的电荷转移, 电荷密度差曲线波动最大, 说明在这种情况下产生了较强的界面电极化和较高的层间静电势差, 为欧姆接触的形成提供了可能.

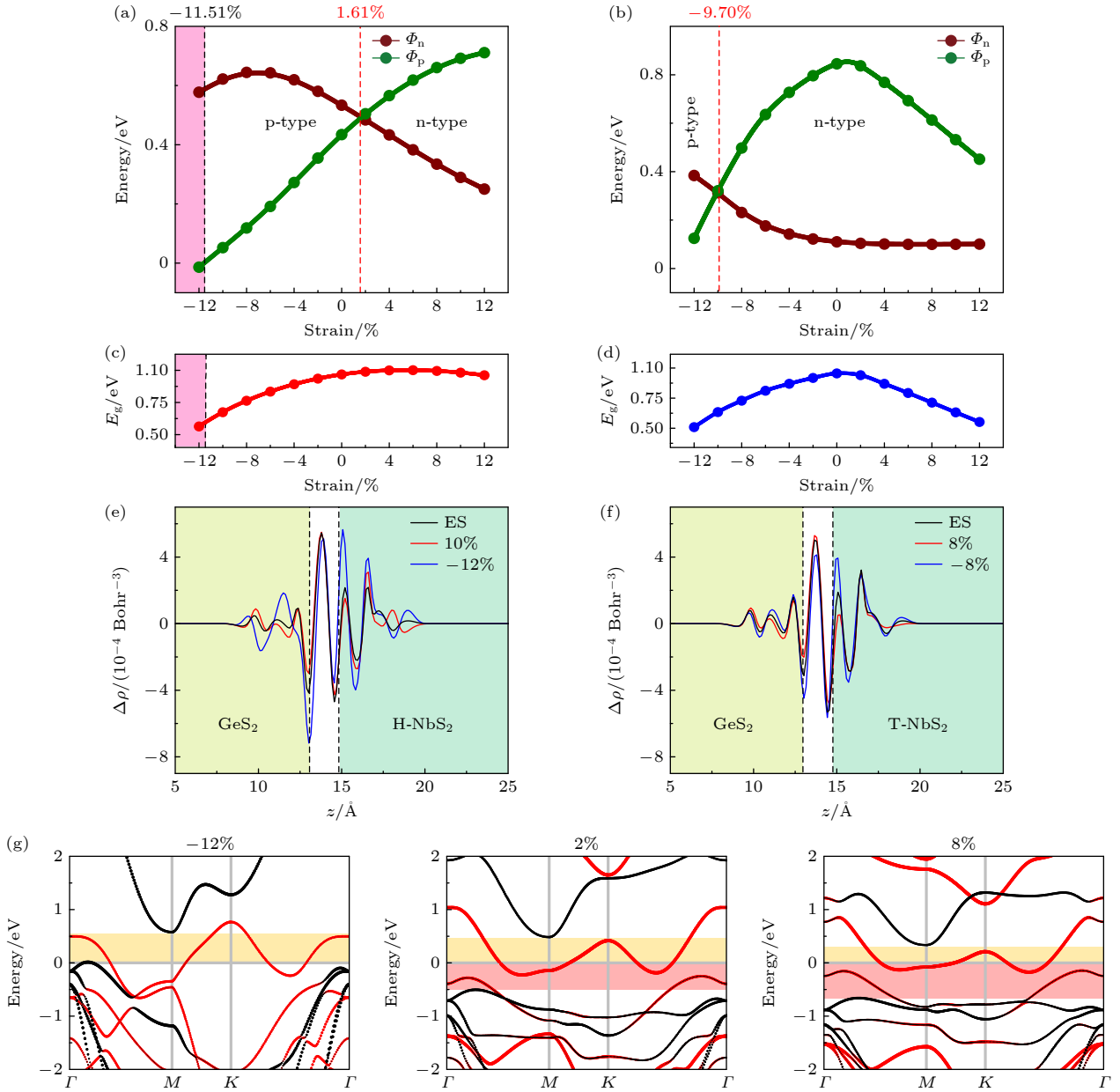


图6 双轴应变调控效应,肖特基势垒高度与双轴应变的关系 (a) H-A1; (b) T-A1. 异质结中GeS₂单层的带隙与双轴应变的关系 (c) H-A1; (d) T-A1. 不同双轴应变下异质结沿z轴方向的电荷密度差 (e) H-A1; (f) T-A1. (g) H-A1在不同双轴应变下的投影能带结构,其中红色表示H-NbS₂层的贡献,黑色表示GeS₂层的贡献,上下两个方框分别表示 Φ_n 和 Φ_p

Fig. 6. Biaxial strain modulation effect, Schottky barrier height versus biaxial strain: (a) H-A1; (b) T-A1. Band gap of GeS₂ mono-layer in heterojunction versus biaxial strain: (c) H-A1; (d) T-A1. Difference in charge density of heterojunction along z-axis for different biaxial strains: (e) H-A1; (f) T-A1. (g) Projected band structures of H-A1 under different biaxial strains, where the red denotes the contribution of the H-NbS₂ layer, and the black denotes the contribution of the GeS₂ layer, and the upper and lower boxes denote Φ_n and Φ_p , respectively.

图6(g)给出了在不同双轴应变下H-A1的投影能带结构,并用不同颜色的方框表示 Φ_n 和 Φ_p ,其中浅黄(浅红)色表示 Φ_n (Φ_p).可以看出,当双轴应变变化时(从拉伸8%到拉伸2%再压缩-12%),GeS₂层能带相对H-NbS₂层能带发生明显移动,即GeS₂层能带明显向上移动,其CBM(VBM)不断远离(靠近)异质结费米能级,随着双轴应变的

作用,逐渐实现了从n型肖特基接触到p型肖特基接触再到p型欧姆接触连续过渡.如何理解这一现象呢?这是因为压缩应变会减小相邻原子间的距离,增大电子斥力,从而增大电子克服原子核吸引力逃逸的可能性,导致GeS₂层的金属性增加,带隙变窄,进而减小SBH,有利地改变电接触特征.然而,对于T-A1,双轴拉伸却导致带隙减小.

事实上, 双轴应变对材料电子结构的影响是非常复杂的, 应变会改变键长、键角及化学键构型, 从而改变价电子轨道的重叠行为及晶格势. 而异质结的电子结构由单层中重叠的电子轨道及晶格势决定, 所以双轴应变能导致导带底和价带顶价电子态发生改变, 从而改变带隙.

4 结 论

利用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 研究了不同相金属-半导体 vdW 异质结 H(T)-NbS₂/GeS₂ 的结构稳定性、电子特性以及电接触特性, 重点探索 MSJ 电接触性质对不同相金属的依赖关系. 计算的结合能、声子谱、AIMD 模拟以及力学性质研究表明这类异质结具有足够的能量、动力学、热力学和机械稳定性, 所以它们极有可能在实验中制备成功. 计算的杨氏弹性模量以及平面外形变评算表明它们具有高的抵抗几何变形的能力, 非常适合作为电极和沟道材料. 本征态 H-NbS₂/GeS₂ 和 T-NbS₂/GeS₂ 异质结分别形成 p 型肖特基接触和准 n 型欧姆接触, 并且外加电场和双轴应变均能有效地调节其 SBH 和电接触类型. 例如, 对于 H-NbS₂/GeS₂ 异质结, 无论施加正或负电场, 均能实现欧姆接触, 而对于 T-NbS₂/GeS₂ 异质结, 当负外电场 (绝对值) 大于 0.24 V/Å 时, 异质结转化为 n 型欧姆接触. 当双轴应变为 -11.51% 时, H-NbS₂/GeS₂ 转化为 p 型欧姆接触, 而双轴拉伸能使 H-NbS₂/GeS₂ 实现准欧姆接触. 也就是说, 当以半导体 GeS₂ 单层为场效应晶体管沟道材料, 与不同相的金属 NbS₂ 接触形成 MSJ 时, 其界面肖特基势垒有明显区别, 且在不同情形 (本征或物理调控) 中, 各有优势. 所以, 本研究对于理解 MSJ 电接触的物理机制具有重要意义, 特别为设计高性能电子器件提供了理论参考, 也期望本工作能得到实验工作者的关注, 为实验研究提供模型及数据参考.

参考文献

[1] Novoselov K S, Mishchenko A, Carvalho A, Castro Neto A 2016 *Science* **353** aac9439
 [2] Han J N, Cao S G, Li Z H, Zhang Z H 2022 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56** 045002
 [3] Xu Y H, Han J N, Li Z H, Zhang Z H 2023 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56** 365504
 [4] Pierucci D, Henck H, Avila J, Balan A, Naylor C H, Patriarche G, Dappe Y J, Silly M G, Sirotti F, Johnson A C

2016 *Nano Lett.* **16** 4054
 [5] Chen J Z, Ma G B, Gong B X, Deng C Y, Zhang M, Guo K X, Cui R R, Wu Y K, Lü M L, Wang X 2023 *Nanomaterials* **13** 429
 [6] Wang J G, Ma F C, Sun M T 2017 *RSC Adv.* **7** 16801
 [7] Cai Y Q, Zhang G, Zhang Y W 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 13929
 [8] Yu L L, Lee Y H, Ling X., Santos E J, Shin Y C, Lin Y X, Dubey M, Kaxiras E, Kong J, Wang H, Palacios T 2014 *Nano Lett.* **14** 3055
 [9] Sinha S, Zhu T S, France-Lanord A, Sheng Y W, Grossman J C, Porfyraakis K, Warner J H 2020 *Nat. Commun.* **11** 823
 [10] Mohanta M K, Rawat A, Jena N, Dimple, Ahammed R, Sarkar A D 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces.* **12** 3114
 [11] Ahammed R, Rawat A, Jena N, Dimple, Mohanta M K, Sarkar A D 2020 *Appl. Surf. Sci.* **499** 143894
 [12] Hong X P, Kim J, Shi S F, Zhang Y, Jin C H, Sun Y H, Tongay S, Wu J Q, Zhang Y F, Wang F 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 682
 [13] Rivera P, Seyler K L, Yu H Y, Schaibley J R, Yan J Q, Mandrus D G, Yao W, Xu D 2016 *Science* **351** 688
 [14] Paul Inbaraj C R, Mathew R J, Ulaganathan R K, Sankar R, Kataria M, Lin H Y, Cheng H Y, Lin K H, Lin H L, Liao Y M, Chou F C, Chen Y T, Lee C H, Chen Y F 2020 *ACS Appl. Mater.* **12** 26213
 [15] Kataria M, Yadav K, Cai S Y, Liao Y M, Lin H I, Shen T L, Chen Y H, Chen Y T, Wang W H, Chen Y F 2018 *ACS Nano* **12** 9596
 [16] Liu Y, Guo J, Zhu E B, Liao L, Lee S J, Ding M N, Shakir I, Gambin V, Huang Y, Duan X F 2018 *Nature* **557** 696
 [17] Kim C, Moon I, Lee D, Choi M S, Ahmed F, Nam S, Cho Y, Shin H J, Park S, Yoo W 2017 *ACS Nano* **11** 1588
 [18] Chen X, Wang D K, Wang T, Yang Z Y, Zou X M, Wang P, Luo W J, Li Q, Liao L, Hu W D 2019 *ACS Appl. Mater.* **11** 33188
 [19] Zheng S, Lu H C, Liu H, Liu D M, Robertson J 2019 *Nanoscale* **11** 4811
 [20] Allain A, Kang J, Banerjee K, Kis A 2015 *Nat. Mater.* **14** 1195
 [21] Zhang W X, Yin Y, He C 2020 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22** 26231
 [22] Wang X L, Feng W, Shen C, Sun Z H, Qi H B, Yang M, Liu Y H, Wu Y C, Wu X Q 2021 *Front. Mater.* **8** 709757
 [23] Nandi P, Rawat A, Ahammed R, Jena N, De Sarkar A 2021 *Nanoscale* **13** 5460
 [24] Chen H, Keiser C, Du S X, Gao H J, Sutter P, Sutter E 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 32473
 [25] Gao R L, Yong Y L, Yuan X B, Hu S, Hou Q H, Kuang Y M 2022 *ACS Omega* **7** 46440
 [26] Ruan X Y, Xiong R, Cui Z, Wen C L, Ma J J, Wang B T, Sa B S 2022 *Materials* **15** 4016
 [27] Mao Y L, Zhang G H 2020 *Physica B Condens. Matter* **581** 411673
 [28] Zhang Z P, Yang P F, Hong M, Jiang S L, Zhao G C, Shi J P, Xie Q, Zhang Y F 2019 *Nanotechnology* **30** 182002
 [29] Shin H G, Yoon H S, Kim J S, Kim M, Lim J Y, Yu S, Park J H, Yi Y, Kim T, Jun S C, Im S 2018 *Nano Lett.* **18** 1937
 [30] Kim Y, Kwon K C, Kang S, Kim C, Kim T H, Hong S P, Park S Y, Suh J M, Choi M J, Han S 2019 *ACS Sens.* **4** 2395
 [31] Zhou J H, Shen Y H, Lü F, Zhang W Y, Lin F X, Zhang W S, Wang K, Luo H, Wang Q, Yang H 2022 *Adv. Funct. Mater.* **32** 2204495
 [32] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K

- 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [33] Li Z H, Han J N, Cao S G, Zhang Z H, Deng X Q 2023 *Phys. Rev. B* **108** 184413
- [34] He X, Li X Y, Li J H, Zhang Z H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 218503 (in Chinese) [何鑫, 李鑫焱, 李景辉, 张振华 2022 物理学报 **71** 218503]
- [35] Li X Y, Li Z H, Han J N, Cao S G, Zhang Z H 2024 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** 4218
- [36] Yi Y, Han J N, Li Z H, Cao S G, Zhang Z H 2024 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** 5045
- [37] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [38] Troullier N, Martins J L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1993
- [39] Soler J M, Artacho E, Gale J D, García A, Junquera J, Ordejón P, Sánchez-Portal D 2002 *J. Phys. Condens Matter* **14** 2745
- [40] Grimme S 2006 *J. Comput. Chem.* **27** 1787
- [41] Ding X, Zhang S, Zhao M, Xiang Y, Zhang K H, Zu X, Li S, Qiao L 2019 *Phys. Rev. Appl.* **12** 064061
- [42] Jelver L, Larsen P M, Stradi D, Stokbro K, Jacobsen K W 2017 *Phys. Rev. B* **96** 085306
- [43] Xia J L, Gu Y X, Mai J, Hu T Y, Wang Q K, Xie C, Wu Y K, Wang X 2023 *Heliyon* **9** e20619
- [44] Vu T V, Hieu N V, Phuc H V, Hieu N N, Bui H D, Idrees M, Amin B, Nguyen C V 2020 *Appl. Surf. Sci.* **507** 145036
- [45] Nguyen S T, Huong T T T, Ca N X, Nguyen C Q 2024 *Nanoscale Adv.* **6** 1565
- [46] Wang Q H, Li H, Si L N, Dou Z L, Yan H J, Yang Y, Liu F B 2023 *Mater. Today Commun.* **35** 10572
- [47] Wang F F, Yuan J, Zhang Z F, Ding X L, Gu C J, Yan S B, Sun J H, Jiang T, Wu Y F, Zhou J 2023 *Phys. Rev. B* **108** 075416
- [48] Mohanta M K, Kishore A, Sarkar A D 2020 *Nanotechnology* **31** 495208
- [49] Cadelano E, Palla P L, Giordano S, Colombo L 2010 *Phys. Rev. B* **82** 235414
- [50] Li Y Q, Wang X Y, Zhu S Y, Tang D S, He Q W, Wang X C 2022 *J. Mater. Chem. C* **10** 12132
- [51] Gupta A, Sakthivel T, Seal S 2015 *Prog. Mater. Sci.* **73** 44
- [52] Booth T J, Blake P, Nair R R, Jiang D, Hill E W, Bangert U, Bleloch A, Gass M, Novoselov K S, Katsnelson M I 2008 *Nano Lett.* **8** 2442
- [53] Zhang W X, Shi C H, He C, Bai M 2020 *J. Solid State Chem.* **289** 121511
- [54] Zheng J S, Li E L, Ma D M, Cui Z, Peng T, Wang X L 2019 *Phys. Status Solidi B* **256** 1900161
- [55] Li Z H, Han J N, Cao S G, Zhang Z H 2023 *Appl. Surf. Sci.* **614** 156095
- [56] Nguyen C V, Idrees M, Phuc H V, Hieu N N, Binh N T, Amin B, Vu T V 2020 *Phys. Rev. B* **101** 235419

Electrical contact properties of 2D metal-semiconductor heterojunctions composed of different phases of NbS₂ and GeS₂^{*}

Li Jing-Hui Cao Sheng-Guo[†] Han Jia-Ning

Li Zhan-Hai Zhang Zhen-Hua[‡]

(Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering,
Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 16 April 2024; revised manuscript received 23 May 2024)

Abstract

Metal-semiconductor heterojunction (MSJ) is the basis for developing novel devices. Here, we consider different two-dimensional van der Waals MSJs consisting of different-phase metals H- and T-NbS₂ and semiconductor GeS₂, and conduct an in-depth study of their structural stabilities, electronic and electrical contact properties, with an emphasis on exploring the dependence of the electrical contact properties of the MSJs on the different phases of metals. Calculation results of their binding energy, phonon spectra, AIMD simulations, and mechanical properties show that both heterojunctions are highly stable, which implies that it is possible to prepare them experimentally and feasible to use them for designing electronic devices. The intrinsic H-NbS₂/GeS₂ and T-NbS₂/GeS₂ heterojunctions form p-type Schottky contacts and quasi-n-type Ohmic contacts, respectively. It is also found that their Schottky barrier heights (SBHs) and electrical contact types can be effectively modulated by an applied electric field and biaxial strain. For example, for the H-NbS₂/GeS₂ heterojunction, Ohmic contact can be achieved regardless of applying a positive/negative electric field or planar biaxial compression, while for the T-NbS₂/GeS₂ heterojunction, Ohmic contact can be achieved only at a very low negative electric field. The planar biaxial stretching can achieve quasi-Ohmic contact. In other words, when the semiconductor GeS₂ monolayer is used as the channel material of the field effect transistor and contacts different metal NbS₂ monolayers to form the MSJ, the interfacial Schottky barriers are distinctly different, and each of them has its own advantages in different situations (intrinsic or physically regulated). Therefore, this study is of great significance for understanding the physical mechanism of the electrical contact behaviors for H(T)-NbS₂/GeS₂ heterojunction, especially for providing the theoretical reference for selecting suitable metal electrodes for the development of high-performance electronic devices.

Keywords: metal-semiconductor heterojunction, Schottky barrier, Schottky contact, Ohmic contact, physical field modulation

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv, 73.30.+y

DOI: [10.7498/aps.73.20240530](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240530)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61771076).

† Corresponding author. E-mail: caoshengguo@stu.csust.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn

不同相NbS₂与GeS₂构成的二维金属-半导体异质结的电接触性质

李景辉 曹胜果 韩佳凝 李占海 张振华

Electrical contact properties of 2D metal–semiconductor heterojunctions composed of different phases of NbS₂ and GeS₂

Li Jing-Hui Cao Sheng-Guo Han Jia-Ning Li Zhan-Hai Zhang Zhen-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 137102 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240530

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240530>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

GaN/VSe₂范德瓦耳斯异质结电接触特性及调控效应

Electrical contact characteristics and regulatory effects of GaN/VSe₂ van der Waals heterojunction

物理学报. 2023, 72(16): 167101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230191>

外电场和双轴应变对MoSH/WSi₂N₄肖特基结势垒的调控

Modulation of MoSH/WSi₂N₄ Schottky–junction barrier by external electric field and biaxial strain

物理学报. 2022, 71(21): 217301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220882>

电场对graphene/InSe范德瓦耳斯异质结肖特基势垒的调控

Tuning Schottky barrier in graphene/InSe van der Waals heterostructures by electric field

物理学报. 2020, 69(15): 157302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191987>

石墨烯过渡层对金属/SiC接触肖特基势垒调控的第一性原理研究

First principle study on modulating of Schottky barrier at metal/4H–SiC interface by graphene intercalation

物理学报. 2022, 71(5): 058102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211796>

边修饰GeS₂纳米带的电子特性及调控效应

Electronic properties and modulation effects on edge–modified GeS₂ nanoribbons

物理学报. 2024, 73(5): 056102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231670>

非对称氧掺杂对石墨烯/二硒化钼异质结肖特基势垒的调控

Regulation and control of Schottky barrier in graphene/MoSe₂ heterojunction by asymmetric oxygen doping

物理学报. 2022, 71(1): 017104 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210238>