

# MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的层间电导特性\*

吴奖承 殷玉婷 方贺男†

(南京邮电大学, 电子与光学工程学院、柔性电子(未来技术)学院, 南京 210023)

(2025年4月3日收到; 2025年6月8日收到修改稿)

作为二维半导体过渡金属硫族化物中的典型代表性材料, MoS<sub>2</sub> 具有带隙可调谐特性等优异物理特性. 因此, MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格是研究凝聚态电子输运问题和设计光电器件的理想体系. 另一方面, 层间电导的测量是研究莫尔超晶格层间耦合作用的重要手段. 为了阐明带隙可调谐等特性对莫尔超晶格层间电导的影响, 有必要对 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的层间电导特性加以研究. 本文利用衍射物理中的光学方法, 构建了 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格体系的隧穿理论. 在该理论中, 将 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格中电子的隧穿视作电子波为周期性光栅所散射. 利用该理论研究了 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的层间电导特性. 研究表明: 由于衍射效应, 界面处隧穿电子波存在两个分波均与界面势产生共振, 所以层间电导随扭转角的变化呈现双峰结构. 进一步还研究了隧穿层和金属电极对层间电导的影响: 上层和下层 MoS<sub>2</sub> 晶格厚度分别影响层间电导的峰和背景; 界面势强度的增大可以增强隧穿电子的相干性; 金属电极化学势主要影响 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间电导峰的特性, 且相比于石墨莫尔超晶格, 影响更为显著.

**关键词:** MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格, 隧穿电导, 衍射物理, 扭旋电子学**PACS:** 73.43.Jn, 78.67.Pt, 71.20.Nr, 72.10.-d**DOI:** 10.7498/aps.74.20250434**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250434

## 1 引言

对于两层二维材料形成的堆叠结构, 如果两层二维材料之间存在扭转角, 将会打破二维材料原有的晶格对称性, 形成具有莫尔周期性的超晶格结构. 上述具有莫尔周期性的超晶格结构通常被称为“莫尔超晶格”, 这种结构能够实现对二维材料体系能带结构的有效调控. 特别地, 2018年曹源等<sup>[1]</sup>在实验上发现, 扭曲双层石墨烯(TBG)的电子能带结构在“魔角”附近( $1.1^\circ \pm 0.1^\circ$ )会产生“平带”特性, 进而会导致莫特绝缘以及非常规超导等新奇物理现象. 此后, 莫尔超晶格特别是TBG, 在理论和实验上均成为凝聚态物理方向的研究热点.

与TBG相比, 二维半导体过渡金属硫族化物

(TMDs)莫尔超晶格中出现平带的角度范围扩大了接近一个量级, 这使得无需依赖特定“魔角”来实现“平带”结构<sup>[2,3]</sup>. 此外, TMDs具有优异的光学性质, 因此在光电器件领域存在应用潜力<sup>[4-6]</sup>. 在TMDs这一类材料中, MoS<sub>2</sub>是一种典型的代表性材料并得到了广泛的研究. 研究发现, MoS<sub>2</sub>具有如下优异的物理特性: 1) 带隙可随厚度调谐, 单层 MoS<sub>2</sub> 的带隙约为 1.8 eV, 体结构则约为 1.29 eV<sup>[7]</sup>; 2) 具有高载流子迁移率, 有助于制造高性能晶体管<sup>[8]</sup>; 3) 单层 MoS<sub>2</sub> 具有强烈的光致发光特性, 可以被用来制造高灵敏度的光电探测器<sup>[9]</sup>. 因此, MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格是研究凝聚态电子输运问题和设计光电器件的理想体系. 实验上, 2014年Liu等<sup>[10]</sup>利用化学气相沉积(CVD)制备了不同堆积方式的 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格, 并研究了堆积方式对该系统层间耦合

\* 国家自然科学基金(批准号: 11704197)和南京邮电大学校级自然科学基金(批准号: NY223074)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fanghn@njupt.edu.cn

的影响. 2020年, Liao等<sup>[11]</sup>实现了对大尺寸 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间扭转角的精确控制, 为 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的实际应用提供了坚实基础. 2024年, Xu等<sup>[12]</sup>以及 Zhou等<sup>[13]</sup>利用 CVD 生长方法, 均实现了在较宽扭转角范围内 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的制备. 2024年, Garcia-Ruiz 和 Liu<sup>[14]</sup>研究了在强电场下 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的电子性质, 发现其能带结构会重构, 且能带结构的对称性依赖于外加电场的方向; 同年, Yang等<sup>[15]</sup>研究了低温下 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格中激子的光学行为, 发现其与扭转角的变化密切相关.

另一方面, 莫尔超晶格的新奇物理现象来源于层间耦合作用, 而层间电导的测量是研究这种层间耦合作用的重要实验方法. 特别地, 科研人员<sup>[16-22]</sup>研究了石墨莫尔超晶格的层间电导随扭转角的变化曲线. 研究表明, 层间电导曲线呈单调减小的背景与电导峰的叠加结构. 该实验结果发现后并未在理论上由统一的物理机制加以解释. 直至2021年, 本课题组<sup>[23,24]</sup>基于光学衍射方法构建的莫尔超晶格理论较好地解释上述实验结果. 如前所述, MoS<sub>2</sub> 具有与石墨不同的物理特性, 其带隙可随厚度调谐. 因此, 有必要对 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间电导的特性加以研究. 2018年, Liao等<sup>[25]</sup>利用外延生长技术成功制备了 MoS<sub>2</sub>/石墨烯异质结, 并且在实验和理论上均研究了其层间电导随扭转角的依赖关系. 然而, 同质 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的层间电导特性, 特别是 MoS<sub>2</sub> 带隙可调谐特性对层间电导特性的影响, 却鲜有研究. 因此, 本文将之前构建的莫尔超晶格理论进行了拓展, 并计入了 MoS<sub>2</sub> 带隙可调谐特性的影响. 利用该拓展模型, 本文研究了同质 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间电导特性以及 MoS<sub>2</sub> 带隙可调谐特性对层间电导的影响.

## 2 计算方法

MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间电导测量体系如图1所示. 其中, 上下电极均为简单金属,  $d_1$  和  $d_2$  分别为莫尔超晶格上层和下层的厚度,  $\alpha$  为扭转角. 根据图中偏压极性可知, 电子的隧穿方向由上指向下, 即电子首先隧穿通过上层 MoS<sub>2</sub> 晶格, 再隧穿通过下层 MoS<sub>2</sub> 晶格. 由于 MoS<sub>2</sub> 作为隧穿层沿着层间方向是几乎绝缘的, 所以在我们的理论框架内, 可以将 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格视为隧穿层, 则该体系可视

作隧道结结构. 那么, MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的层间电导就是该隧道结结构的隧穿电导. 通常, 隧道电导的计算需要利用 Landauer-Büttiker 公式, 而在该公式中如何得到透射系数是核心问题. 本文理论工作的特色即将电子的隧穿视作入射电子被 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格所散射, 进而利用光学衍射方法来求得透射系数.

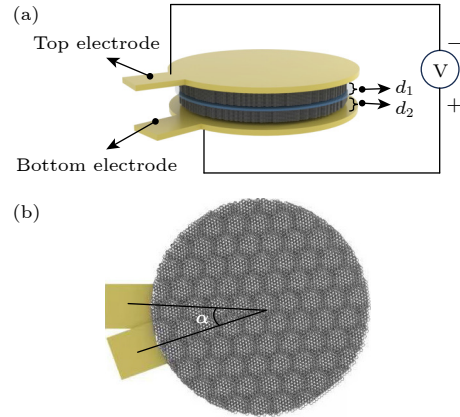


图1 (a) MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格体系示意图; (b) MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的俯视图

Fig. 1. (a) Schematic illustration of MoS<sub>2</sub> moiré superlattices; (b) top view of MoS<sub>2</sub> moiré superlattices.

透射系数的计算方法如下: MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的势函数由三部分组成, 即上层 MoS<sub>2</sub> 晶格的周期势、下层 MoS<sub>2</sub> 晶格的周期势以及层间界面势, 分别为

$$U_1 = \sum_{l_3=0}^{m-1} \sum_{\mathbf{R}_h} v_1(\mathbf{r} - \mathbf{R}_h - l_3 \mathbf{a}_3), \quad (1)$$

$$U_2 = \sum_{l'_3=0}^{n-1} \sum_{\mathbf{R}_g} v_2(\mathbf{r} - d_1 \mathbf{e}_z - \mathbf{R}_g - l'_3 \mathbf{a}'_3), \quad (2)$$

$$V(z) = \gamma(\alpha) \delta(z - d_1)(1 - i\varepsilon), \quad (3)$$

其中  $v_1(\mathbf{r})$  和  $v_2(\mathbf{r})$  分别为上层 MoS<sub>2</sub> 晶格和下层 MoS<sub>2</sub> 晶格的格点势;  $m$  和  $n$  分别表示上、下层 MoS<sub>2</sub> 的原子层数;  $\mathbf{R}_h$  和  $\mathbf{R}_g$  分别为相应的面内晶格矢量;  $\mathbf{a}_3$  和  $\mathbf{a}'_3$  分别为上层晶格和下层晶格的层间初基平移矢量,  $l_3$  和  $l'_3$  分别为相应的整数.  $\gamma(\alpha)$  为界面势强度:  $\gamma(\alpha) = \gamma_0[\cos(6\alpha) - 1]$ , 其中  $\gamma_0$  为界面势强度的参数. 本文引入  $\varepsilon = 10^{-8}$  来保证隧穿电导计算结果的收敛<sup>[26,27]</sup>. 由于电极为简单金属, 传导电子与晶格之间的相互作用较弱, 所以其费米面相比于自由电子球形费米面的变形较小<sup>[28]</sup>. 因此, 本文利用自由电子近似方法来描写入射电子, 即入

射电子波函数可以表示为

$$\Psi_{\text{in}} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (4)$$

其中,  $\mathbf{k}$  为入射隧穿电子波的波矢,  $\mathbf{r}$  为三维空间坐标矢量.

利用 Bethe 理论和双束近似方法 [23,24], 可以得到透射电子波函数  $\Psi(\mathbf{r})$  为

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} A_j \exp[i\mathbf{k}_j \cdot (\mathbf{r} - d_1 \mathbf{e}_z)], \quad (5)$$

式中,  $A_j$  是透射电子分波的振幅;  $\mathbf{k}_j$  是透射电子分波的波矢;  $\mathbf{e}_z$  是单位矢量, 方向与隧穿电流方向相反. 透射电子波函数的分波可以分为 4 类, 分别与界面处波函数的 4 个分波相对应 [23,24]. 因此, 透射电子波函数分波的振幅只有如下 4 个取值:

$$B_1 = \frac{1}{2} \frac{\exp(ik_{0z}^+ \cdot d_1)}{1 + \frac{im\gamma(\alpha)}{\hbar^2 k_{0z}^+}}, \quad B_2 = \frac{1}{2} \frac{\exp(ik_{hz}^+ \cdot d_1)}{1 + \frac{im\gamma(\alpha)}{\hbar^2 k_{hz}^+}}, \quad (6)$$

$$B_3 = \frac{1}{2} \frac{\exp(ik_{0z}^- \cdot d_1)}{1 + \frac{im\gamma(\alpha)}{\hbar^2 k_{0z}^-}}, \quad B_4 = \frac{1}{2} \frac{\exp(ik_{hz}^- \cdot d_1)}{1 + \frac{im\gamma(\alpha)}{\hbar^2 k_{hz}^-}}. \quad (7)$$

式中,  $m$  是电子质量;  $k_{0z}^\pm$ ,  $k_{hz}^\pm$  是 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格中两层 MoS<sub>2</sub> 界面处波矢  $z$  方向的分量, 分别为

$$k_{0z}^\pm = \sqrt{\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_{//}^2 - 2m\hbar^2 v(0) \pm 2m\hbar^2 v_1(\mathbf{K}_h)}, \quad (8)$$

$$k_{hz}^\pm = \sqrt{\mathbf{k}^2 - (\mathbf{k}_{//} + \mathbf{K}_h)^2 - 2m\hbar^2 v(0) \pm 2m\hbar^2 v_1(\mathbf{K}_h)}, \quad (9)$$

式中,  $\mathbf{k}_{//}$  是入射波矢  $\mathbf{k}$  在面内的投影;  $v(0)$  是 MoS<sub>2</sub> 晶格的平均势;  $\mathbf{K}_h$  是与  $\mathbf{R}_h$  相应的倒格矢,  $v_1(\mathbf{K}_h)$  是  $v_1(\mathbf{r})$  的傅里叶变换分量. 根据 Cowley [29] 和 Fang 等 [30] 的研究结果,  $v_i(\mathbf{K}_h)$  ( $i = 1, 2$ ) 的取值与 MoS<sub>2</sub> 的带隙成正比. 又根据 Mark 等 [7], Ataca 和 Ciraci [31], Zhang 等 [32] 的报道,  $v_i(\mathbf{K}_h)$  随厚度的依赖关系可写作:

$$v_i(\mathbf{K}_h) = 2 \left[ 1.88 - 0.59 \cos \left( \frac{\pi}{d_i/d_{\text{single}} + 1} \right) \right], \quad (10)$$

式中,  $d_{\text{single}}$  为单层 MoS<sub>2</sub> 薄膜的厚度. 物理上, MoS<sub>2</sub> 的带隙随层数变化呈现离散变化特性. 这里, 我们将离散的 MoS<sub>2</sub> 厚度延拓为了连续变化的厚度.

利用透射电子波函数可以求得透射系数  $T(\mathbf{k})$ :

$$T(\mathbf{k}) = \frac{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|}{2ik_z S_h} \iint dx_1 dx_2 \left( \Psi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial z} \Psi(\mathbf{r}) - \text{c.c.} \right), \quad (11)$$

其中,  $k_z = \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_z$ ,  $S_h$  是 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的横截面面积;  $\mathbf{a}_1$  和  $\mathbf{a}_2$  是 MoS<sub>2</sub> 上层晶格的面内初基平移矢量. 进一步利用 Landauer-Büttiker 公式, 可以计算得到 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的层间电导在零温、零偏压极限下的表达式:

$$G = \frac{e^2}{16\pi^3 \hbar} \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi k_F^2 \sin(2\theta) T(k_F, \theta, \varphi), \quad (12)$$

式中,  $e$  代表单位电子电荷;  $\theta$  和  $\varphi$  分别表示入射电子波矢在球坐标系中所对应的极角和方位角;  $k_F$  是金属电极费米波矢的大小. 其表达式为

$$k_F = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \mu}, \quad (13)$$

式中,  $\mu$  是金属电极的化学势. 在后文的理论计算中, 根据 Ataca 和 Ciraci [31] 的研究结果, 参数选取如下:  $\mathbf{K}_h = 2.29 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$ ; 根据本课题组之前的工作 [23,24],  $v(0) = 2.3 \text{ eV}$ .

### 3 讨论部分

与石墨莫尔超晶格不同的是, MoS<sub>2</sub> 的带隙可随厚度调谐. 因此, 由 (8) 式—(10) 式可知, MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的厚度不仅通过振幅中的相位因子影响层间电导, 还通过对界面处波矢产生修正来影响层间电导. 本文首先研究了上层厚度  $d_1$  对层间电导的影响. 图 2 是  $d_1$  分别为 1.95 nm (三层 MoS<sub>2</sub> 的厚度), 2.60 nm (四层 MoS<sub>2</sub> 的厚度), 3.25 nm (五层 MoS<sub>2</sub> 的厚度) 时层间电导随扭转角的变化曲线. 其中, 根据之前的工作 [23,24], 界面势强度参数  $\gamma_0 = 4 \times 10^{-29} \text{ J}\cdot\text{m}$ ; 化学势  $\mu = 4.5 \text{ eV}$ ; 下层厚度  $d_2 = 3.9 \text{ nm}$  (六层 MoS<sub>2</sub> 的厚度). 如图 2 所示, 当  $d_1$  为 1.95 和 2.60 nm 时, 层间电导呈现出双峰结构, 且峰位角较小的峰强远大于峰位角较大的峰. 物理上, 层间电导峰来源于隧穿电子和界面势的共振. 通过数值分析可知, 峰强较大的峰来源于振幅  $B_2$  的发散, 而峰强较小的峰来源于振幅  $B_3$  的发散. 当共振发生时, 振幅  $B_2$  发散所对应的界面处波矢  $k_{hz}^+$  的模小于振幅  $B_3$  发散所对应的界面处波矢  $k_{0z}^-$ . 由 (6) 式与 (7) 式可知, 振幅  $B_2$  的发散所对应的共振角较小, 且由于衰减因子较小导致峰强较强. 当  $d_1 = 3.25 \text{ nm}$  时, 层间电导曲线不存在电导峰. 由 (6) 式与 (7) 式可知,  $d_1$  越大, 振幅衰减得越弱, 则峰强越小. 因此, 当  $d_1$  增大为

3.25 nm 时, 电导峰的强度弱于背景电导, 从而导致电导峰无法被观察到. 此外, 通过数值分析可知, 两个峰的峰位均会随着上层厚度  $d_1$  略微改变. 其中, 随着上层厚度  $d_1$  的增大,  $B_2$  峰向右偏移,  $B_3$  峰向左偏移. 峰位的变化来源于 MoS<sub>2</sub> 的带隙随厚度可调谐特性, 即上层厚度通过势函数的修正对界面处波矢产生影响, 进而改变了峰位角的大小. 随着 MoS<sub>2</sub> 厚度的增加, 带隙减小,  $B_2$  峰对应的波矢从晶格获取的能量变少, 导致共振发生在更大角度; 同理,  $B_3$  峰对应的波矢从晶格失去的能量变少, 导致共振发生在更小角度.

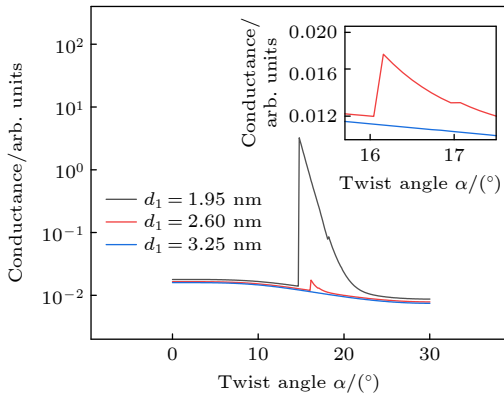


图 2 不同上层厚度下关于扭转角的层间电导曲线, 内插图为  $d_1 = 2.60$  nm 时电导峰的放大图  
Fig. 2. Interlayer conductance curves versus twist angle under different  $d_1$ , and the inset is the enlarged figure of the peak of  $d_1 = 2.60$  nm.

其次, 本文研究了下层厚度  $d_2$  对层间电导的影响, 计算结果如图 3(a) 所示. 其中, 界面势强度参数  $\gamma_0 = 4 \times 10^{-29}$  J·m; 化学势  $\mu = 4.5$  eV; 上层厚度  $d_1 = 2.6$  nm. 此时, 与图 2 不同的是, 两个峰的峰位和峰强均不随下层厚度  $d_2$  变化. 这是因为, 由 (6) 式与 (7) 式可知, 透射波振幅与  $d_2$  无关. 此外, 从图 3(a) 中还可以看出, 背景显著依赖于下层厚度  $d_2$  且随  $d_2$  呈非单调变化特性. 为了进一步研究该非单调变化特性, 本文计算了背景电导在扭转角分别为  $0^\circ$  和  $10^\circ$  时随下层厚度  $d_2$  的变化曲线, 如图 3(b) 所示. 这里, 如 (10) 式的说明所述, 将离散的下层厚度  $d_2$  延拓为了连续变化的厚度. 由图 3(b) 可知, 当扭转角分别为  $0^\circ$  和  $10^\circ$  时, 背景电导均随下层厚度的增加而振荡. 在本文的理论中, 该振荡特性可能来源于透射系数中相位因子随  $d_2$  的振荡, 也可能来源于  $d_2$  通过下层 MoS<sub>2</sub> 晶格势参数对透射电子波矢产生的影响. 根据 (10)

式, 当  $d_2 > 6$  nm 时, 势参数基本不随  $d_2$  变化, 而由图 3(b) 可知, 当  $d_2 > 6$  nm 时该振荡特性依然显著, 说明该振荡特性主要来源于透射系数中相位因子随  $d_2$  的振荡. 物理上, 透射系数中相位因子来自不同透射分波间的相互干涉, 即该振荡特性来源于电子隧穿过程中的干涉效应.

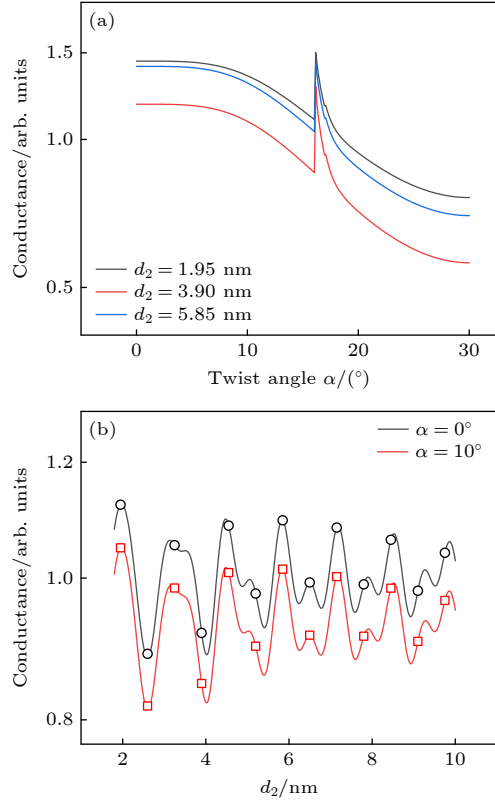


图 3 (a) 不同下层厚度下关于扭转角的层间电导曲线; (b) 当扭转角  $\alpha$  分别为  $0^\circ$  和  $10^\circ$  时层间电导背景随下层厚度的变化曲线, 其中对应于整数层厚度的数据点为空心符号所标注  
Fig. 3. (a) Interlayer conductance curves versus twist angle under different  $d_2$ ; (b) the background as a function of  $d_2$  under different twist angles, and the data corresponding to the discrete layers are marked with open symbols.

物理上, 界面势强度描写的是 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格中两层 MoS<sub>2</sub> 的界面效应. 严格地说, 该界面效应与 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的上层厚度、下层厚度、材料生长质量等物理因素有关. 为了探究界面势强度对层间电导的影响, 本文计算了层间电导在不同界面势强度参数下随扭转角的变化曲线, 结果如图 4 所示. 其中, 化学势  $\mu = 4.5$  eV;  $d_1$  和  $d_2$  分别取 2.6 nm 和 3.9 nm. 由图 4 可知, 界面势强度参数  $\gamma_0$  越大, 则背景电导随扭转角下降得越快. 这是因为, 界面势强度越强, 电子隧穿通过界面势的几

率越小, 则层间电导越小. 又由  $\gamma(\alpha)$  的表达式可知,  $\gamma_0$  越大, 界面势强度随扭转角  $\alpha$  变化得越快. 因此,  $\gamma_0$  越大, 层间电导随扭转角下降越显著. 此外, 两个峰的峰位均会随着界面势强度参数  $\gamma_0$  的增大向左偏移. 这是因为, 由 (6) 式、(7) 式及界面势强度的表达式易知, 界面势强度参数  $\gamma_0$  越大, 产生共振时所对应的扭转角  $\alpha$  越小. 从图 4 中还可以看出,  $B_2$  峰的半高宽随界面势强度参数增大显著减小. 这是因为, 根据界面势强度的表达式可知, 界面势强度参数  $\gamma_0$  越大, 界面势强度  $\gamma(\alpha)$  随扭转角变化越快. 另一方面, 通常情况下, 半高宽越小, 相干性越强. 因此, 图 4 表明界面势强度参数  $\gamma_0$  的增大可以加强隧穿电子的相干性.

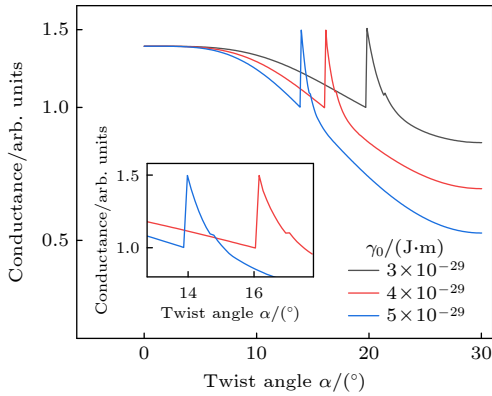


图 4 不同界面势强度参数下关于扭转角的层间电导曲线, 内插图为  $\gamma_0 = 4 \times 10^{-29}$  J·m 和  $\gamma_0 = 5 \times 10^{-29}$  J·m 时电导峰的放大图

Fig. 4. Interlayer conductance curves versus twist angle under different  $\gamma_0$ , and the inset is the enlarged figure of the peaks of  $\gamma_0 = 4 \times 10^{-29}$  J·m and  $\gamma_0 = 5 \times 10^{-29}$  J·m.

最后, 研究了金属电极对 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间电导的影响, 计算结果如图 5 所示. 参数选取如下:  $d_1$  和  $d_2$  分别取 2.6 nm 和 3.9 nm; 界面势强度参数  $\gamma_0 = 4 \times 10^{-29}$  J·m. 由图 5 可知,  $B_2$  峰的峰强随着化学势的增大而显著增强. 这是因为, 根据 (13) 式可知, 费米波矢随化学势增大而增大. 根据 (8) 式与 (9) 式可知, 界面处共振波矢的模随费米波矢的增大而减小, 进而使得振幅中的衰减因子变弱. 值得注意的是, MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格的  $B_2$  峰的峰强比石墨莫尔超晶格的  $B_3$  峰随化学势变化更显著. 这表明, 金属电极对 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间电导峰的影响更为显著. 此外, 两个峰的峰位均随化学势增加而向左移动. 物理上, 该共振角的变化也来源于界面处共振波矢的改变.

值得指出的是, 本文的理论模型具备一定的通用性, 即可以扩展至其他 TMD 材料, 如 WS<sub>2</sub> 和 MoSe<sub>2</sub> 等.

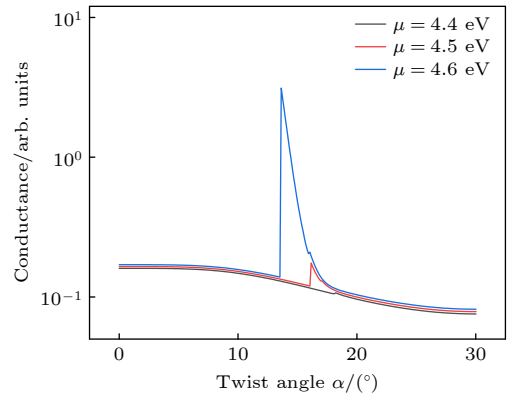


图 5 不同化学势  $\mu$  下关于扭转角的层间电导曲线  
Fig. 5. Interlayer conductance curves versus twist angle under different  $\mu$ .

## 4 结 论

本文利用衍射物理中的光学方法, 构建了 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格体系的隧穿理论. 该理论将电子隧穿视作被具有莫尔周期性的超晶格隧穿层所散射, 因此可以充分计入 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格中莫尔周期性及其所带来的相干性的影响. 此外, 该理论模型还计入了 MoS<sub>2</sub> 带隙的可调谐特性对层间电导的影响. 研究发现, MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格层间电导随扭转角的变化具有双峰结构. 该双峰结构来源于衍射效应, 即隧穿电子被上层 MoS<sub>2</sub> 晶格散射后界面处两束不同的隧穿电子分波 ( $B_2$  分波与  $B_3$  分波) 与界面势产生共振. 进一步地, 本文还研究了 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格上层和下层晶格厚度、界面势强度参数及金属电极化学势等对层间电导的影响. 理论结果表明: 上层 MoS<sub>2</sub> 晶格厚度的改变主要影响峰位和峰强, 即随着上层厚度的增加, 峰强显著减小,  $B_2$  峰向右移动,  $B_3$  峰向左移动; 下层 MoS<sub>2</sub> 晶格厚度的改变主要影响层间电导背景, 即背景随着下层厚度  $d_2$  的增加呈现振荡特性; 随着界面势强度参数的增加, 两个峰的共振角均变小, 且峰的半高宽变小, 表明隧穿电子具有更强的相干性; 电极的化学势对于层间电导的峰强和峰位均具有明显的调制作用, 即峰强随电极化学势的增大而显著增强, 峰位随着电极化学势的增大向左移动. 本文的研究结果揭示了莫尔超晶格材料的带隙可调谐特性对层

间电导的影响, 为 MoS<sub>2</sub> 莫尔超晶格及其他带隙可调谐莫尔超晶格的应用奠定了坚实的理论基础。

## 参考文献

- [1] Cao Y, Fatemi V, Fang S, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43
- [2] Naik M H, Jain M 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 266401
- [3] Li T X 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 127309 (in Chinese) [李昕昕 2022 物理学报 **71** 127309]
- [4] Seyler K L, Rivera P, Yu H, Wilson N P, Ray E L, Mandrus D G, Yan J, Yao W, Xu X 2019 *Nature* **567** 66
- [5] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [6] Tran K, Moody G, Wu F, Lu X, Choi J, Kim K, Rai A, Sanchez D A, Quan J, Singh A, Embley J, Zepeda A, Campbell M, Autry T, Taniguchi T, Watanabe K, Lu N, Banerjee S K, Silverman K L, Kim S, Tutuc E, Yang L, MacDonald A H, Li X 2019 *Nature* **567** 71
- [7] Mak K F, Lee C, Hone J, Shan J, Heinz T F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [8] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 147
- [9] Splendiani A, Sun L, Zhang Y, Li T, Kim J, Chim C Y, Galli G, Wang F 2010 *Nano Lett.* **10** 1271
- [10] Liu K, Zhang L, Cao T, Jin C, Qiu D, Zhou Q, Zettl A, Yang P, Louie S G, Wang F 2014 *Nat. Commun.* **5** 4966
- [11] Liao M, Wei Z, Du L, Wang Q, Tang J, Yu H, Wu F, Zhao J, Xu X, Han B, Liu K, Gao P, Polcar T, Sun Z, Shi D, Yang R, Zhang G 2020 *Nat. Commun.* **11** 2153
- [12] Xu M, Ji H, Zheng L, Li W, Wang J, Wang H, Luo L, Lu Q, Gan X, Liu Z, Wang X, Huang W 2024 *Nat. Commun.* **15** 562
- [13] Zhou J, Huang H, Zhao Z, Dou Z, Zhou L, Zhang T, Huang Z, Feng Y, Shi D, Liu N, Yang J, Nie J C, Wang Q, Dong J, Liu Y, Dou R, Xue Q 2024 *Adv. Mater.* **36** 2408227
- [14] Garcia-Ruiz A, Liu M H 2024 *Nano Lett.* **24** 16317
- [15] Yang M M, Cong R D, Wu C L, Zhang Y, Gao Q, Hu X W, Zhang Y F, Tan L, Liang B L, Zhao X H, Li X L 2024 *Surf. Interfaces* **52** 104790
- [16] Li H, Wei X, Wu G, Gao S, Chen Q, Peng L M 2018 *Ultramicroscopy* **193** 90
- [17] Koren E, Leven I, Lörtscher E, Knoll A, Hod O, Duerig U 2016 *Nat. Nanotechnol.* **11** 752
- [18] Chari T, Ribeiro-Palau R, Dean C R, Shepard K 2016 *Nano Lett.* **16** 4477
- [19] Yu Z, Song A, Sun L, Li Y, Gao L, Peng H, Ma T, Liu Z, Luo J 2020 *Small* **16** 1902844
- [20] Zhang S, Song A, Chen L, Jiang C, Chen C, Gao L, Hou Y, Liu L, Ma T, Wang H, Feng X Q, Li Q 2020 *Sci. Adv.* **6** eabc5555
- [21] Inbar A, Birkbeck J, Xiao J, Taniguchi T, Watanabe K, Yan B, Oreg Y, Stern A, Berg E, Ilani S 2023 *Nature* **614** 682
- [22] Birkbeck J, Xiao J, Inbar A, Taniguchi T, Watanabe K, Berg E, Glazman L, Guinea F, Von Oppen F, Ilani S 2025 *Nature* **641** 345
- [23] Fang H, Xiao M 2021 *ACS Appl. Electron. Mater.* **3** 2543
- [24] Tao Y Z, Liu C, Xiao M W, Fang H N 2024 *Chin. Phys. B* **33** 107301
- [25] Liao M, Wu Z W, Du L, Zhang T, Wei Z, Zhu J, Yu H, Tang J, Gu L, Xing Y 2018 *Nat. Commun.* **9** 4068
- [26] Molinàs-Mata P 1996 *Phys. Rev. A* **54** 2060
- [27] Kočinac S L S, Milanović V 2008 *Phys. Lett. A* **372** 191
- [28] Kittel C 2005 *Introduction of Solid State Physics* (New York: John Wiley & Sons, Inc) p229
- [29] Cowley J M 1995 *Diffraction Physics* (Amsterdam: Elsevier) p177
- [30] Fang H, Xiao M, Rui W, Du J, Tao Z 2016 *Sci. Rep.* **6** 24300
- [31] Ataca C, Ciraci S 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 13303
- [32] Zhang G, Huang S, Chaves A, Song C, Özçelik V O, Low T, Yan H 2017 *Nat. Commun.* **8** 14071

# Interlayer conductance of MoS<sub>2</sub> moiré superlattices\*

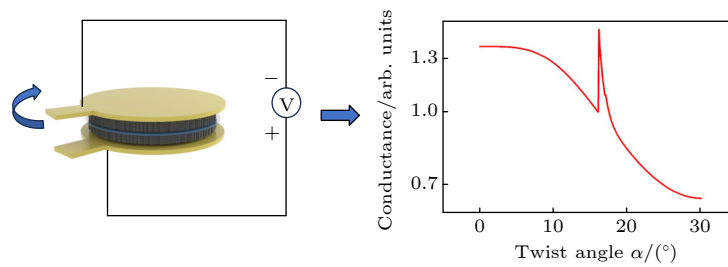
WU Jiangcheng YIN Yuting FANG Henan<sup>†</sup>

(College of Electronic and Optical Engineering & College of Flexible Electronics (Future Technology),  
Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, China)

( Received 3 April 2025; revised manuscript received 8 June 2025 )

## Abstract

MoS<sub>2</sub>, as a typical material of two-dimensional semiconductor transition metal chalcogenides, has excellent physical properties such as tunable band gap. Therefore, MoS<sub>2</sub> moiré superlattice is an ideal system for investigating the electron transport in condensed matter and the design of optoelectronic devices. On the other hand, interlayer conductance serves as a significant indicator for analyzing coupling effects in moiré superlattice. Here, in order to clarify the influence of tunable band gap on the interlayer conductance, we develop a tunneling theory for calculating the interlayer conductance of MoS<sub>2</sub> moiré superlattices by using optical methods in diffraction physics. In this theory, the electron tunneling can be considered as the diffraction of electron waves by the periodic gratings. Accordingly, the influences of the periodicity of MoS<sub>2</sub> moiré superlattices and the coherence of the tunneling electrons can be well included in the theory. In addition, the effect of the tunable band gap of MoS<sub>2</sub> is taken into account. According to the theory, we investigate the properties of the interlayer conductance of MoS<sub>2</sub> moiré superlattice. The theoretical results show that due to the diffraction effect, there exist two partial waves of the tunneling electron at the interface, which can resonate with the interface potential. Accordingly, the interlayer conductance curves exhibit a double-peak structure. Furthermore, we analyze the influences of the tunneling layer and the metal electrodes on the interlayer conductance: the thickness of the upper MoS<sub>2</sub> lattice affects the peak and the lower one primarily influences the background. The coherence of tunneling electrons will be enhanced when the parameter of interface potential strength increases. The chemical potential of the metal electrode mainly affects the properties of the peak, and the influence is more significant than that in graphite moiré superlattice.



**Keywords:** MoS<sub>2</sub> moiré superlattice, tunneling conductance, diffraction physics, twistrionics

**PACS:** 73.43.Jn, 78.67.Pt, 71.20.Nr, 72.10.-d

**DOI:** [10.7498/aps.74.20250434](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250434)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250434](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250434)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11704197) and the National Science Foundation of Nanjing University of Posts and Telecommunications, China (Grant No. NY223074).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [fanghn@njupt.edu.cn](mailto:fanghn@njupt.edu.cn)

## MoS<sub>2</sub>莫尔超晶格的层间电导特性

吴奖承 殷玉婷 方贺男

### Interlayer conductance of MoS<sub>2</sub> moiré superlattices

WU Jiangcheng YIN Yuting FANG Henan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 167302 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250434

CSTR: 32037.14.aps.74.20250434

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250434>

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

#### Cu/MgO/MoS<sub>2</sub>/Cu结构的电阻开关特性

Resistive switching characteristics of Cu/MgO/MoS<sub>2</sub>/Cu structure

物理学报. 2025, 74(2): 028501 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241298>

#### CuPc/MoS<sub>2</sub>范德瓦耳斯异质结荧光特性

Photoluminescence properties of CuPc/MoS<sub>2</sub> van der Waals heterostructure

物理学报. 2022, 71(12): 128103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220132>

#### 原子错位堆栈增强双层MoS<sub>2</sub>高次谐波产率

Enhancing high harmonic generation in bilayer MoS<sub>2</sub> by interlayer atomic dislocation

物理学报. 2021, 70(13): 134207 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210731>

#### 二维半导体莫尔超晶格中随位置与动量变化的层间耦合

Position- and momentum-dependent interlayer couplings in two-dimensional semiconductor moiré superlattices

物理学报. 2023, 72(2): 027302 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222046>

#### PAN/MoS<sub>2</sub>柔性复合纳米纤维膜的压电传感特性

Piezoelectric sensing properties of PAN/MoS<sub>2</sub> flexible composite nanofiber film

物理学报. 2025, 74(7): 076801 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241676>

#### MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>界面黏附性能的尺寸和温度效应

Adhesion properties of MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> interface: Size and temperature effects

物理学报. 2024, 73(5): 056801 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231648>