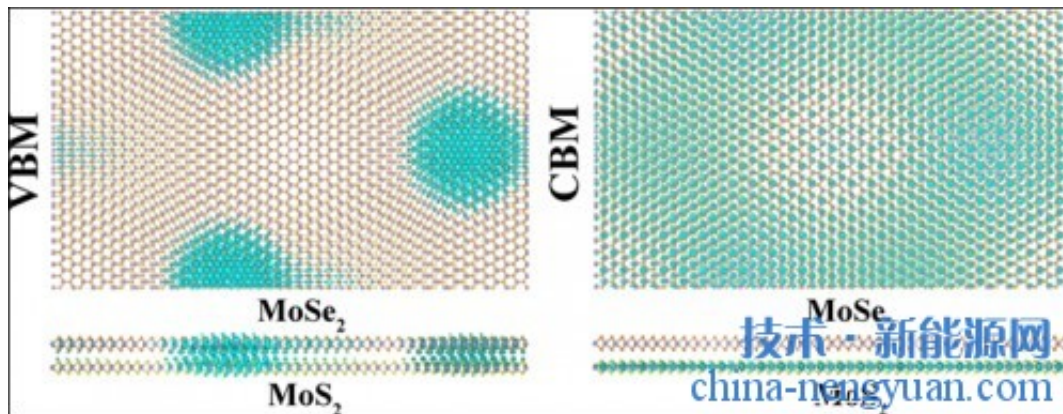


半导体所等在二维半导体异质结研究中取得新进展



近日，中科院半导体所超晶格国家重点实验室博士生康俊，在李京波研究员、李树深院士和夏建白院士的研究团队中，与美国劳伦斯伯克利国家实验室（LBNL）汪林望博士研究组合作，在二维半导体异质结的基础研究中取得新进展。相关成果发表在9月30日美国化学学会主办的《纳米快报》（Nano Letters）上。

半导体异质结是由不同半导体材料接触形成的结构。由于构成异质结的两种半导体材料拥有不同的禁带宽度、电子亲和能、介电常数、吸收系数等物理参数，异质结将表现出许多不同于单一半导体材料的性质。

在传统半导体领域，以半导体异质结为核心制作的电子器件，如光电探测器、发光二极管、太阳能电池、激光器等，往往拥有比单一半导体材料制作的同类器件更加优越的性能。

近年来，以二维二硫化钼（MoS₂）、二硒化钼（MoSe₂）为代表的新型二维半导体材料迅速成为材料科学领域的研究前沿。这类半导体的厚度仅为数个原子，并且有望成为新一代电子器件的二维平台。将不同的二维半导体层堆积起来便形成了二维半导体异质结，而这类异质结中的新奇物理现象也成为了目前国际纳米科学研究的一个焦点。

在这种背景下，半导体所与LBNL的研究小组应用第一性原理计算，研究了二维MoS₂/MoSe₂异质结的结构和电子性质。二维MoS₂和MoSe₂单层存在4.4%的晶格失配。通过对应变能和结合能的计算发现，它们之间范德瓦尔斯结合作用的强度不足以消除这一失配形成晶格匹配的异质结，而是形成一种被称为莫氏图样（Moiré Pattern）的结构。

在莫氏图样中，不同区域的MoS₂和MoSe₂的堆积方式也不同，进而导致不同区域的层间耦合作用及静电势不同，这将会对异质结的电子结构产生显著影响。为了进一步探索莫氏图样对异质结电子结构的调控作用，课题组利用一种新型的线性标度算法对一个包含6630个原子的MoS₂/MoSe₂莫氏图样超胞的带边波函数进行了计算。

结果显示，价带顶的空穴波函数被限制在层间耦合较强的区域，而导带底的电子波函数则比较扩展，仅表现出弱局域性。研究结果预示莫氏图样的形成以及由此导致的波函数的局域化将是二维半导体异质结的普遍性质。这些新的发现将为二维半导体异质结器件的制备提供理论指导。

该工作得到了国家杰出青年基金和科技部“973”项目的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/53539.html>