

# 外电场和双轴应变对 $\text{MoSH}/\text{WSi}_2\text{N}_4$ 肖特基结势垒的调控\*

梁前 钱国林 罗祥燕 梁永超 谢泉†

(贵州大学大数据与信息工程学院, 新型光电子材料与技术研究所, 贵阳 550025)

(2022 年 5 月 5 日收到; 2022 年 7 月 6 日收到修改稿)

鉴于实验上最新合成的二维半导体材料  $\text{WSi}_2\text{N}_4$ (WSN) 和二维金属材料  $\text{MoSH}$ (MSH), 构建了金属-半导体 MSH/WSN 肖特基结. 在实际的金属-半导体接触应用中, 肖特基势垒的存在严重降低了器件的性能. 因此, 获得较小的肖特基势垒甚至是欧姆接触至关重要. 本文使用第一性原理计算研究了在外电场和双轴应变作用下 MSH/WSN 肖特基结势垒的变化. 计算结果表明, 外电场和双轴应变均可以有效地调控 MSH/WSN 肖特基结势垒. 正向外电场能实现 MSH/WSN 肖特基结 p 型与 n 型肖特基接触之间的动态转化, 而负向外电场可实现 MSH/WSN 肖特基结向欧姆接触的转化. 此外, 较大的双轴应变可实现 MSH/WSN 肖特基结 p 型与 n 型肖特基接触的相互转化. 此项工作为基于 WSN 半导体的肖特基功能器件及场效应晶体管提供理论指导.

**关键词:**  $\text{WSi}_2\text{N}_4$ ,  $\text{MoSH}$ , 金属-半导体接触, 肖特基接触

**PACS:** 73.30.+y, 79.60.Jv

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220882

## 1 引言

2004 年, 石墨烯成功从块体石墨中被剥离出来<sup>[1]</sup>, 它展现出优异的电子、光学、力学和机械特性以及超高的延展性<sup>[2-4]</sup>, 同时, 它在室温下具有超高载流子迁移率<sup>[5]</sup>(约为  $25000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ). 但是, 石墨烯零带隙的特性限制了其在电子器件方面的应用, 人们开始把目光转向别的二维材料: 过渡金属硫化物 (transition metal dichalcogenides, TMDCs)<sup>[6-9]</sup>、六方氮化硼 (h-BN)<sup>[10-12]</sup>、黑磷 (BP)<sup>[13,14]</sup> 等, 这些新兴的二维材料在纳米电子学、光电子学、谷电子学、自旋电子学和储能技术等方面有着极其诱人的潜力<sup>[15-18]</sup>. 随后, 范德瓦耳斯异质结的出现更是带来了相对于其他单层二维材料更诱人的前景. 范德瓦耳斯异质结保留了每层二维材料的固有电子特性, 具有独特的电子和器件性

能, 在纳米电子和光电子器件制造等领域中逐渐取代了石墨烯和其他单层二维材料.

2020 年, Hong 等<sup>[19]</sup>通过化学气相沉积 (chemical vapor deposition, CVD) 成功合成了自然界不存在的新型层状二维材料  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ (MSN) 及其衍生物 WSN, 七原子层结构带来了相比于其他二维材料更优异的性能, 许多基于 MSN 的研究就此展开. 他们还采用第一性原理计算预测了一个全新的  $\text{MA}_2\text{Z}_4$  家族, 其中  $M$  代表了过渡金属元素 (Mo, W, V, Nb, Ta, Ti, Zr, Hf, 或 Cr),  $A$  代表了 Si 或 Ge 元素,  $Z$  代表了 N, P 或 As 元素, 它们均在动力学上稳定. Wu 等<sup>[20]</sup>通过在 MSN 和 WSN 双层上施加外加电场和双轴应变, 发现压缩应变能实现该双层结构从间接带隙到直接带隙的转变, 而外加电场可实现该双层结构从半导体性到金属性的转变, 表明 MSN/WSN 双层结构有望成为下一代纳

\* 贵州大学智能制造产教融合创新平台及研究生联合培养基地 (批准号: 2020-520000-83-01-324061)、国家自然科学基金 (批准号: 61264004) 和贵州省高层次创新型人才培养项目 (批准号: 黔科合人才 [2015]4015) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: qxie@gzu.edu.cn

米电子和光电子新材料. 最近, Qian 等<sup>[21]</sup>和 Zang 等<sup>[22]</sup>通过在 MSN 和 WSN 中引入 N 空位缺陷, 发现 MSN 和 WSN 表现出高效的析氢反应 (hydrogen evolution reaction, HER) 催化活性, 相对于本征 MSN 和 WSN 有了质的提升, 表明含有 N 空位缺陷的 MSN 和 WSN 可作为 HER 催化剂.

近年来, 有着 Janus (即古罗马神话中的“双面神”, 暗指两个相对面上具有不对称性质) 结构的二维材料引起了人们的兴趣. 这种 Janus 结构的材料打破了原本结构所具有的对称性, 带来了新颖独特的性质. 许多 Janus 二维材料也被制备出来, 例如可以在化学沉积生长  $\text{MoS}_2$  或  $\text{WS}_2$  多层过程中注入 Se 来合成  $\text{MoSSe}$  或  $\text{WSSe}$ <sup>[23]</sup>.  $\text{MoSSe}$  结构正好处于  $\text{MoS}_2$  和  $\text{MoSe}_2$  之间, 由于其对称性的打破, 使得  $\text{MoSSe}$  表现出不同于  $\text{MoS}_2$  和  $\text{MoSe}_2$  的性质. 2021 年, Janus  $\text{MoSH}$  (MSH) 通过  $\text{H}_2$  等离子体处理的方式被成功合成<sup>[24]</sup>. 简单来说, MSH 仅仅是将  $\text{MoS}_2$  最外面的一层 S 原子替换为 H 原子, 但两者不同的是,  $\text{MoS}_2$  是一种带隙值约为 1.80 eV 的二维半导体材料, 而 MSH 却是一种无带隙的二维金属性材料. 同时, Janus MSH 被证明在动力学上是稳定的且具有较高的载流子浓度, 意味着 MSH 在金属-半导体接触方面具有巨大的潜力<sup>[24]</sup>. 近来, Liu 等<sup>[25]</sup>发现, Janus 材料由于其对称性打破产生的固有内建电场, 产生了一个不对称势, 进而增强了从 Janus 材料到石墨烯层光生载流子分离和转移的速率, 表明 Janus 异质结材料相较于传统异质结材料在高能量转换效率的光伏电池应用等方面具有更大的潜力. 在金属-半导体接触时, Janus 材料的两个面具有不同的功函数, 不同界面接触行为有着不同的肖特基势垒和电流传输等特性, 其肖特基势垒的可调谐性对未来肖特基器件的制造有着重要的影响.

鉴于 MSH 和 WSN 的很多工作尚未展开, 本文使用第一性原理计算研究了外电场和双轴应变对 MSH/WSN 肖特基结势垒的调控作用, 探究 n 型与 p 型肖特基的接触之间的转换或者肖特基与欧姆接触之间的转换, 为实验提供理论指导. 首先, 构建了两种接触模型: MSH 的 S 面与 WSN 接触的 MHS/WSN 模型和 MSH 的 H 面与 WSN 接触的 MSH/WSN 模型. 然后, 分别研究了肖特基结的两个单层和两种肖特基结模型的电子能带特性, 发现肖特基结的能带仅仅是两个单层能带的简单叠加. 紧接着, 研究了它们的电荷转移特性, 还

计算了它们的束缚能, MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结的束缚能分别是 -1.635 eV, -1.648 eV. 本文选取相对更稳定的 H 面接触的 MSH/WSN 模型来通过外电场和双轴应变进行肖特基势垒调控. 结果表明, 外电场和双轴应变均可有效调控肖特基结势垒高度, 合适的外加电场或双轴应变可实现肖特基的 p 型与 n 型接触之间的转换, 甚至是肖特基结向欧姆接触的转换. 本工作揭示了基于 WSN 的 MSH/WSN 肖特基结在肖特基功能器件制造方面有着巨大的潜力.

## 2 计算方法

本文的所有第一性原理计算使用了基于密度泛函理论下的 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 软件包<sup>[26,27]</sup>. 采用了广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函<sup>[28]</sup>来描述相互作用电子间的交换关联能. 投影缀加平面波 (projector augmented wave, PAW)<sup>[29]</sup>方法被用来描述离子实和价电子之间的相互作用. 经过收敛性测试后, 选择 500 eV 的截断能和  $9 \times 9 \times 1$  的  $K$  点网格. 能量和力的收敛标准分别被设定为  $1 \times 10^{-6}$  eV 和 0.01 eV/Å. 为了得到更精确的结果, 采用 DFT-D3 方法修正层与层之间的范德瓦耳斯力. 为了避免周期性对相邻映像的影响, 增加了 20 Å 的真空层.

## 3 结果与讨论

### 3.1 电子结构特性

图 1(a) 和图 1(c) 分别展示了 MSH 和 WSN 的侧视图和俯视图. 从图 1(a) 可以看出, MSH 与  $\text{MoS}_2$  有着相同的结构, 只是把其中一层 S 原子替换成了 H 原子. 从 WSN 的侧视图和俯视图可看出, WSN 有着独特的 N-Si-N-W-N-Si-N 七原子层特性, W 原子处于由 Si 原子与 N 原子组成的六元环的中心. 优化后的 MSH 和 WSN 的晶格参数分别为 3.01 Å 和 2.91 Å, 计算结果与前人结果相符<sup>[24,30]</sup>. 构成异质结后晶格失配率为 3.32%, 满足晶格失配率小于 5% 的要求. 从图 1(b) MSH 的能带图可以看出, 费米能级与能带交叠, MSH 显示出金属性. 而图 1(d) WSN 的能带图中费米能级位于导带和价带中间, WSN 显示出半导体性. WSN 的价带顶和导带底分别位于布里渊区里不同的点:  $\Gamma$  点和  $K$  点,

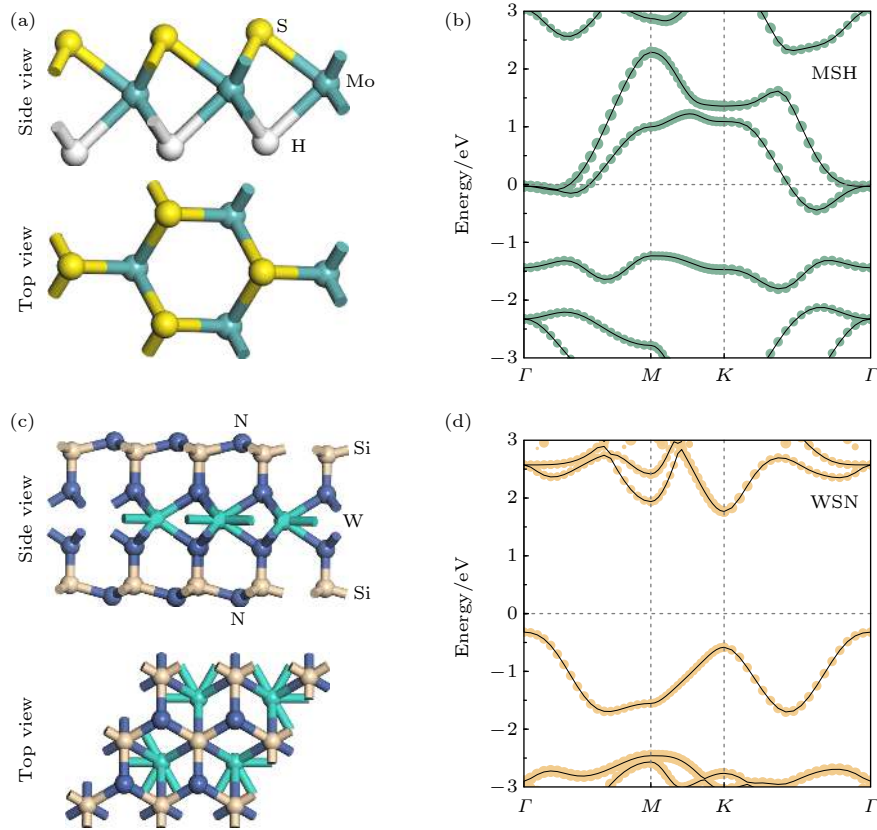


图 1 (a) MSH 与 (c) WSN 的侧视图与俯视图; (b) MSH 与 (d) WSN 的能带结构. 费米能级被设置为 0 点

Fig. 1. Top and side views of (a) MSH and (c) WSN; band structures of (b) MSH and (d) WSN. The Fermi level is set to zero.

因此 WSN 属于间接带隙半导体, 带隙值为 2.09 eV, 其值与前人计算结果 2.076 eV<sup>[19]</sup>, 2.06 eV<sup>[31]</sup> 接近, 也说明了我们的实验模型的可靠性, 数值的差异是由于计算精度的不同与赝势的选取不同而造成.

然后, 构建了由二维金属 MSH 与二维半导体 WSN 组成的肖特基结模型, 由于 MSH 由两个不同的面组成, 分别构建了两种不同的接触模型: S 面与 WSN 更靠近的 MoHS(MHS)/WSN 肖特基结模型和 H 面与 WSN 更靠近的 MSH/WSN 肖特基结模型. MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结的侧视图见图 2(a) 和图 2(c), 其中白色小球代表 H 原子, 黄色小球代表 S 原子. MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结的俯视图见图 2(b) 和图 2(d), H 原子和 S 原子位于 WSN 中 N 原子正上方. 结构优化后, 测得 MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结最优层间距分别为 3.48 Å 与 3.75 Å, 表明 MSH 层与 WSN 层之间存在微弱的范德瓦耳斯相互作用. 为了探究 MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结的稳定性, 分别计算了两种异质结构的束缚能 (binding energy,  $E_b$ ),  $E_b$  的大小由以下公式确定:  $E_b = E_{\text{vdW}} - E_{\text{MSH(MHS)}} - E_{\text{WSN}}$ . 其中  $E_{\text{vdW}}$  代表组

成肖特基结之后的能量,  $E_{\text{MSH}}$  和  $E_{\text{WSN}}$  分别代表着 MSH(MHS) 和 WSN 单层的能量. 经过计算, MHS/WSN 与 MSH/WSN 两种肖特基结的束缚能  $E_b$  的大小分别是 -1.635 eV, -1.648 eV, 均为负值, 说明两种肖特基结都是稳定的. 束缚能  $E_b$  的

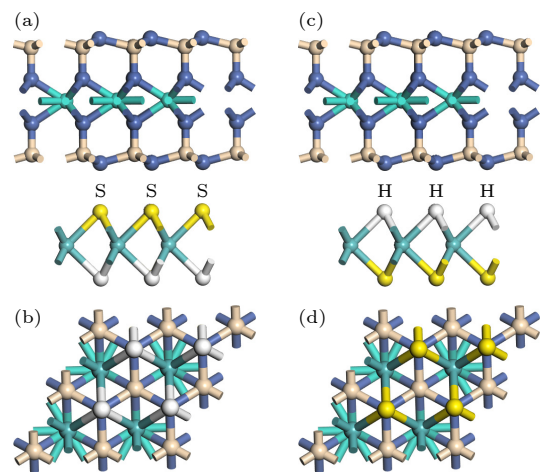


图 2 (a) MHS/WSN 与 (c) MSH/WSN 肖特基结的侧视图; (b) MHS/WSN 与 (d) MSH/WSN 肖特基结的俯视图

Fig. 2. Side views of (a) MHS/WSN and (c) MSH/WSN Schottky-junctions. Top views of (b) MHS/WSN and (d) MSH/WSN Schottky-junctions.



值越小其构成的肖特基结越稳定. MSH/WSN 肖特基结的束缚能小于 MHS/WSN 肖特基结的束缚能, 因此选用更稳定 MSH/WSN 肖特基结来研究外电场和双轴应变对异质结肖特基势垒的影响.

首先, 在图 3(a) 和图 3(d) 绘制了 MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结的投影能带图, 其中绿色和黄色线条分别代表 MSH 和 WSN 对肖特基结的贡献. 两张能带图只有细微的差别, 在能带的走势上几乎一致. 单层 MSH 和 WSN 原本的特性被很好地保留下来, 肖特基结的能带只是两个单层 MSH 和 WSN 的简单叠加, 两个肖特基结中 WSN 依旧保持了间接带隙半导体的特性. 根据 Schottky-Mott 规则, 半导体 n 型和 p 型肖特基势垒高度由以下公式来计算:  $\Phi_{Bn} = E_{CBM} - E_F$ ;  $\Phi_{Bp} = E_F - E_{CBM}$ . 如果  $\Phi_{Bn}$  的值大于  $\Phi_{Bp}$  的值且都大于 0, 说明在界面处形成了 p 型肖特基接触; 如果  $\Phi_{Bn}$  的值小于  $\Phi_{Bp}$  的值且都大于 0, 说明在界面处形成了 n 型肖特基接触; 如果半导体的  $\Phi_{Bn}$  或者  $\Phi_{Bp}$  的值小于 0 或者费米能级与半导体的导带或者价带有交叠, 说明在金属与半导体界面处形成欧姆接触. 计算所得的 MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结

的  $\Phi_{Bn}$  值分别为 1.38 eV 与 1.54 eV,  $\Phi_{Bp}$  值分别为 0.60 eV 与 0.37 eV, 因此, 两种肖特基结在界面处均形成了 p 型肖特基接触.

如图 3(b) 与图 3(e) 所示, 为了探究金属层 MSH 和半导体层 WSN 界面间的电荷转移, 绘制了平面平均差分电荷密度图. 平面差分电荷密度  $\Delta\rho$  由以下公式定义:  $\Delta\rho = \rho_{vdw} - \rho_{MSH(MHS)} - \rho_{WSN}$ . 其中  $\rho_{vdw}$ ,  $\rho_{MSH(MHS)}$  和  $\rho_{WSN}$  分别代表肖特基结、MSH(MHS), WSN 单层沿 Z 平面的平面平均电荷密度. 结果发现, 由于 MSH 本身所特有的 Janus 结构特性, WSN 分别与不同的面接触时电荷转移的程度会不同. 在图 3(b) 与图 3(e) 中, 正值代表了电荷的积累, 负值代表了电荷的耗尽. 不管是对 MHS/WSN 还是 MSH/WSN 肖特基结, 电荷均在 WSN 层耗尽, 在 MSH 层聚集, 不过 MSH/WSN 肖特基结电荷转移的程度要稍微大于 MHS/WSN 肖特基结. 电荷的积累和扩散行为是电荷重新分布的结果, 会形成一个微弱的内建电场, 内建电场的方向由 WSN 层指向 MSH 层. 图 3(c) 与图 3(f) 展示了 MHS/WSN 与 MSH/WSN 肖特基结的有效静电势. 可以观察到二维金属材料 MSH 和二维半

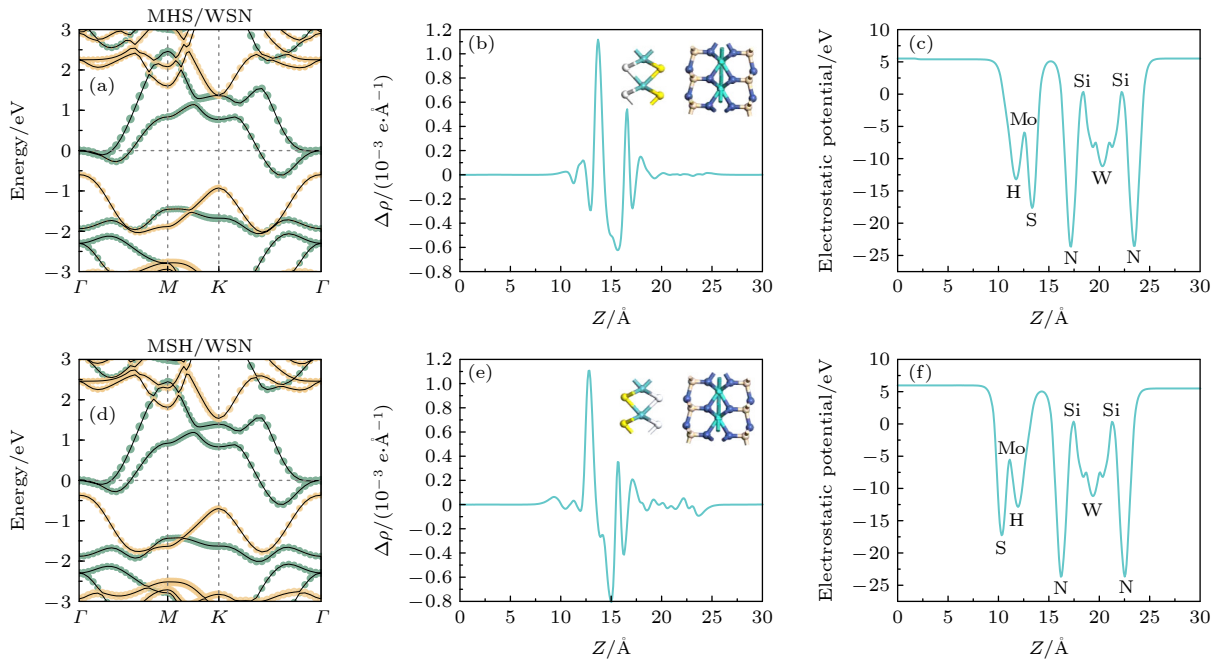


图 3 (a) MHS/WSN 与 (d) MSH/WSN 肖特基结的投影能带结构; (b) MHS/WSN 与 (e) MSH/WSN 肖特基结的两个界面之间沿 Z 平面的平面平均差分电荷密度; (c) MHS/WSN 与 (f) MSH/WSN 肖特基结的有效静电势. 其中绿色和黄色线条分别代表了 MSH 和 WSN 对肖特基结的贡献, 费米能级被设置为 0 点

Fig. 3. Projected band structures of (a) MHS/WSN and (d) MSH/WSN Schottky-junctions. Plane-averaged differential charge densities between two interfaces along Z-plane of (b) MHS/WSN and (e) MSH/WSN Schottky-junctions. The effective electrostatic potential of (c) MHS/WSN and (f) MSH/WSN Schottky-junctions. The green and yellow lines represent the contributions of MSH and WSN, respectively. The Fermi level is set to zero.



导体材料 WSN 之间存在着电势差, 这也印证了由于电荷转移在 MSH 与 WSN 层之间存在着一个微弱的内建电场. 此外, 由于 MSH 是 Janus 材料, 在 S 面和 H 面存在着电势差, 而 WSN 显示出完美的对称性.

### 3.2 电场对肖特基势垒的调控

施加外加电场是一种能够有效地调控肖特基势垒的方法, 这里定义施加外加电场的正方向是从 WSN 层指向 MSH 层, 与内建电场的方向一致. 图 4 为不同外加电场下 MSH/WSN 肖特基结的投影能带结构, 外加电场的范围从  $-0.4 \text{ V/\AA}$  到  $+0.4 \text{ V/\AA}$ . 结果发现, 在负外加电场作用下, WSN 导带底和价带顶的位置都发生上移, 而在正外加电场作用下, WSN 导带底和价带顶的位置都发生下移. 负外加电场作用下, 从  $-0.1$  到  $-0.3 \text{ V/\AA}$ , 导带底仍然位于  $K$  点, 价带顶位于  $\Gamma$  点, 与之前单层时候一致. 而在  $-0.4 \text{ V/\AA}$  外加电场作用下, 其导带底的位置由原来的  $K$  点转移到了  $M$  点. 在正外

加电场作用下, 其导带底和价带顶的位置并未发生变化, 保持了原先单层间接带隙半导体的特性.

图 5(a) 展示了其肖特基势垒随外加电场变化的折线图, 当施加正外加电场大于  $0.2 \text{ V/\AA}$  时,  $\Phi_{\text{Bp}}$  的值逐渐超过了  $\Phi_{\text{Bn}}$  的值, MSH/WSN 肖特基结由原来的 p 型接触变为了 n 型肖特基接触. 当施加负外加电场大于  $-0.2 \text{ V/\AA}$  时,  $\Phi_{\text{Bp}}$  的值从正变为负, 意味着 MSH/WSN 肖特基结变为了欧姆接触. 欧姆接触对于传统的基于金属-半导体接触的场效应晶体管的制造有着很深远的意义, 此项工作可以为基于 WSN 半导体的肖特基功能器件及场效应晶体管提供理论指导. 此外,  $\Phi_{\text{Bn}}$  的值随着正外加电场的不断增大而减小, 随着负外加电场的不断增大而增大,  $\Phi_{\text{Bp}}$  的变化趋势刚好与之相反. 虽然外加电场引起了  $\Phi_{\text{Bp}}$  和  $\Phi_{\text{Bn}}$  的变化, 但  $\Phi_{\text{Bn}}$  与  $\Phi_{\text{Bp}}$  的和几乎没有发生改变. 唯独在施加  $-0.4 \text{ V/\AA}$  时的外加电场作用下  $\Phi_{\text{Bn}}$  与  $\Phi_{\text{Bp}}$  的和有些许的下降 (下降了大约  $0.15 \text{ eV}$ ), 这是由于电场引起了导带底位置发生改变而引起的.

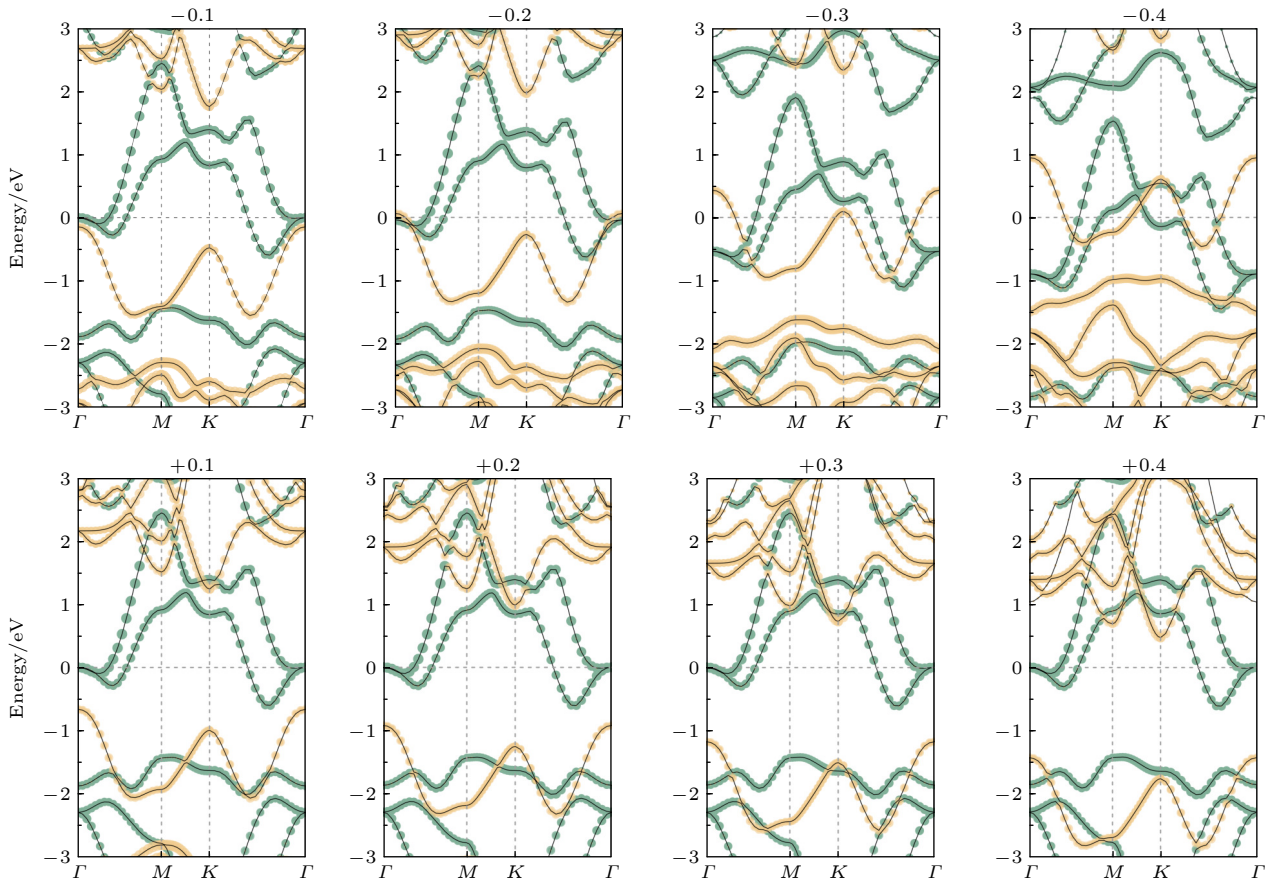


图 4 不同外加电场下 MSH/WSN 肖特基结的投影能带结构 ( $-0.4$  —  $+0.4 \text{ V/\AA}$ ), 费米能级被设置为 0 点

Fig. 4. Projected band structures of MSH/WSN Schottky-junctions under different external electric fields (ranging from  $-0.4$  to  $0.4 \text{ V/\AA}$ ). The Fermi level is set to zero.

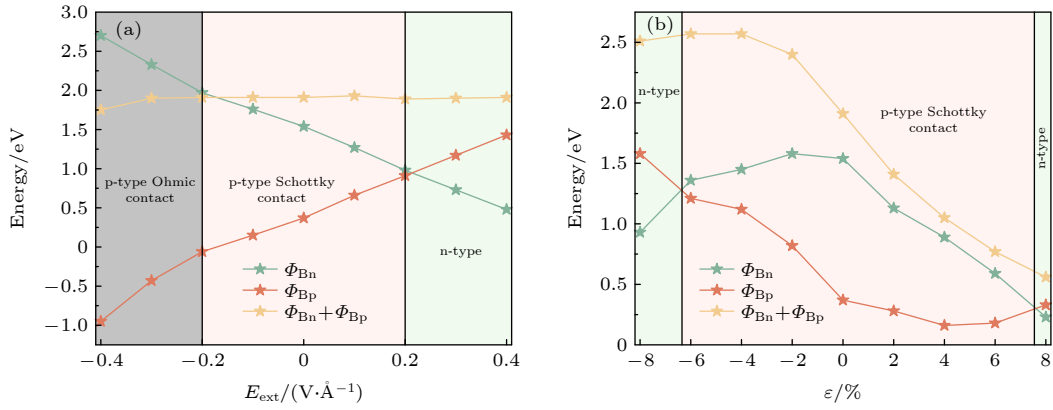

 图 5 MSH/WSN 肖特基结在不同 (a) 外电场 ( $E_{\text{ext}}$ ) 和 (b) 双轴应变 ( $\epsilon$ ) 下的肖特基势垒的变化

Fig. 5. Variation of the Schottky barrier heights under different (a) external electric fields ( $E_{\text{ext}}$ ) and (b) biaxial strain ( $\epsilon$ ) in MSH/WSN Schottky-junction.

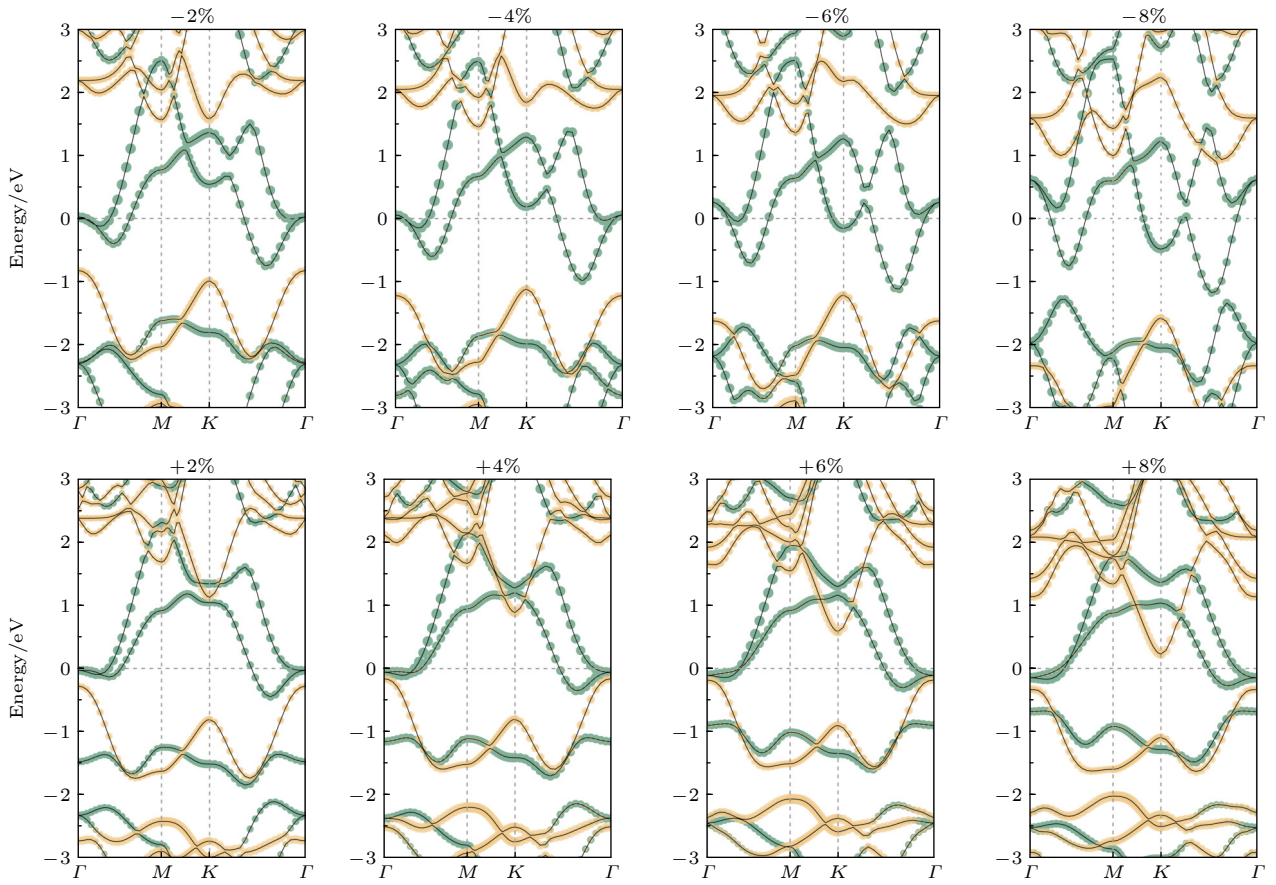

 图 6 不同双轴应变  $\epsilon$  下 MSH/WSN 肖特基结的投影能带结构 (-8%—+8%), 费米能级被设置为 0 点

Fig. 6. Projected band structures of MSH/WSN Schottky-junctions under different biaxial strain  $\epsilon$  (ranging from -8% to 8%). The Fermi level is set to zero.

### 3.3 双轴应变对肖特基势垒的调控

除了外电场, 双轴应变是另一种有效调控肖特基势垒的方法. 双轴应变的应变系数  $\epsilon$  定义为:  $\epsilon = (a - a_0)/a_0 \times 100\%$ , 其中  $a$  和  $a_0$  分别代表应变后和应变前的晶格系数. 如果应变系数  $\epsilon$  的值大

于 1, 代表拉伸应变; 反之, 如果应变系数  $\epsilon$  的值小于 1, 代表压缩应变. 图 6 给出了在不同双轴应变 (-8%—8%) 下 MSH/WSN 肖特基结的投影能带结构. 当施加 -2% 的双轴应变时, 导带底的位置由原来的 K 点转移到了 M 点; 负双轴应变程度继续

加大到-4%时,价带顶的位置由原来的 $\Gamma$ 点转移到了 $K$ 点;而当负双轴应变程度继续加大到-8%时,导带底的位置转移到了不属于布里渊区里 $\Gamma \rightarrow K$ 路径上某一点处.当施加正双轴应变时,导带底的位置向下移动,价带顶的位置先向上移动后向下移动,但导带底和价带顶的位置仍分别位于 $K$ 点与 $\Gamma$ 点.而且,不论是正双轴应变还是负双轴应变,它们都保持了WSN原本间接带隙半导体的特性.

图5(b)展示了MSH/WSN肖特基结势垒随着双轴应变变化的折线图.在正双轴应变下, $\Phi_{Bn}$ 的值随着应变强度的增大而减小, $\Phi_{Bp}$ 的值先减小而后在到达4%的时候增大;在负双轴应变下, $\Phi_{Bn}$ 的值先增大后在达到-4%应变强度后减小,而 $\Phi_{Bp}$ 的值呈现一直增大的趋势.与外加电场不同的是,由于双轴应变极大地改变了异质结的晶格参数,导致其 $\Phi_{Bn}$ 与 $\Phi_{Bp}$ 的和发生较大改变. $\Phi_{Bn}$ 与 $\Phi_{Bp}$ 的和在-4%到+8%应变强度范围内逐渐减小,在-8%到-4%范围内逐渐增大.当应变强度达到一个较大的值( $\pm 8\%$ )的时候,MSH/WSN肖特基结可实现从p型到n型肖特基接触之间的转变.外加电场和双轴应变引起MSH/WSN肖特基结势垒的变化原因可以归结为:异质结的电子结构由重叠的电子轨道控制,而施加的外电场和双轴应变可以极大地影响电子轨道的重叠行为.价电子轨道在导带底和价带顶占据主导地位,外加电场和双轴应变通过影响价电子轨道的重叠行为影响导带底和价带顶价电子的电子态发生改变使得导带和价带发生移动.

图7设计了一个基于二维MSH/WSN肖特基结的可调谐肖特基二极管,其中向下的箭头代表正外加电场的方向,向上的箭头代表负外加电场的方

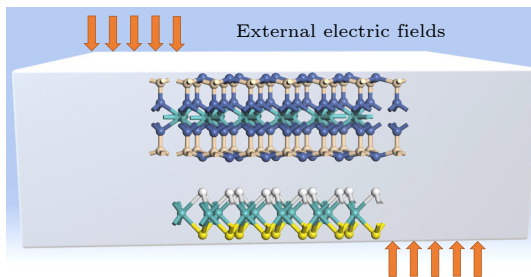


图7 基于MSH/WSN肖特基结的可调谐肖特基二极管的示意图

Fig. 7. Schematic diagram of a tunable Schottky diode based on MSH/WSN Schottky-junctions.

向.由于MSH具有高的载流子浓度,二维金属MSH它可以被用作电极以实现高效的载流子注入.通过改变外部电场的强度和方向,肖特基二极管可以被重新配置,以实现欧姆接触与肖特基接触和p型与n型肖特基接触之间的动态切换.基于MSH/WSN肖特基结的可调谐肖特基二极管为替代传统的肖特基二极管提供了可能性.

## 4 结 论

本文采用第一性原理计算了外加电场和双轴应变对MSH/WSN金属-半导体接触肖特基结势垒的调控作用.由二维金属材料 and 二维半导体材料WSN构成肖特基结后,H面接触模型MSH/WSN比S面接触模型MHS/WSN更稳定.两种肖特基结的能带均很大程度地保留了单层MSH和WSN的能带特性,仅是两个单层材料能带的简单叠加.计算结果表明,外加电场和双轴应变均能有效调控MSH/WSN肖特基结势垒.当正外加电场大于 $0.2 \text{ V/\AA}$ 时,MSH/WSN肖特基结可以实现p型与n型肖特基接触之间的转换;当负外加电场大于 $-0.2 \text{ V/\AA}$ 时,MSH/WSN肖特基结转化为欧姆接触.当双轴应变达到 $\pm 8\%$ 时,可以使MSH/WSN肖特基结实现p型与n型肖特基接触之间的转换.本文为基于MSH/WSN肖特基结的光电子器件提供了理论参考,同时揭示了WSN材料在实际应用中的巨大潜能.

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D E, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [3] Neto A C, Guinea F, Peres N M, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [4] Akinwande D, Brennan C J, Bunch J S, Egberts P, Felts J R, Gao H, Huang R, Kim J S, Li T, Li Y 2017 *Extreme Mech. Lett.* **13** 42
- [5] Mayorov A S, Gorbachev R V, Morozov S V, Britnell L, Jalil R, Ponomarenko L A, Blake P, Novoselov K S, Watanabe K, Taniguchi T 2011 *Nano Lett.* **11** 2396
- [6] Manzeli S, Ovchinnikov D, Pasquier D, Yazyev O V, Kis A 2017 *Nat. Rev. Mater.* **2** 17033
- [7] Choi W, Choudhary N, Han G H, Park J, Akinwande D, Lee Y H 2017 *Mater. Today* **20** 116
- [8] Chhowalla M, Shin H S, Eda G, Li L J, Loh K P, Zhang H 2013 *Nat. Chem.* **5** 263
- [9] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699



- [10] Liu L, Feng Y, Shen Z 2003 *Phys. Rev. B* **68** 104102
- [11] Dean C R, Young A F, Meric I, Lee C, Wang L, Sorgenfrei S, Watanabe K, Taniguchi T, Kim P, Shepard K L 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 722
- [12] Kim G, Jang A R, Jeong H Y, Lee Z, Kang D J, Shin H S 2013 *Nano Lett.* **13** 1834
- [13] Watanabe K, Taniguchi T, Kanda H 2004 *Nat. Mater.* **3** 404
- [14] Shi Y, Hamsen C, Jia X, Kim K K, Reina A, Hofmann M, Hsu A L, Zhang K, Li H, Juang Z Y 2010 *Nano Lett.* **10** 4134
- [15] Bie Y Q, Grosso G, Heuck M, Furchi M M, Cao Y, Zheng J, Bunandar D, Navarro-Moratalla E, Zhou L, Efetov D K 2017 *Nat. Nanotechnol.* **12** 1124
- [16] Xia F, Wang H, Xiao D, Dubey M, Ramasubramanian A 2014 *Nat. Photonics* **8** 899
- [17] Pomerantseva E, Gogotsi Y 2017 *Nat. Energy* **2** 17089
- [18] Zhao W, Ghorannevis Z, Chu L, Toh M, Kloc C, Tan P H, Eda G 2013 *ACS Nano* **7** 791
- [19] Hong Y L, Liu Z, Wang L, Zhou T, Ma W, Xu C, Feng S, Chen L, Chen M L, Sun D M 2020 *Science* **369** 670
- [20] Wu Q, Cao L, Ang Y S, Ang L K 2021 *Appl. Phys. Lett.* **118** 113102
- [21] Qian W, Chen Z, Zhang J, Yin L 2022 *J. Mater. Sci. Technol.* **99** 215
- [22] Zang Y, Wu Q, Du W, Dai Y, Huang B, Ma Y 2021 *Phys. Rev. Mater.* **5** 045801
- [23] Lin Y C, Liu C, Yu Y, Zarkadoula E, Yoon M, Poretzky A A, Liang L, Kong X, Gu Y, Strasser A 2020 *ACS Nano* **14** 3896
- [24] Wan X, Chen E, Yao J, Gao M, Miao X, Wang S, Gu Y, Xiao S, Zhan R, Chen K 2021 *ACS Nano* **15** 20319
- [25] Liu X, Gao P, Hu W, Yang J 2020 *J. Phys. Chem. Lett.* **11** 4070
- [26] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [27] Kresse G, Hafner J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 14251
- [28] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [29] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [30] Li Q, Zhou W, Wan X, Zhou J 2021 *Physica E* **131** 114753
- [31] Wang Q, Cao L, Liang S J, Wu W, Wang G, Lee C H, Ong W L, Yang H Y, Ang L K, Yang S A 2021 *npj 2D Mater. Appl.* **5** 1

# Modulation of MoSH/WSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> Schottky-junction barrier by external electric field and biaxial strain<sup>\*</sup>

Liang Qian    Qian Guo-Lin    Luo Xiang-Yan    Liang Yong-Chao    Xie Quan<sup>†</sup>

(*Institute of New Optoelectronic Materials and Technology, College of Big Data and Information Engineering,  
Guizhou University, Guiyang 550025, China*)

( Received 5 May 2022; revised manuscript received 6 July 2022 )

## Abstract

In view of the newly synthesized two-dimensional (2D) semiconductor material WSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (WSN) and the 2D metal material MoSH (MSH), a metal-semiconductor MSH/WSN Schottky-junction is constructed in this work. In practical applications of metal-semiconductor contact, the presence of the Schottky barrier degrades the device performance severely. Therefore, it is crucial to obtain a smaller Schottky barrier height or even an Ohmic contact. Here, the first-principles calculations are used to investigate the variation of the Schottky barrier in MSH/WSN Schottky-junction under an external electric field and a biaxial strain. The results show that both external electric field and biaxial strain can effectively modulate the Schottky barrier of the MSH/WSN Schottky-junction. The dynamic switching between the p-type Schottky contact and the n-type Schottky contact can be achieved under the action of positive external electric field in the MSH/WSN Schottky-junction. Under the action of negative external electric field, the MSH/WSN Schottky-junction can be modulated to realize the transition from the Schottky contact to the Ohmic contact. The large biaxial strain can also induce the MSH/WSN Schottky-junction to realize the transition between the p-type Schottky contact and the n-type Schottky contact. This work may provide theoretical guidance for the WSN semiconductor based Schottky functional devices and field-effect transistors.

**Keywords:** WSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>, MoSH, metal-semiconductor contact, Schottky contact

**PACS:** 73.30.+y, 79.60.Jv

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220882

<sup>\*</sup> Project supported by the Industry and Education Combination Innovation Platform of Intelligent Manufacturing and Graduate Joint Training Base at Guizhou University, China (Grant No. 2020-520000-83-01-324061), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61264004), and the High-level Creative Talent Training Program in Guizhou Province of China (Grant No. [2015]4015).

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



## 外电场和双轴应变对MoSH/WSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>肖特基结势垒的调控

梁前 钱国林 罗祥燕 梁永超 谢泉

## Modulation of MoSH/WSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> Schottky-junction barrier by external electric field and biaxial strain

Liang Qian Qian Guo-Lin Luo Xiang-Yan Liang Yong-Chao Xie Quan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 217301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220882

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220882>

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

二硫化钨/石墨烯异质结的界面相互作用及其肖特基调控的理论研究

Interfacial interaction and Schottky contact of two-dimensional WS<sub>2</sub>/graphene heterostructure

物理学报. 2019, 68(9): 097101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190020>

Pt/Au/n-InGaN肖特基接触的电流输运机理

Current transport mechanism of Schottky contact of Pt/Au/n-InGaN

物理学报. 2018, 67(21): 217802 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181191>

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>

SiC电力电子器件金属接触研究现状与进展

Research status and progress of metal contacts of SiC power devices

物理学报. 2021, 70(20): 207302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210675>

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>

2.45 GHz微波无线能量传输用Ge基双通道整流单端肖特基势垒场效应晶体管

A Ge-based dual channel rectified single ended Schottky barrier field effect transistor for 2.45 GHz microwave wireless energy transmission

物理学报. 2022, 71(20): 208401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220855>