

金衬底调控单层二硫化钼电子性能的第一性原理研究

张理勇 方粮 彭向阳

Tuning the electronic property of monolayer MoS₂ adsorbed on metal Au substrate: a first-principles study

Zhang Li-Yong Fang Liang Peng Xiang-Yang

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 187101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.187101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

GGA+U 的方法研究 Ag 掺杂浓度对 ZnO 带隙和吸收光谱的影响

GGA+U study on the effects of Ag doping on the electronic structures and absorption spectra of ZnO

物理学报.2015, 64(15): 157101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.157101>

N-F 共掺杂锐钛矿二氧化钛 (101) 面纳米管的第一性原理研究

N-F co-doped in titanium dioxide nanotube of the anatase (101) surface: a first-principles study

物理学报.2015, 64(14): 147103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147103>

金和银的晶格反演势的构建及应用

Application and foundation on inversion lattice potential of gold and silver

物理学报.2015, 64(14): 147101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147101>

BiTiO₃ 电子结构及光学性质的第一性原理研究

First-principles study of electronic and optical properties of BiTiO₃

物理学报.2015, 64(14): 147102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147102>

二氧化铀电子结构和弹性性质的第一性原理研究

Study on the electronic structure and elastic constants of uranium dioxide by first principles

物理学报.2015, 64(9): 097101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097101>

金衬底调控单层二硫化钼电子性能的第一性原理研究*

张理勇¹⁾²⁾ 方粮^{1)2)†} 彭向阳³⁾

1)(国防科学技术大学, 高性能计算国家重点实验室, 长沙 410072)

2)(国防科学技术大学计算机学院, 长沙 410072)

3)(湘潭大学物理与光电工程学院, 湘潭 411005)

(2015年3月24日收到; 2015年5月16日收到修改稿)

基于密度泛函的第一性原理研究了金衬底对单层二硫化钼电子性能的调控作用. 从结合能、能带结构、电子态密度和差分电荷密度四个方面进行了深入研究. 结合能计算确定了硫原子层在界面的排布方式, 并指出这种吸附结构并不稳定. 能带结构分析证实了金衬底与单层二硫化钼形成肖特基接触, 并出现钉扎效应. 电子态密度分析表明金衬底并没有影响硫原子和钼原子之间的共价键, 而是通过调控单层二硫化钼的电子态密度增加其导电率. 差分电荷密度分析表明单层二硫化钼的导电通道可能在界面处产生. 研究结果可对单层二硫化钼晶体管的建模和实验制备提供指导.

关键词: 二硫化钼, 金衬底, 电子性能, 第一性原理

PACS: 71.15.Mb, 68.43.Bc, 82.65.+r

DOI: 10.7498/aps.64.187101

1 引言

近年来, 随着石墨烯被成功制备^[1], 其他二维层状纳米材料如黑磷^[2]、过渡金属硫化物等^[3]也吸引了众多领域研究人员的广泛关注. 二硫化钼(MoS₂)由三层原子层构成, 中间一层为钼原子层, 上下两层均为硫原子层, 钼原子与硫原子以共价键结合形成二维原子晶体. 多层二硫化钼由若干单层二硫化钼组成层间存在弱的范德瓦耳斯力, 层间距约为0.65 nm^[4]. 单层二硫化钼可以通过机械剥离的方法直接从二硫化钼晶体中得到, 也可以采用化学气相沉积等方法制备^[5]. 由于量子限制效应^[6]的影响, 单层二硫化钼表现出许多优于块二硫化钼晶体的力学、电子、光学性质. 单层二硫化钼为直接带隙结构, 可以用于制备光电晶体管^[7]; 单层二硫化钼还具有压电效应, 可以应用于压电传感器以及

在机械能与电能转化中发挥作用^[8]. 通过温度^[9]、应力^[10,11]、掺杂等^[12]方式可以调控单层硫化钼的电磁性能.

单层二硫化钼具有天然的带隙, 很有可能成为下一代晶体管的导电沟道材料. Kis等^[13]在2011年第一次制备了单层二硫化钼晶体管, 晶体管电流开关比达到 10^8 , 迁移率达到 $200 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 其优良的电学特性可以用于制备低功耗电子器件. 同年, Kis等实现了“或非”电路理论上以“或非”电路为基础可以实现所有集成电路的运算功能. Palacios等^[14]在2012制备了基于双层二硫化钼的环形震荡器, 该集成电路中晶体管增强型和耗尽型模式的实现利用了顶栅电极不同金属具有不同功函数的特征. 其他学者还研究了改进单层二硫化钼晶体管性能的方法^[15-17]. 上述二硫化钼晶体管的源漏电极都采用金电极, 或者金/钽电极. 文献^[4]的结果显示金电极和二硫化钼之间形成欧姆接触. 而文

* 国家自然科学基金重点项目(批准号: 61332003)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lfang@nudt.edu.cn

献[18]指出,金属与二硫化钼接触界面性质与费米能级钉扎效应相关,功函数低的金属能改善接触性能,提高电子发射率,降低接触电阻.将单层二硫化钼裁剪为纳米条带,根据纳米条带边缘形状分为扶手和锯齿形,锯齿形具有金属性,扶手形保持半导体性质[19].与石墨烯转化为扶手纳米条带时迁移率下降几个数量级相比,二硫化钼扶手形纳米条带迁移率数值保持不变,极性发生转换[20].有V形缺陷的锯齿形纳米条带表现出半导体性质[21].通过吸附金属,扶手形纳米条带将从半导体转化为金属,可用于电极和传输线[22].由于单层二硫化钼独特的电子性质,研究金电极与它的相互作用,对于制备和优化单层二硫化钼晶体管显得尤为重要.本文基于密度泛函的第一性原理研究了金衬底对单层二硫化钼电子性能的调控作用,确定了二硫化钼与金衬底接触界面的排布方式,能带、电子态密度和差分电荷分析深入剖析了二硫化钼电子性能改变的微观机理,并与钛衬底吸附单层二硫化钼进行了对比.

1.1 模型与计算方法

几何结构优化和电子结构的计算采用基于密度泛函理论平面波赝势方法的VASP (Vienna *ab-initio* simulation package) 软件包完成[23].原子实和价电子之间的相互作用通过缀加投影波方法(projector-augmented wave method PAW)赝势来描述.平面波截断能量为400 eV.电子间相互作用的交换关联能采用广义梯度近似的Perdew-Burke-Ernzerhof[24]方案处理.布里渊区积分计算K点网格采用Monkhost-Pack[25]方法产生,结构优化计算采用 $9 \times 9 \times 1$,能带计算和态密度计算采用 $19 \times 19 \times 1$,且都考虑自旋轨道耦合作用.在优化单层二硫化钼过程中,对所有原子进行完全弛豫,单个原子能量收敛精度为 10^{-4} eV,每个原子受力小于0.01 eV/Å.

金衬底吸附单层二硫化钼结构中,选取金(111)面作为衬底金,原子层由下至上依次标记为A, B, C, A, B,如图1(b)所示.单层二硫化钼(0001)面下层硫原子与金原子B层结合,硫原子分别可以采取A, B, C三种排布方式通过比较结合能大小的方式确定硫原子层的最优排布.理论计算中,选取 $1 \times 1 \times 8$ 共8个原子的原胞,如图1(a)中红色菱形所示.其中自底向上的A, B, C三层

金原子位置保持不变,代表金的体相结构,而剩余的A, B两层原子允许弛豫优化,单层二硫化钼的原子层都允许弛豫优化.为了避免Z轴方向原子之间的相互影响,在Z轴上方增加了15 Å的真空层.金的晶格常数 $a = 4.08$ Å,图1(a)中红色菱形的边长为2.885 Å,与优化后的二硫化钼晶格常数 $a = 3.182$ Å不同,存在一定的晶格失配.为简化计算,本文将金的晶格常数放大10.3%.引入钛(0001)面吸附单层二硫化钼作为对比,钛的晶格常数为2.95,与单层二硫化钼具有更好的匹配性能.计算结合能时加入范德瓦耳斯力修正.

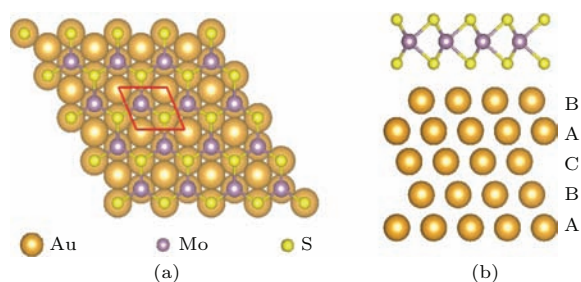


图1 (网刊彩色) (a) 金衬底吸附单层二硫化钼顶视图,红色菱形区域为理论计算选取的原胞,金色、紫色、黄色小球分别代表金、钼、硫原子; (b) 金衬底吸附单层二硫化钼侧视图,金原子层(111)面按照A, B, C, A, B顺序排列,二硫化钼(0001)面下层硫原子层采取金原子中A层的排列方式

Fig. 1. (网刊彩色) (a) Top views of monolayer MoS₂ on the Au substrate the red rhombus shows the units cell in the calculations, gold purple and yellow ball represents Au Mo and S respectively; (b) side views of monolayer MoS₂ on the Au substrate, Au(111) lines as A, B, C, A, B, the S layer of MoS₂(0001) in the interface line as A of Au(111).

2 结果与讨论

为了深入研究金衬底与单层二硫化钼相互作用的机理,本文首先通过计算结合能来确定吸附系统的稳定性和最终形态,并与钛(0001)面吸附结果对比.

金衬底吸附单层二硫化钼结构中,硫原子层共有A, B, C三种排布方式.初始状态下,二硫化钼(0001)面的下层硫原子与金原子层的距离为2.7 Å.表1给出了晶格结构弛豫以后金原子层与硫原子层之间的距离.硫原子采取A和C两种排布方式时,弛豫之后的距离增加;硫原子采取B排布方式时,弛豫以后的距离减小.为了比较不同硫原子不同排布方式的稳定性定义结合能的计算公式

$$E_{ab} = E_{\text{total}} - E_{\text{Au}} - E_{\text{MoS}_2}, \quad (1)$$

其中 E_{ab} , E_{total} , E_{Au} , E_{MoS_2} 分别表示结合能、金衬底吸附单层二硫化钼之后的总能量、金原子层的能量和单层二硫化钼的能量. 结合能是吸附稳定性的判定标准, 硫原子采取 A 和 C 两种排布方式的结合能数值比 B 结合能略大, 说明 B 排布方式更加稳定. 但是 A, B, C 三种排布方式的结合能都大于 0, 说明本质上这三种吸附结构并不稳定, 这一点与物

理实验中金的黏附力不强、不能直接沉积作为电极相符合 [14]. 钛吸附单层二硫化钼结构中, 结合能和原子层间距离都明显下降, 说明钛黏附力更强. 考虑范德华力修正, 结合能要降低 1 eV 左右, 此时钛吸附的结合能小于零, 金吸附仍然大于零. 本文以后的计算中, 单层二硫化钼与金原子层结合都采用 B 层的排布方式.

表 1 二硫化钼与金和钛原子层之间的距离以及结合能
Table 1. Distance and binding energy between Au Ti and MoS₂.

硫原子层排布方式	金原子层		钛原子层	
	距离/ Å	结合能/eV	距离/ Å	结合能/eV
A	2.7757	2.4561	1.8435	0.3650
B	2.5286	2.2168	2.5101	1.0424
C	2.7301	2.4188	1.5582	0.2445

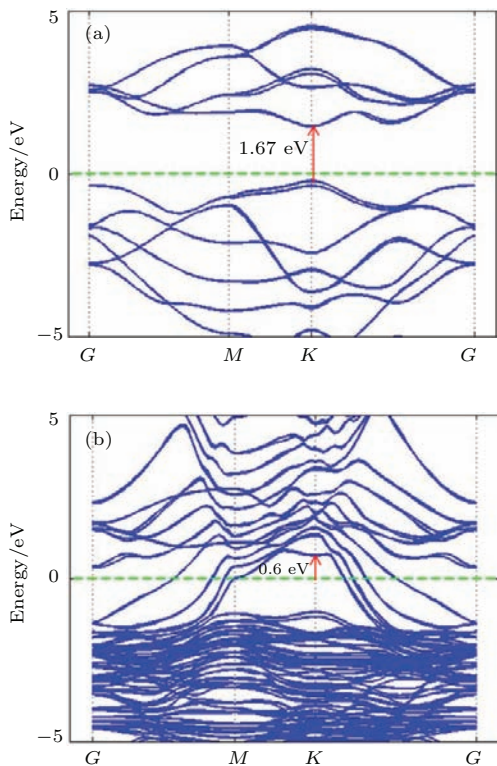


图 2 (网刊彩色) (a) 单层二硫化钼能带结构, 红色数字表示直接带隙为 1.67 eV; (b) 金衬底吸附单层二硫化钼后的能带结构, 红色数字表示金与单层二硫化钼的肖特基势垒为 0.6 eV

Fig. 2. (color online) (a) The band structure of monolayer MoS₂, red numbers point out the band gap is 1.67 eV; (b) the band structure of monolayer MoS₂ on the Au substrate, red numbers points out the Schottky barrier between Au and monolayer MoS₂ is 0.6 eV.

为了研究金衬底对单层二硫化钼电子性质的影响, 本文还计算了单层二硫化钼和金原子层吸附

单层二硫化钼之后的能带结构和电子态密度, 如图 2 和图 4 所示, 图 2 中绿色虚线表示将费米能级调整至 0 eV.

单层二硫化钼的带隙为 1.67 eV, 与刘俊等 [26] 的计算结果 1.77 eV 接近, 都小于实验值 1.9 eV [27]. 本文计算能带结构考虑了自旋轨道耦合, 自旋分裂导致价带顶能级上升, 所以带隙小于文献 [26]. 金衬底吸附单层二硫化钼后, 能带穿越费米能级, 整个结构表现出金属性. 通过仔细对比图 2 (a) 与图 2 (b) 可以发现, 实际上图 2 (a) 中单层二硫化钼能带结构保存的比较完整, K 点附近的禁带继续保留. 图 2 (b) 之所以变得复杂是因为叠加了金原子的能带结构.

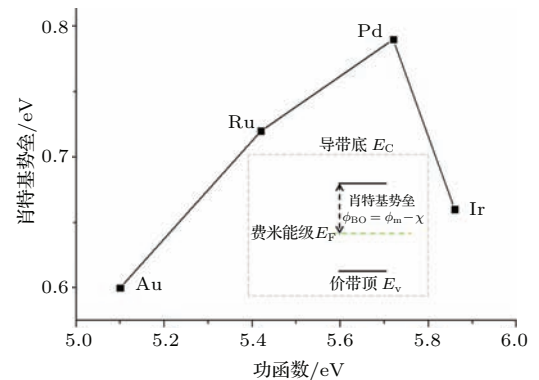


图 3 不同金属衬底吸附单层二硫化钼后, 接触面肖特基势垒与衬底金属功函数关系图, 插图给出了定义肖特基势垒的示意图, 其中 E_F 表示金属与单层二硫化钼接触后达到平衡状态下的费米能级

Fig. 3. The relationship between the Schottky barrier of contact interface and the work function of Au, inset defines the Schottky barrier, E_F represents Fermi energy after equilibrium.

通过与文献[28]中过渡金属Ru(0001), Pd(111)和Ir(111)吸附单层二硫化钼结果对比,如图3所示, Au接触面的肖特基势垒0.6 eV,比Ru接触面的肖特基势垒0.72 eV低0.12 eV,而Au的功函数5.1 eV比Ru 功函数5.42 eV低0.32 eV,肖特

基势垒差与金属功函数差不相等说明金属与单层二硫化钼接触面中可能出现了钉扎效应.但是单层二硫化钼非常薄,不可能激发强烈的钉扎效应,采用金属感生间隙态的理论解释金属与单层二硫化钼接触面的特殊效应更加合理.

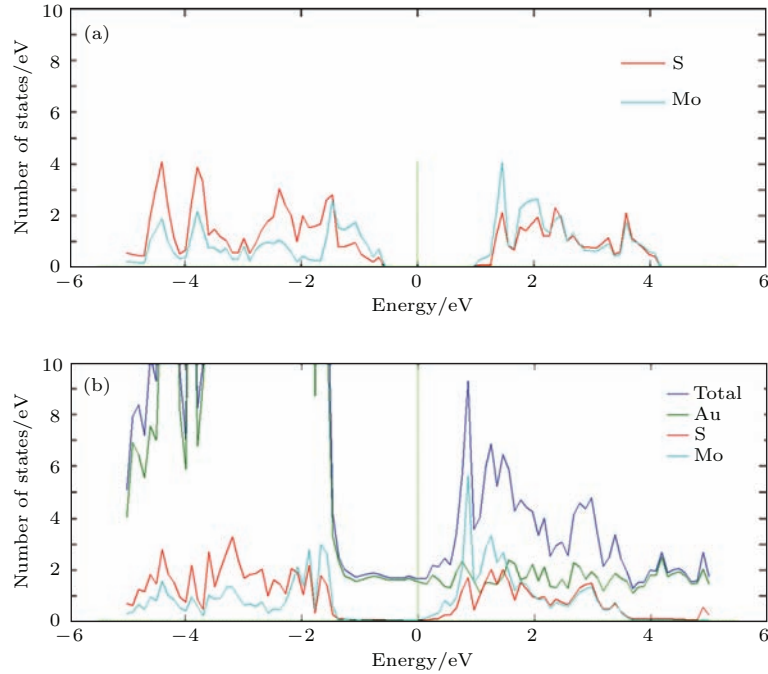


图4 (网刊彩色)(a)单层二硫化钼态密度,红色线条表示硫原子的态密度,天蓝色线条表示钼原子态密度,垂直于横轴过零点的绿色虚线表示将费米能级调整至0 eV; (b)金衬底吸附单层二硫化钼后的态密度,深蓝色表示吸附结构总态密度,绿色线条表示金原子的态密度,红色线条表示硫原子的态密度,天蓝色线条表示钼原子态密度

Fig. 4. (color online) (a) The density of states of monolayer MoS₂, red and sky blue lines represent the density of states of S and Mo respectively, the green dot line indicates adjusting the Fermi energy to 0 eV; (b) the density of states of monolayer MoS₂ on Au, red sky blue green and blue lines represent the density of states of S Mo Au and total respectively.

通过分析图4(a)可以发现硫原子和钼原子的态密度在导带和价带的重合度都很高,表示两种原子之间存在比较强的共价键,二硫化钼的带隙为1.76 eV,电子不会在这个区域出现.图4(b)中硫原子和钼原子态密度分布形状与图4(a)基本相同,但是整体上向横轴负方向发生了接近1 eV的偏移,导带底接近费米能级,表明硫原子和钼原子在接近费米能级位置出现的概率显著增加.文献[29]对钛原子层吸附单层二硫化钼进行了电子态密度分析,结果同样引起硫原子和钛原子的态密度向横轴负方向偏移,偏移量更大.热平衡电子浓度公式:

$$n_0 = \int g_c(E) f_F(E) dE, \quad (2)$$

其中 n_0 , $g_c(E)$, $f_F(E)$ 分别表示电子浓度、电子态密度和费米分布函数.由积分计算公式可知在

$f_F(E)$ 不变的情况下,态密度 $g_c(E)$ 右移将增大积分结果的电子浓度 n_0 .硫原子和钼原子的电子性能受到金原子层的调控,发生了比较明显的变化,尤其是在费米能级附近,随着电子浓度增加,电导率也将增加.根据文献[29]的结论,钛原子层吸附单层二硫化钼时,电导率将变得更大.

为进一步研究金原子层与单层二硫化钼界面的电荷转移情况,本文计算了吸附后总的电荷密度以及差分电荷密度:吸附后总电荷密度减去吸附前单层二硫化钼电荷密度与金原子层电荷密度之和得到的差值,如图5所示[30].从图5(a)中可见钼原子与硫原子通过一条很细的线条连接,表示它们之间形成了共价键,这一点与分析态密度图得出的结论相同.但是硫原子却没有与金原子形成共价键,这一点与结合能大于0都说明金衬底吸附单层二硫

化钼并不稳定. 图 5(b) 中的电荷密度比图 5(a) 小两个数量级, 表明只是发生了很小的电荷转移. 从图 5(b) 中看到, 下面四层金原子孤立出现, 说明吸附前后这四层金原子的电荷密度基本上没有发生转移. 界面处的硫原子和金原子上下出现天蓝色的小球, 表明此区域发生电荷移出, 界面处还出现三层橙红色圆环, 表明此区域发生电荷积累. 金衬底吸附单层二硫化钼后, 在界面发生了电荷转移, 下层硫原子周围的积累电荷可能形成导电通道.

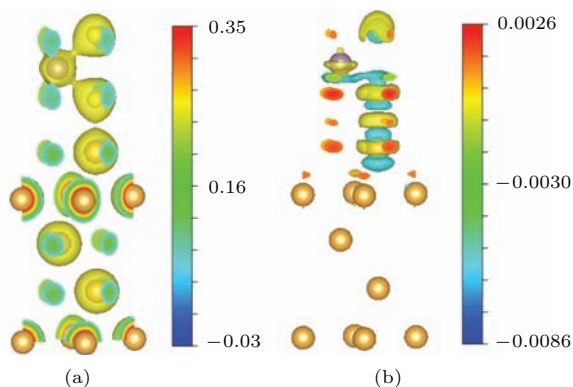


图 5 (网刊彩色)(a) 金衬底吸附单层二硫化钼电荷密度图, 等值面大小为 $0.072 \text{ e}/\text{\AA}^3$, 右边给出了颜色刻度, 单位是 $\text{e}/\text{\AA}^3$; (b) 金衬底吸附单层二硫化钼差分电荷密度图, 等值面大小为 $0.0012 \text{ e}/\text{\AA}^3$

Fig. 5. (color online) (a) The charge density of monolayer MoS_2 on Au, the isosurface is $0.072 \text{ e}/\text{\AA}^3$, the right strip stands for density, the unit is $\text{e}/\text{\AA}^3$; (b) the charge difference density, the isosurface is $0.0012 \text{ e}/\text{\AA}^3$.

3 结 论

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势的方法研究了金衬底吸附对单层二硫化钼电子性质的影响. 从结合能、能带结构、电子态密度和差分电荷密度四个方面进行了深入研究. 结合能计算表明, 金衬底吸附单层二硫化钼时, 界面硫原子层的最佳排布方式就是与界面金原子层相同的排布方式; 但是金衬底吸附单层二硫化钼并不稳定, 这也解释了为什么制备硫化钼晶体管时要采用钛作为黏附层. 能带结构分析表明, 金衬底与单层二硫化钼形成肖特基接触, 并出现钉扎效应. 态密度分析表明, 金衬底并没有影响硫原子和钼原子之间的共价键, 金衬底的作用表现在将单层二硫化钼的态密度分布整体向横轴右方平移 1 eV , 从而增加单层二硫化钼的导电率. 差分电荷密度分析不仅进一步证实了前文的结论, 而且表明单层二硫化钼的

导电通道可能在界面处产生. 与其他半导体材料不同, 在单层二硫化钼中, 采用金作为电极并不是最佳的选择. 通过文中的对比发现, 选择钛作为电极将激发单层二硫化钼中产生更多的导电载流子, 从而提高单层二硫化钼的导电率, 达到提升单层二硫化钼电子器件迁移率等性能. 钪由于功函数与单层二硫化钼电子亲和能接近, 接触电阻非常小, 也是一种提升单层二硫化钼电子器件性能的方法. 石墨烯具有半金属性质, 具有费米能级容易被电场调控的优点, 而且同样是单层结构, 可以采用石墨烯作为金属电极. 综上所述, 钛、钪和石墨烯可能是比较好的金属电极. 本文的研究结果将对单层二硫化钼晶体管的建模和实验制备提供借鉴和指导.

参考文献

- [1] Ahn H S, Kim J M, Park C, Jang J W, Lee J S, Kim H, Kaviani M, Kim M H 2013 *Sci. Rep.* **3** 1960
- [2] Li L K, Yu Y J, Ye G J, Ge Q Q, Ou X D, Wu H, Feng D L, Chen X H, Zhang Y B 2014 *Nat. Nanotechnol.* **35** 372
- [3] Jariwala D, Sangwan V K, Lauhon L J, Marks T J, Hersam M C 2014 *ACS Nano* **82** 1102
- [4] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 147
- [5] Wang Q H, Kalantar Z K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [6] Kuc A, Zibouche N, Heine T 2011 *Phys. Rev. Lett.* **83** 245213
- [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] Wu W Z, Wang L, Li Y L, Zhang F, Lin L, Niu S M, Chenet D, Zhang X, Hao Y F, Heinz T F, Hone J, Wang Z L 2014 *Nature* **514** 470
- [9] Wang Z Y, Zhou Y L, Wang X Q, Wang F, Sun Q, Guo Z X, Jia Y 2015 *Chin. Phys. B* **24** 026501
- [10] 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]
- [11] Yue Q, Kang J, Shao Z Z, Zhang X A, Chang S L, Wang G, Qin S Q, Li J B 2012 *Phys. Lett. A* **376** 1166
- [12] Cao J, Cui L, Pan J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 187102 (in Chinese) [曹娟, 崔磊, 潘靖 2013 物理学报 **62** 187102]
- [13] Radisavljevic B, Whitwick M B, Kis A 2011 *ACS Nano* **5** 9934
- [14] Wang H, Yu L L, Lee Y H, Shi Y M, Hsu A, Chin M L, Li L J, Dubey M, Kong J, Palacios T 2012 *Nano Lett.* **12** 4674
- [15] Late D J, Liu B, Matte H H S S R, Druvid V P, Rao C N R 2012 *ACS Nano* **66** 5635
- [16] Kiriya D, Tosun M, Zhao P D, Kang J S, Javey A 2014 *J. Am. Chem. Soc.* **136** 7853

- [17] Bao W Z, Cai X H, Kim D, Sridhara K, Fuhrer M S 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 042104
- [18] Das S, Chen H Y, Penumatcha A V, Appenzeller J 2012 *Nano Lett.* **13** 100
- [19] Li Y F, Zhou Z, Zhang S B, Chen Z F 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 16739
- [20] Cai Y Q, Zhang G, Zhang Y W 2014 *J. Am. Chem. Soc.* **136** 6269
- [21] Li X M, Long M Q, Cui L L, Xiao J, Xu H 2014 *Chin. Phys. B* **23** 047307
- [22] Li W F, Guo M, Zhang G, Zhang Y W 2014 *Chem. Mater.* **26** 5625
- [23] Kresse G, Furthmuller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [24] Kresse G, Joubert J 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [25] Monkhorst H J, Pack J F 1979 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [26] Liu J, Liang P, Shu H B, Shen T, Xing S, Wu Q 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 117101 (in Chinese) [刘俊, 梁培, 舒海波, 沈涛, 邢淞, 吴琼 2014 物理学报 **63** 117101]
- [27] Mak K F, Lee C G, Hone J, Shan J, Heinz T F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [28] Chen W, Santos E J G, Zhu W G, Kaxiras E, Zhang Z Y 2013 *Nano Lett.* **13** 509
- [29] Igor P, Gotthard S, David T 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 156802
- [30] Momma K, Izumi F 2011 *J. Appl. Crystallogr.* **44** 1272

Tuning the electronic property of monolayer MoS₂ adsorbed on metal Au substrate: a first-principles study*

Zhang Li-Yong¹⁾²⁾ Fang Liang^{1)2)†} Peng Xiang-Yang³⁾

1) (State Key Laboratory of High Performance Computing, National University of Defense Technology, Changsha 410072, China)

2) (School of Computer, National University of Defense Technology, Changsha 410072, China)

3) (School of Physics and Optoelectronics Xiangtan University, Xiangtan 411005, China)

(Received 24 March 2015; revised manuscript received 16 May 2015)

Abstract

Using first principles calculations within density functional theory, we investigate the electronic property of a single-layer MoS₂ adsorbed on Au. All the quantities are calculated using the Vienna *ab initio* simulation package. Calculations are performed using the projector augmented wave method with the Perdew-Burke-Ernzerhof functional and a kinetic energy cutoff of 400 eV. The atomic plane and its neighboring image are separated by a 15 Å vacuum layer. The *k*-meshes for the structure relaxation and post analysis are $9 \times 9 \times 1$ and $19 \times 19 \times 1$, respectively. The spin-orbit coupling is considered in the calculation. The research includes the binding energy, the band structure, density of states (DOS) and electric charge difference density. Three contact modes between MoS₂ (0001) and Au (111) are considered. When the atom S layer and the atom Au layer on the contacting interface have the same structure, the minimum binding energy and distance between MoS₂ (0001) and Au(111) are 2.2 eV and 2.5 Å respectively. The minimum binding energy confirms that the absorption is unstable. The band structure demonstrates that the MoS₂-Au contact nature is of the Schottky-barrier type, and the barrier height is 0.6 eV which is bigger than MoS₂-Sc contact. By comparison with other metal contacts such as Ru(0001), Pd(111) and Ir(111), the dependence of the barrier height on the work function difference exhibits a Fermi-level pinning. But the MoS₂ is so thin that the Fermi-level pinning must be very small. Maybe there is a metal induced gap state. DOS points out that the Au substrate has no influence on the covalent bond between Mo and S. The influence of the Au substrate is that it shifts the DOS of monolayer MoS₂ left on the axis. The change of DOS results in the increases of electron concentration and electric conductivity. Other calculation points out that Ti substrate can excite more electrons. Electric charge density difference demonstrates that there are a few electric charges that transfer on the contact interface. The conducting path of monolayer MoS₂ may emerge at the interface between Au and MoS₂. In summary, the Au electrode is not the best electrode in the MoS₂ device. The Ti electrode can excite more electrons from MoS₂. The work function of Sc electrode is close to the affine of MoS₂. The Fermi energy level of graphene can be tuned by external voltage. So the Ti, Sc and graphene will be the better electrodes for MoS₂ device. Results of this study may provide a theoretical basis for single-layer MoS₂ transistor and guidance for its applications.

Keywords: MoS₂, Au substrate, electronic structure, first-principle

PACS: 71.15.Mb, 68.43.Bc, 82.65.+r

DOI: 10.7498/aps.64.187101

* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61332003).

† Corresponding author. E-mail: lfang@nuct.edu.cn