

WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结界面势垒及其电荷隧穿概率的厚度效应*

谭鑫 陈永杰 李景 董健生[†] 谭家宁[‡]

(吉首大学物理系, 吉首 416000)

(2025 年 10 月 17 日收到; 2025 年 11 月 23 日收到修改稿)

二维层状材料异质结界面电荷转移是影响其器件性能的重要因素. 通过在异质结界面引入绝缘层是调控电荷转移的有效方法, 但关于绝缘层对电荷转移影响的研究仍缺乏理解. 本文基于原子键弛豫理论和量子隧穿模型, 系统研究了 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结中间 h-BN 层厚对体系界面势垒高度和电荷隧穿概率的影响. 结果表明, 受表面效应引起的晶格周期性势场变化, WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结界面势垒高度可以通过改变 WS₂, h-BN 和 MoS₂ 层数调控. 此外, 研究发现随着 h-BN 层数的增大 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结势垒高度和宽度分别减小和增大, 二者竞争使得电荷隧穿概率随之减小. 这些结果为设计高性能基于二维隧穿异质结光电器件的研究提供了物理基础.

关键词: WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结, 能级排列, 电荷隧穿概率**DOI:** 10.7498/aps.75.20251417**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251417

1 引言

石墨烯的成功剥离开启了原子层薄二维层状材料的研究热潮. 其中, 过渡金属硫族化合物 (TMDs) 由于具有可见光范围的带隙、强的光与物质相互作用为其在纳米电子和光电器件领域的应用提供了基础^[1-3]. 单层 MoS₂ 是光学带隙为 1.87 eV 的直接带隙半导体材料, 且带隙大小可以通过层数和应变等方式调控^[4,5]. 单层 TMDs 的光吸收可达 5%—10%, 比相同厚度 GaAs 和 Si 的光吸收高一个数量级^[6]. 将不同的二维层状材料通过堆积木方式组装成异质结时不受晶格失配的影响, 且在界面能够诱导许多新物性^[7,8]. 堆积不同的 TMDs 形成异质结往往在界面可以形成 II 型能级

排列, 实现超快的载流子分离^[9-15]. 垂直堆垛的 MoS₂/WSe₂ 异质结层间电荷转移时间为 470 fs^[9], MoS₂/WS₂ 异质结中空穴从 MoS₂ 转移到 WS₂ 的时间为 50 fs^[10], 系统超快电子转移可以大大降低载流子复合.

最近, 理论和实验证实在 TMDs 异质结界面处引入绝缘层 h-BN 可以进一步调控异质结界面处的电荷转移, 为提升光电器件性能提供了重要方法^[16-21]. 理论结果表明在 TMDs 异质结中插入少层 h-BN 可以明显减小载流子复合, 但界面电荷转移速率会随着 h-BN 厚度的增大明显减小. 例如, Zhou 等^[20] 通过第一性原理计算发现在 WSe₂/WS₂ 异质结中插入单层 h-BN 其寿命提升了 3 倍. 此外, 实验发现在 TMDs 异质结插入少层 h-BN 的三层异质结具有更高的光灵敏度、低层间复合率

* 国家自然科学基金 (批准号: 12364007)、湖南省自然科学基金青年学生基础研究项目 (批准号: 2025JJ60929)、湖南省教育厅重点项目 (批准号: 24A0366) 和国家级大学生创新创业训练项目 (批准号: S202410531045) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: jsdong@jsu.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: jianing_tan@163.com

和高电流等优点^[21-27],使其在高性能光伏和光电探测器方面展现巨大的应用潜力.Kim等^[24]根据光致发光谱测量指出插入薄层 h-BN 的 MoS₂/h-BN/WS₂ 异质结依然保持高的电荷转移效率.然而,当绝缘层 h-BN 厚度不断增大将严重阻碍载流子的分离和收集^[28-33].Zhou等^[32]通过瞬态吸收光谱测试发现层间电子和空穴转移速度随着 h-BN 厚度的增大表现出指数衰减的趋势.

虽然插层 h-BN 后的 TMDs 异质结电荷转移及其光电性质已经进行一些研究,但是所插入 h-BN 对 TMDs 异质结电荷隧穿概率调控的理论研究仍不充分.此外,关于 WS₂/h-BN/MoS₂ 各组元在不同厚度条件下引起的势垒高度和宽度变化对电荷转移影响的物理机制有待进一步阐明.因此,本文基于原子键弛豫理论^[34-36]和量子隧穿模型,研究了 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结界面势垒高度随各组元厚度的变化规律,并进一步探索了不同插层厚度 h-BN 对 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结电荷隧穿概率的影响,并从量子隧穿的角度阐明了其中的物理机制.

2 理论模型

2.1 带隙漂移及异质结界面势垒调控

对于 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结,用 D_1 , D_2 和 D_3 分别表示 WS₂, h-BN 和 MoS₂ 的厚度.当材料的厚度降低到纳米尺度,表面效应将成为影响材料物理化学性质的重要因素.基于原子键弛豫理论^[34-37],表面原子配位数缺失会引起表面原子键收缩,键强变强,体系会自发弛豫到新的平衡态.考虑到表面原子和内部原子之间差异,表面原子的单键能可以表示为 $E_{\text{surf}} = c_{\text{surf}}^{-m} E_b$ ^[35,36],其中 E_b 和 m 分别为块体的单键能和键质因子, $c_{\text{surf}} = 2/\{1 + \exp[(12 - z_{\text{surf}})/8z_{\text{surf}}]\}$ 为键收缩系数, z_{surf} 是表面原子的配位数.对于固体材料,其结合能定义为 $E_{\text{coh}} = zE_b$,其中 z 为原子的配位数.考虑纳米材料的表面效应,其厚度依赖的结合能可以表示为 $E_{\text{coh}}(D) = N_{\text{surf}} z_{\text{surf}} E_{\text{surf}} + (N - N_{\text{surf}}) z_b E_b$,其中 N_{surf} 和 N 分别表示表面原子和总原子数, z_b 为块体的配位数^[35].

基于固体物理知识^[37],单电子运动的哈密顿量可以表示为 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} + V_a(r) +$

$V_c(r+a)$,其中 m_e 为电子的有效质量, $V_a(r)$ 为原子间的相互作用势, $V_c(r)$ 为晶格的周期性势场.此外,体系的带隙与晶格周期势场的第一傅里叶级数成正比^[35,36],即 $E_g = 2|V_1| = 2 \int V(N, r) e^{ikr} dr$.因此,根据文献^[34-36]结果,有带隙正比于单键能,即 $E_g \propto \langle E_0 \rangle = E_{\text{coh}}/(N \langle z \rangle)$,其中 $\langle E_0 \rangle$ 和 $\langle z \rangle = \gamma(z_{\text{surf}} - z_b) + z_b$ 分别为平均单键能和平均配位数, $\gamma = \tau c_{\text{surf}} d_0 / D$ 为体表比, D 和 d_0 分别为材料厚度和块体的键长, τ 是由材料结构决定的形状因子.对于“三明治结构”的 WS₂ 和 MoS₂ 其值取 $\tau = 2$,而单层结构的 h-BN 的 $\tau = 1$ ^[38].因此,厚度依赖的带隙可以推导为^[35]

$$E_g(D) = \frac{z_b}{\langle z \rangle} \left[\gamma \left(\frac{z_{\text{surf}}}{z_b} c_{\text{surf}}^{-m} - 1 \right) + 1 \right] E_g^b, \quad (1)$$

其中, E_g^b 为块体的带隙.随厚度变化的带隙漂移实际上是由于带边(即导带底和价带顶)的漂移所决定的,导带底和价带顶的漂移量分别为 $\Delta E_{\text{CBM}}(D) = \frac{[E_g(D) - E_g^b]}{(m_e/m_h + 1)}$ 和 $\Delta E_{\text{VBM}}(D) = \frac{[E_g(D) - E_g^b]}{(m_h/m_e + 1)}$,其中 m_h 为空穴的有效质量^[35,39].对于范德瓦耳斯异质结,两个组元之间的导带能级差和价带能级差分别可以表示为

$$\begin{cases} \Delta E_c = \chi_i - \chi_j, \\ \Delta E_v = \Delta E_g - \Delta E_c, \end{cases} \quad (2)$$

其中 χ_i 和 χ_j 为异质结中组元的电子亲和能, ΔE_g 为异质结组元之间的带隙差值.此外,不同厚度条件下的电子亲和能可以表示为 $\chi(D) = \chi_b - \Delta E_{\text{CBM}}(D)$,其中 χ_b 为块体材料的亲和能.

2.2 量子隧穿效应

对于 WS₂/MoS₂ 异质结,电子从 WS₂ 转移到 MoS₂,而空穴由 MoS₂ 转移到 WS₂.当 WS₂/MoS₂ 异质结引入绝缘层后,由于 h-BN 的导带底和价带顶分别高于和低于 WS₂ 和 MoS₂,电子和空穴的转移需要穿过势垒层,形成隧道效应(图2).以电子转移方向为 x 轴,以 WS₂ 导带底为势能零点,建立一维势垒模型计算电子(空穴)隧穿概率.定义 WS₂ 所在区域为 $x < 0$, h-BN 势垒所在区域为 $0 < x < D_2$, $D_2 < x < D_3$ 区域是 MoS₂, V_1 , V_2 和 V_3 (V'_1 , V'_2 和 V'_3) 分别是 WS₂, h-BN 和 MoS₂ 导带底(价带顶)的相对能级位置.此外, WS₂ 和 MoS₂ 厚度依赖的介电常数可以推导为 $\epsilon(D) =$

$(\epsilon_b - 1) / \sqrt{E_g(D) / E_g^b + 1}$ [40,41], 其中 ϵ_b 是块体材料的介电常数. 基于二维氢原子模型可以得到不同厚度条件下的激子结合能 $E_b(D) = 4R_y u / [m_0 \epsilon(D)^2]$, 其中 R_y 和 u 为计算所需常数, m_0 为电子的质量 [42,43]. 考虑电子和空穴在隧穿过程中需要克服激子结合能成为自由电子和空穴, 势垒高度由异质结界面能级差和激子结合能的代数和决定. 电子势函数可以表示为

$$V(x) = \begin{cases} 0 (V_1), & x < 0, \\ \chi_1 - \chi_2 + E_b^{\text{WS}_2} (V_2 + E_b), & 0 < x < D_2, \\ \chi_1 - \chi_3 (V_3), & D_2 < x < D_3, \end{cases} \quad (3)$$

空穴势函数可以表示为

$$V(x) = \begin{cases} E_g^{\text{WS}_2} (|V_1'|), & x < 0, \\ \chi_2 + E_g^{\text{h-BN}} - \chi_1 + E_b^{\text{MoS}_2} (|V_2'| + E_b), & 0 < x < D_2, \\ \chi_3 + E_g^{\text{MoS}_2} - \chi_1 (|V_3'|), & D_2 < x < D_3. \end{cases} \quad (4)$$

结合薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i(x)} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (5)$$

其中 m_1 , m_2 , m_3 分别为 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 电子和空穴的有效质量; E 是 WS_2 与 MoS_2 能级的差值. 求解后可以得到:

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}, & x < 0, \\ C_3 e^{k_2 x} + C_4 e^{-k_2 x}, & 0 < x < D_2, \\ C_5 e^{ik_3 x}, & D_2 < x < D_3, \end{cases} \quad (6)$$

其中 $k_1 = \frac{\sqrt{2m_1(E-V_1)}}{\hbar}$, $k_2 = \frac{\sqrt{2m_2(V_2+E_b-E)}}{\hbar}$, $k_3 = \frac{\sqrt{2m_3(E-V_3)}}{\hbar}$. 根据波函数的边界条件可以得到下列方程组:

$$\begin{cases} \psi(x)|_{x=0^-} = \psi(x)|_{x=0^+}, \\ \psi(x)|_{x=D^-} = \psi(x)|_{x=D^+}, \\ \frac{1}{m_1} \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=0^-} = \frac{1}{m_2} \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=0^+}, \\ \frac{1}{m_2} \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=D^-} = \frac{1}{m_3} \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=D^+}, \end{cases} \quad (7)$$

解该方程组并由隧穿概率的定义 $T = |C_5/C_1|^2$ 得

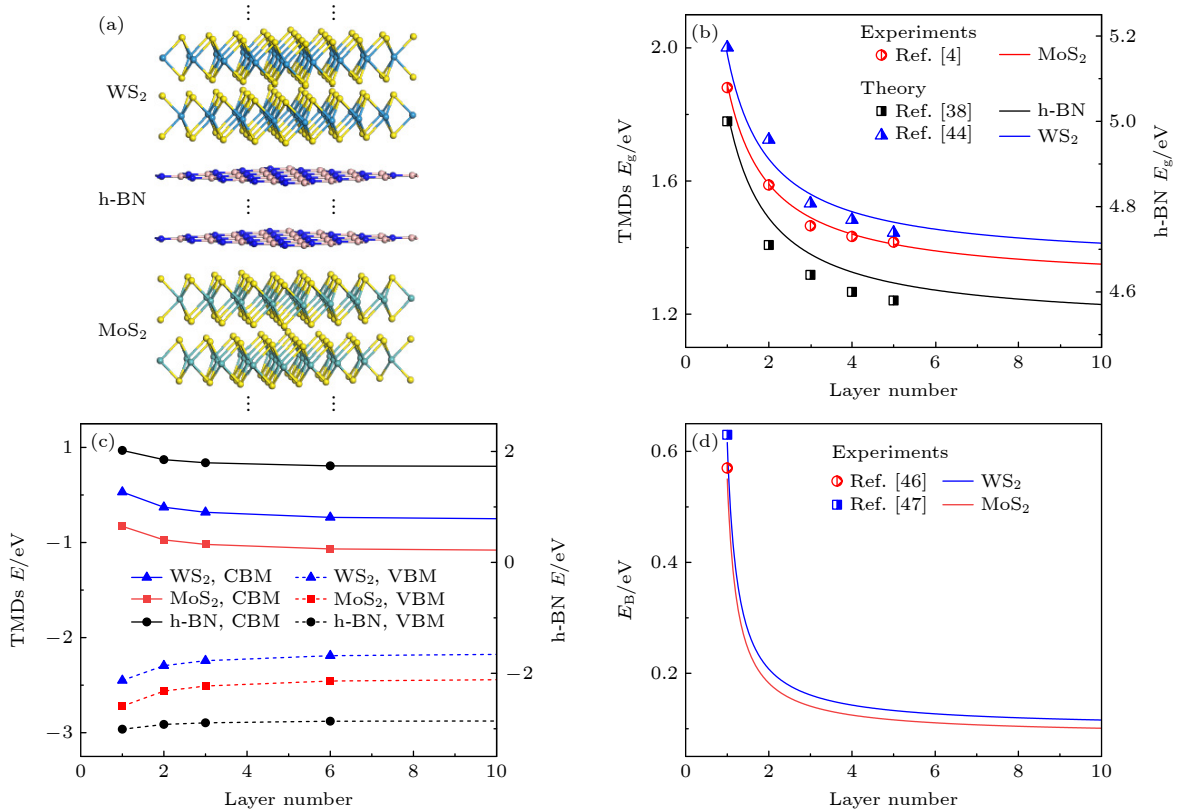


图 1 (a) $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ 异质结结构示意图; WS_2 , h-BN 和 MoS_2 层数依赖的 (b) 带隙漂移、(c) 带边漂移和 (d) 激子结合能
 Fig. 1. (a) Schematic diagram of $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ heterostructures; layer number dependent (b) bandgap, (c) band-edge offset, and (d) exciton binding energy of WS_2 , h-BN and MoS_2 .

到隧穿概率 T 与 h-BN 厚度之间的关系式 $T = T_0 e^{-2k_2 D_2}$, 其中 $T_0 = 1$. 可见隧穿概率是与 h-BN 厚度有关的单调函数. 在考虑势垒高度和宽度影响下, 厚度依赖的隧穿概率可以表示为

$$T = T_0 e^{-2 \frac{\sqrt{2m_2(V_2 + E_b - E)}}{\hbar} D_2}. \quad (8)$$

3 结果与讨论

图 1(a) 所示为 $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ 异质结的结构示意图. 由于二维层状材料之间是通过弱的范德瓦耳斯力连接, 在计算中忽略了层间相互作用, 主要考虑厚度效应对 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 带隙的影响. 本文计算中选取的单层 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 电子亲和能分别为 3.96, 2.0, 4.33 eV (第一性原理计算的数值), 单层带隙分别为 2.01, 5.0, 1.87 eV

(实验测量的数值), 电子 (空穴) 的有效质量分别为 0.44(0.45), 0.26(0.50), $0.60 m_0$ ($0.54 m_0$) (第一性原理计算的数值)^[36-38,44,45].

如图 1(b) 所示, 随着 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 厚度的减小, 其带隙逐渐增大, 且在小厚度范围内变化愈发明显. 相似地, 实验和第一性原理计算也证实了 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 的带隙随厚度的减小而增大, 与我们的研究结果一致^[4,38,44]. 为了更加深入理解带隙漂移的物理本质, 计算了厚度依赖的带边漂移, 如图 1(c) 所示. 对于 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 , 可以发现随着厚度的减小导带底和价带顶分别上移和下移. 物理上, 导带底由阳离子 d_{z^2} 轨道和阴离子 p_x 和 p_y 轨道贡献, 价带顶由阳离子 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{xy} 与阴离子 p_x 和 p_y 轨道贡献. 当层数减小时, 正离子 d 轨道和阴离子 p 轨道之间的相互排斥作用增强, 使得导带底和价带顶分别上移和下移, 且导

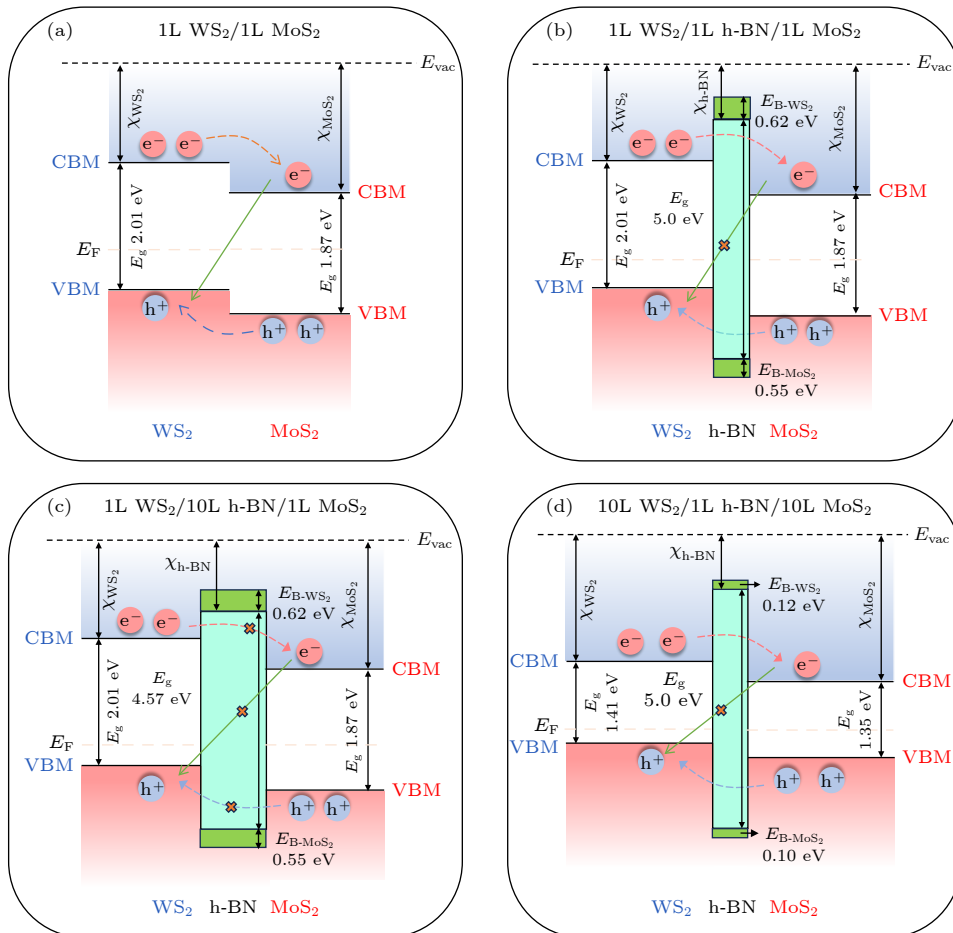


图 2 $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ 异质结的能级排列及其电荷转移示意图 (a) 无 h-BN, WS_2/MoS_2 异质结; (b) $1\text{L WS}_2/1\text{L h-BN}/1\text{L MoS}_2$ 异质结; (c) $1\text{L WS}_2/10\text{L h-BN}/1\text{L MoS}_2$ 异质结; (d) $10\text{L WS}_2/1\text{L h-BN}/10\text{L MoS}_2$ 异质结

Fig. 2. Schematic of energy band diagram and electron-hole transfer mechanisms in $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ heterostructures: (a) Without h-BN, WS_2/MoS_2 heterostructures; (b) $1\text{L WS}_2/1\text{L h-BN}/1\text{L MoS}_2$ heterostructures; (c) $1\text{L WS}_2/10\text{L h-BN}/1\text{L MoS}_2$ heterostructures; (d) $10\text{L WS}_2/1\text{L h-BN}/10\text{L MoS}_2$ heterostructures.

带底由布里渊区 K 与 Γ 之间的点过渡到 K 点^[4,44]. 图 1(d) 所示为不同厚度条件下 WS_2 和 MoS_2 的激子结合能. 结果显示 WS_2 和 MoS_2 的激子结合能随着厚度的减小而增大, 且单层比块体的大 5—6 倍. 这一结果主要源于两个原因: 1) 减小材料的厚度, 量子限域效应增强, 导致电子-空穴对的库仑吸引力增强, 使得激子结合能显著增大; 2) 能带结构和介电常数随表面效应的增强而产生明显变化. 本文结果与文献^[46,47] 结果一致.

图 2 所示为 $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ 异质结能级排列和电荷转移示意图. 对于 WS_2/MoS_2 异质结, 其形成的是 II 型能级排列, 在内建电场作用下光生电子更倾向转移至 MoS_2 层, 而空穴则易被束缚于 WS_2 层, 如图 2(a) 所示. 当插入 h-BN 后会在 WS_2/MoS_2 异质结界面形成势垒层, 势垒的高度和宽度会影响电子和空穴的转移和复合, 如图 2(b), (c) 所示. 对于电荷的转移需要隧穿势垒层, 电子才能从 WS_2 转移到 MoS_2 , 空穴从 MoS_2 转移到 WS_2 . 值得注意的是, 势垒层的高度和宽度会显著影响电荷的隧穿情况. 最近, Kim 等^[24] 利用光致发光谱测量发现在 $\text{MoS}_2/\text{h-BN}/\text{WSe}_2$ 异质结中, h-BN

抑制载流子运输的临界厚度介于 4.3—6.9 nm, 当 h-BN 厚度超过该临界值时, 体系的载流子收集能力明显下降. 此外, 在 graphene/ Al_2O_3 /Si 异质结中, Al_2O_3 的临界厚度为 3 nm, 其短路电流密度随 Al_2O_3 厚度增大呈先稳定增大后急剧下降趋势^[48,49].

为了精确描述电荷的转移情况, 研究了异质结界面势垒高度随 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 厚度的变化规律. 由于电子和空穴隧穿需要挣脱电子-空穴对的库仑相互作用, 因此本研究的势垒包含了激子结合能和 $\text{WS}_2/\text{h-BN}$ (或 $\text{h-BN}/\text{MoS}_2$) 带边的能级差. 当保持 WS_2 和 MoS_2 层数不变时, $\text{WS}_2/\text{h-BN}$ 电子隧穿势垒高度随着 h-BN 厚度的增大呈现递减趋势, 如图 3(a) 所示. 这一趋势可归因于 h-BN 厚度增大, 导带底下移, 从而缩小了 WS_2 和 h-BN 导带底之间的能量差值. 然而, 在保持 h-BN 厚度不变时, $\text{WS}_2/\text{h-BN}$ 电子隧穿势垒高度会随着 WS_2 厚度的增大先减小后增大, 如图 3(c) 所示. 对于多层 (ML) WS_2 , 厚度减小其导带底上移, 使得 $\text{WS}_2/\text{h-BN}$ 电子隧穿势垒高度随之减小. 但是, 单层 (1L) WS_2 的激子结合能明显大于 ML, 激子结合能成为影响 $\text{WS}_2/\text{h-BN}$ 电子隧穿势垒高度的主要因素,

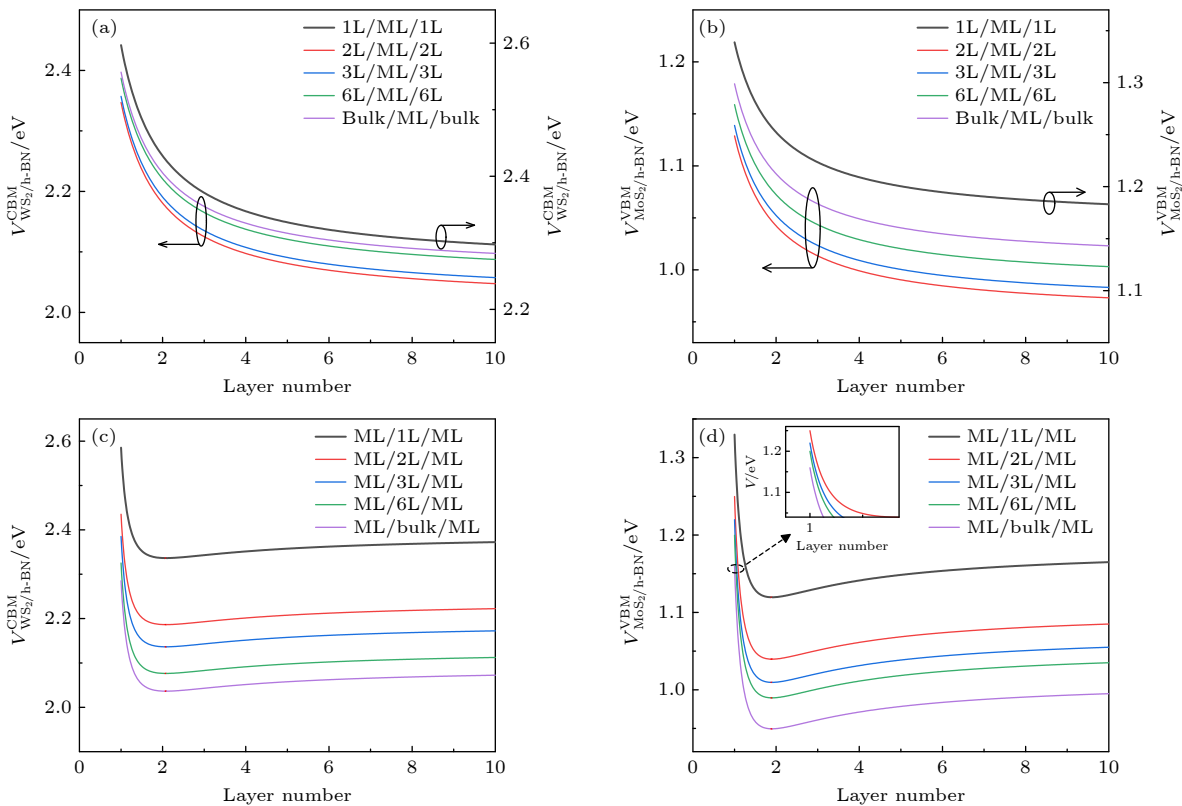


图 3 $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ 异质结 (a), (c) 电子隧穿势垒高度和 (b), (d) 空穴隧穿势垒高度随 WS_2 , h-BN 和 MoS_2 厚度的变化规律
Fig. 3. Evolution of (a), (c) the electron tunneling barrier height and (b), (d) hole tunneling barrier height with the thickness of WS_2 , h-BN and MoS_2 in $\text{WS}_2/\text{h-BN}/\text{MoS}_2$ heterostructures.

使得 1L WS₂/h-BN 的电子隧穿势垒高度明显大于 ML WS₂/h-BN. 图 3(b), (d) 描述了 h-BN/MoS₂ 空穴隧穿势垒高度随 h-BN 和 MoS₂ 厚度的变化规律. 与电子隧穿势垒高度变化趋势相似, h-BN/MoS₂ 空穴隧穿势垒高度随 h-BN 厚度的增大而减小, 随 MoS₂ 厚度的增大先减小后增大.

图 4 描绘了 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结厚度依赖的电子和空穴隧穿概率. 由 (8) 式可知, 电子和空穴的隧穿概率主要由势垒高度和宽度共同决定. 对于 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结, 当 h-BN 厚度不变时, 电子和空穴隧穿概率由势垒高度决定. 结果显示随着 WS₂ 和 MoS₂ 厚度的增大, 电子和空穴的隧穿概率先增大后减小, 如图 4(a), (b) 所示. 对于 1L WS₂/h-BN/1L MoS₂, 其隧穿概率减小可归因于 1L WS₂ 和 MoS₂ 大的激子结合能增大了界面势垒高度. 当固定 WS₂ 和 MoS₂ 厚度时, 发现 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结电子和空穴的隧穿概率随 h-BN

厚度的增大急剧减小, 如图 4(c), (d) 所示, 其电子和空穴的转移衰减常数分别为 0.77 和 0.74 Å⁻¹. 这是由于增大 h-BN 厚度使得势垒层宽度增大, 进而减小了隧穿概率. 本文结果与文献 [31] 的结果相近. 相比于势垒高度对电荷隧穿概率的影响, 势垒宽度起着主导作用. 例如, 1L WS₂/6L h-BN/1L MoS₂ 异质结电子和空穴的隧穿概率比 1L WS₂/1L h-BN/1L MoS₂ 降低了 4—5 个数量级. 此外, 由于相同条件下 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结空穴势垒高度小于电子隧穿势垒高度, 使得空穴隧穿概率略大于电子的隧穿概率.

4 结论

通过解析推导系统研究了 WS₂, h-BN 和 MoS₂ 厚度依赖的带隙、带边漂移以及激子结合能, 分析了 WS₂, h-BN 和 MoS₂ 厚度变化对 WS₂/h-BN/

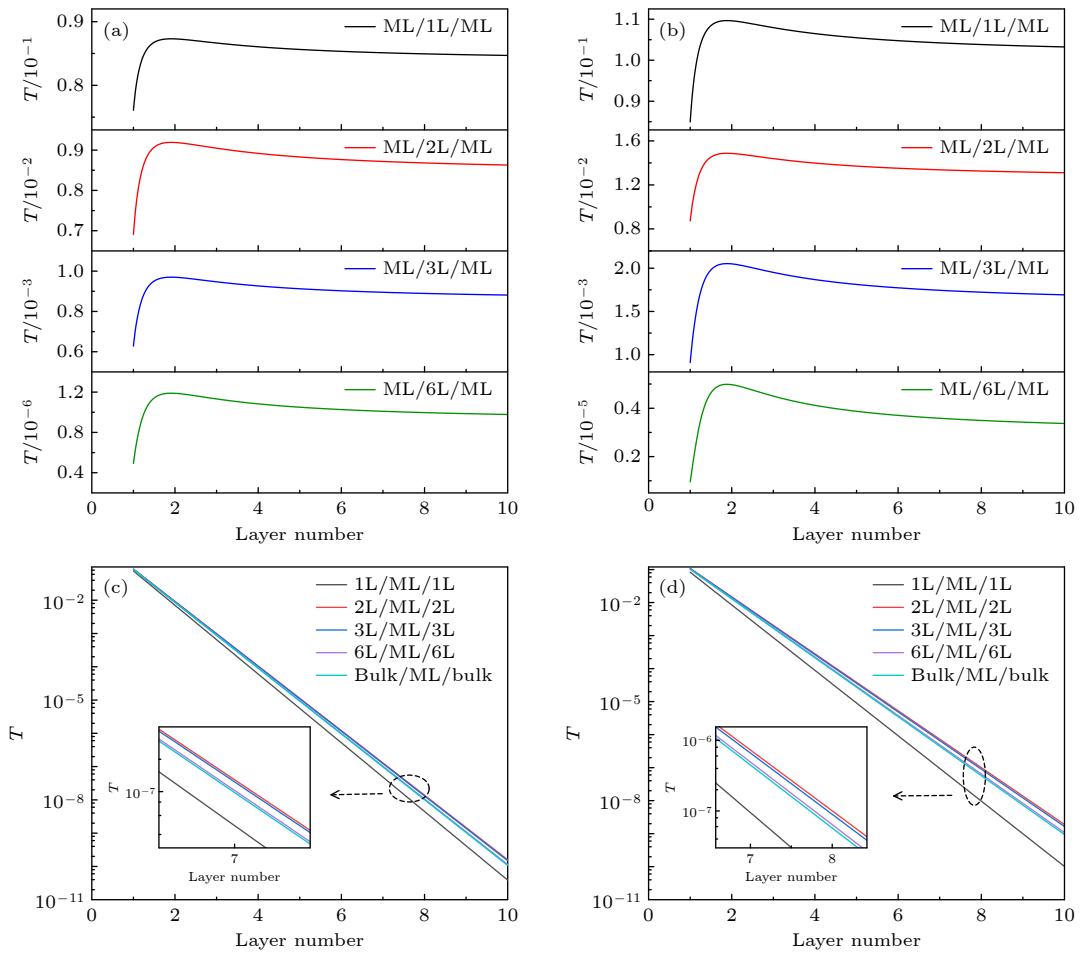


图 4 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结层数依赖的电荷隧穿概率 (a), (c) 电子隧穿概率; (b), (d) 空穴隧穿概率

Fig. 4. Charge tunneling probability as a function of thickness of WS₂, h-BN and MoS₂ in WS₂/h-BN/MoS₂ heterostructures: (a), (c) Tunneling probability of electrons; (b), (d) tunneling probability of holes.

MoS₂ 异质结界面势垒的影响, 建立电荷隧穿概率与界面势垒高度和宽度之间的理论关系. 结果表明, 由于 h-BN 导带底和价带顶分别随厚度的增大下移和上移, 导致 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结的界面势垒高度和宽度分别减小和增大. 然而, 当固定 h-BN 厚度时, ML WS₂/h-BN/ML MoS₂ 异质结的势垒高度随着 MoS₂ 和 WS₂ 厚度增大而增大, 但势垒高度均小于 1L WS₂/h-BN/1L MoS₂ 异质结. 1L WS₂/h-BN/1L MoS₂ 异质结高势垒可归因于 1L MoS₂ 和 WS₂ 具有大的激子结合能. 此外, 对于具有固定厚度 MoS₂ 和 WS₂ 的 WS₂/h-BN/MoS₂ 异质结, 由于电荷的隧穿概率主要由势垒宽度决定, 发现随着 h-BN 厚度的增大电荷的隧穿概率呈指数下降. 本文的相关结果为理解异质结中间绝缘层在电荷转移方面的应用提供了理论指导.

参考文献

- [1] Wang Q H, Zadeh K K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [2] Zheng B Y, Ma C, Li D, Lan J Y, Zhang Z, Sun X X, Zheng W H, Yang T F, Zhu C G, Ouyang G, Xu G Z, Zhu X L, Wang X, Pan A L 2018 *J. Am. Chem. Soc.* **140** 11193
- [3] Deng W, Wang L S, Liu J N, Yu X L, Chen F X 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 217302 (in Chinese) [邓文, 汪礼胜, 刘嘉宁, 余雪玲, 陈凤翔 2021 物理学报 **70** 217302]
- [4] Mak K F, Lee C, Hone J, Shan J, Heinz T F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [5] Bernardi M, Palumbo M, Grossman J C 2013 *Nano Lett.* **13** 3664
- [6] Zheng T, Lin Y C, Yu Y L, Acuna P V, Puzos A A, Torsi R, Liu C Z, Ivanov I N, Duscher G, Geoghegan D B, Ni Z H, Xiao K, Zhao H 2021 *Nano Lett.* **21** 931
- [7] Liu Y, Huang Y, Duan X F 2019 *Nature* **567** 323
- [8] Tebbe D, Schütte M, Watanabe K, Taniguchi T, Stampfer C, Beschoten B, Waldecker L 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 196902
- [9] Peng B, Yu G N, Liu X F, Liu B, Liang X, Bi L, Deng L J, Sun T C, Loh K P 2016 *2D Mater.* **3** 025020
- [10] Rigosi A F, Hill H M, Li Y, Chernikov A, Heinz T F 2015 *Nano Lett.* **15** 5033
- [11] Ubrig N, Ponomarev E, Zultak J, Domaretskiy D, Zolyomi V, Terry D, Howarth J, Gutiérrez-Lezama I, Zhukov A, Kudrynskiy Z R, Kovalyuk Z D, Patané A, Taniguchi T, Watanabe K, Gorbachev R V, Fal'ko V I, Morpurgo A F 2020 *Nat. Mater.* **19** 299
- [12] Wu Y W, Zhang Z Y, Ma L, Liu T, Hao N, Lu W G, Long M S, Shan L 2023 *Chin. Phys. B* **32** 107506
- [13] Yao H T, Guo X, Bao A D, Mao H Y, Ma Y C, Li X C 2022 *Chin. Phys. B* **31** 038501
- [14] Wen H D, Liu Y, Zhen L, Li Y, Xu C Y 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 036102 (in Chinese) [温恒迪, 刘跃, 甄良, 李洋, 徐成彦 2023 物理学报 **72** 036102]
- [15] Wu B, Zheng H H, Li S F, Ding J N, He J, Liu Z W, Liu Y P 2022 *Nano Res.* **15** 5640
- [16] Wang J C, Liu H, Hu X M, Liu Y S, Liu D M 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 8521
- [17] Zhu X D, He J B, Liu W M, Zheng Y X, Sheng C X, Luo Y, Li S J, Zhang R J, Chu J H 2023 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15** 2468
- [18] Qi R S, Li Q Z, Zhang Z C, Nie J H, Zou B, Cui Z Y, Kim Haleem, Sanborn C, Chen S, Xie J X, Taniguchi T, Watanabe K, Crommie M F, MacDonald A H, Wang F 2026 *Nat. Mater.* **25** 35
- [19] Zheng S W, Wang H Y, Wang L, Wang H, Sun H B 2020 *J. Phys. Chem. Lett.* **11** 9649
- [20] Zhou H Z, Zhao Y D, Tao W J, Li Y J, Zhou Q H, Zhu H M 2020 *ACS Nano* **14** 4618
- [21] Wu B, Zheng H H, Ding J N, Wang Y P, Liu Z W, Liu Y P 2022 *Nano Res.* **15** 9588
- [22] Li H P, Zhu W G 2023 *Nano Lett.* **23** 10651
- [23] Zhu X D, He J B, Zhang R J, Cong C X, Zheng Y X, Zhang H, Wang S Y, Zhao H B, Zhu M P, Zhang S W, Li S J, Chen L Y 2022 *Nano Res.* **15** 2674
- [24] Kim J Y, Kim S G, Youn J W, Lee Y, Kim J, Joo J 2018 *Appl. Phys. Lett.* **112** 193101
- [25] Shin D H, Jeong W U, Choi S H 2025 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17** 48474
- [26] Wang Z H, Jian J L, Weng Z J, Wu Q Q, Li J, Zhou X Y, Kong W, Xu X, Lin L L, Gu X F, Xiao P, Nan H Y, Xiao S Q 2025 *Adv. Sci.* **12** 2417300
- [27] Kim H, Wang H N, Wang Y L, Shinokita K, Watanabe K J, Taniguchi T, Konabe S, Matsuda K 2025 *ACS Nano* **19** 322
- [28] Latini S, Winther K T, Olsen T, Thygesen K S 2017 *Nano Lett.* **17** 938
- [29] Lu N, Guo H Y, Wang L, Wu X J, Zeng X C 2014 *Nanoscale* **6** 4566
- [30] Zhang L F, Gu L X, Ni R H, Xie M, Park S J, Jang H, Ma R D, Taniguchi T, Watanabe K, Zhou Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 216903
- [31] Qi R S, Joe A Y, Zhang Z C, Xie J X, Feng Q X, Lu Z Y, Wang Z Y, Taniguchi T, Watanabe K 2025 *Science* **388** 278
- [32] Zhou H Z, Chen Y Z, Zhu H M 2021 *Sci. Adv.* **7** eabg2999
- [33] Fang H, Battaglia C, Carraro C, Nemsak S, Ozdol B, Kang J S, Bechtel H A, Desai S B, Kronast F, Unal A A, Conti G, Conlon C, Palsson G K, Martin M C, Minor A M, Fadley C S, Yablonovitch E, Maboudian R, Javey A 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** 6198
- [34] Ouyang G, Wang C X, Yang G W 2009 *Chem. Rev.* **109** 4221
- [35] Zhu Z M, Zhang A, Ouyang G, Yang G W 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 263112
- [36] Dong J S, Zhao Y P, Ouyang G, Yang G W 2022 *Appl. Phys. Lett.* **120** 080501
- [37] Sun C Q 2007 *Prog. Solid State Chem.* **35** 1
- [38] Tan S L, Zhao Y P, Dong J S, Yang G W, Ouyang G 2019 *Phys. Chem. Chem.* **21** 23179
- [39] Zhu Y F, Jiang Q 2016 *Coordin. Chem. Rev.* **326** 1
- [40] Wang L W, Zunger A 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 1039
- [41] Yu W B, He Y, Ouyang G 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 094307
- [42] Chernikov A, Berkelbach T C, Hill H M, Rigosi A, Li Y L, Aslan O B, Reichman D R, Hybertsen M S, Heinz T F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 076802
- [43] Oloore L E, Owolabi T O 2021 *J. Electron. Mater.* **50** 163
- [44] Yun W S, Han S W, Hong S C, Kim I G, Lee J D 2012 *Phys. Rev. B* **85** 033305
- [45] Zhao W, Ghorannevis Z, Chu L, Toh M, Kloc C, Tan P H, Eda G 2013 *ACS Nano* **7** 791
- [46] Klots A R, Newaz A K M, Wang B, Prasai D, Krzyzanowska H, Lin J, Caudel D, Ghimire N J, Yan J, Ivanov B L, Velizhanin K A, Burger A, Mandrup D G, Tolks N H, Pantelides S T, Bolotin K I 2014 *Sci. Rep.* **4** 6608
- [47] Jiang Z Y, Liu Z R, Li Y C, Duan W H 2017 *Phys. Rev. Lett.*

118 266401

Carbon 132 157

[48] Rehman M A, Akhtar I, Choi W, Akbar K, Farooq A, Hussain S, Shehzad M A, Chun S H, Jung J, Seo Y 2018

[49] Alnuaimi A, Almansouri I, Saadatb I, Nayfeh A 2018 *RSC Adv.* 8 10593

Thickness effect of interface potential barrier and charge tunneling probability in WS₂/h-BN/MoS₂ heterostructures*

TAN Xin CHEN Yongjie LI Jing DONG Jiansheng[†] TAN Jianing[‡]

(Department of Physics, Jishou University, Jishou 416000, China)

(Received 17 October 2025; revised manuscript received 23 November 2025)

Abstract

Two-dimensional (2D) transition metal dichalcogenides (TMDs) and their van der Waals (vdW) heterostructures provide a compelling platform for advanced electronic and optoelectronic applications by utilizing their unique quantum confinement and strong light-matter interaction properties. The performance of such devices is fundamentally governed by interface charge transfer dynamics. Although recent experiments have shown that inserting insulating layers can effectively regulate these dynamics, there is still no predictive theoretical model to quantify how inserting insulator affects the probability of charge tunneling. Moreover, the mechanism details of how layer-thickness changes regulate the potential barrier height and width to adjust charge transfer have not been fully resolved. Here, we establish a theoretical framework by combining atomic-bond-relaxation theory with the quantum tunneling model, to systematically investigate how an h-BN dictates the interlayer barrier landscape and tunneling probabilities in WS₂/h-BN/MoS₂ heterostructures. We find that increasing h-BN thickness, which shifts its conduction band minimum downward and valence band maximum upward, reduces the heterostructures barrier height while increasing its effective width. Surprisingly, for a fixed h-BN thickness, the barrier height in the WS₂/h-BN/MoS₂ stack increases with the increase of TMD constituent thickness, but remains lower than that of monolayer-WS₂/h-BN/monolayer-MoS₂ heterostructure with the same h-BN thickness. This elevated barrier in the monolayer configuration is attributed to the large exciton binding energies of monolayer WS₂ and MoS₂. Further analysis reveals that when the thickness of h-BN remains constant, the charge tunneling probabilities for electrons and holes are primarily controlled by the barrier height and display non-monotonic dependence on TMD thickness, initially rising then falling. The decrease in the monolayer-WS₂/h-BN/monolayer-MoS₂ case is related to the barrier enhancement caused by strong excitonic effects. In contrast, with TMD thickness fixed, tunneling probabilities decay sharply and exponentially as h-BN thickness increases, with extracted attenuation constants of 0.77 Å⁻¹ for electrons and 0.74 Å⁻¹ for holes. This is a direct consequence of the widening tunnel barrier suppressing coherent interlayer transport. Our results provide a foundational model for understanding and engineering charge transfer dynamics through inserting insulating layers in vdW heterostructures, and offer critical insights for designing customized optoelectronic interfaces.

Keywords: WS₂/h-BN/MoS₂ heterostructures, band alignment, charge tunneling probability

DOI: 10.7498/aps.75.20251417

CSTR: 32037.14.aps.75.20251417

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12364007), the Youth Student Basic Research Project of Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant No. 2025JJ60929), the Scientific Research Foundation of Hunan Provincial Education Department, China (Grant No. 24A0366), and the Hunan Students' Platform for Innovation and Entrepreneurship Training Program, China (Grant No. S202410531045).

[†] Corresponding author. E-mail: jsdong@jsu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: jianing_tan@163.com

WS₂/h-BN/MoS₂异质结界面势垒及其电荷隧穿概率的厚度效应

谭鑫 陈永杰 李景 董健生 谭家宁

Thickness effect of interface potential barrier and charge tunneling probability in WS₂/h-BN/MoS₂ heterostructures

TAN Xin CHEN Yongjie LI Jing DONG Jiansheng TAN Jianing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 060713 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251417

CSTR: 32037.14.aps.75.20251417

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251417>

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

MoS₂/MoTe₂垂直异质结的电荷传输及其调制

Charge transmission of MoS₂/MoTe₂ vertical heterojunction and its modulation

物理学报. 2023, 72(3): 036102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221768>

h-BN/diamond异质结的制备与沟道载流子输运性质

Synthesis of h-BN/diamond heterojunctions and its electrical characteristics

物理学报. 2022, 71(22): 228101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220995>

基于熔融玻璃的预沉积法生长毫米级单晶MoS₂及WS₂-MoS₂异质结

Millimeter-level MoS₂ monolayers and WS₂-MoS₂ heterojunctions grown on molten glass by pre-chemical vapor deposition

物理学报. 2022, 71(4): 048101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211735>

高温退火优化h-BN/Ag/Ag₂O异质结构型及表面增强拉曼散射性能研究

Optimization of h-BN/Ag/Ag₂O heterostructure by high temperature annealing and its surface-enhanced Raman scattering performance

物理学报. 2023, 72(22): 227401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231105>

Fe原子吸附的锑烯/WS₂异质结的磁电子性质及调控效应

Magneto-electronic properties and manipulation effects of Fe-adsorbed Sb/WS₂ heterostructure

物理学报. 2022, 71(21): 218503 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220949>

厚度梯度MoS₂的能带漏斗效应及其电荷转移行为

Energy funneling effect and charge transfer behavior of MoS₂ with thickness gradient

物理学报. 2025, 74(18): 186801 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250661>