

# 双轴拉伸应变对二硫化钼单层电子迁移率的影响

郭菲 赵泽晨 (苏州经贸职业技术学院, 江苏 苏州 215000)

**摘要:** 二硫化钼单层在电子、光电器件以及化学催化剂等方面具有广泛的应用前景, 为了扩大其在相关领域的应用, 了解二硫化钼单层的电子迁移率与应变的依赖关系显得非常重要。在本工作中, 基于密度泛函理论、密度泛函微扰理论以及波尔兹曼输运方程, 我们系统地研究了室温下双轴拉伸应变对受电子-声子散射影响的二硫化钼单层电子迁移率的影响。计算结果表明, 二硫化钼单层的电子迁移率随着应变强度的增加而增大。在实验中, 可以通过对材料进行简单地机械拉伸, 可以实现双轴拉伸应变情况, 本工作对实验结果具有先行指导意义。

**关键词:** 双轴拉伸应变; 二硫化钼; 单层电子迁移率; 影响

## 1 引言

自发现石墨烯以来, 人们相继地成功制备出了一系列的二维材料, 众所周知, 当二维材料的厚度减小到纳米或纳米级以下时, 材料的电荷载流子被限制在原子层内, 由于这种量子限域效应, 二维材料表现出了新奇的机械、电子、输运和化学特性, 这些特性与其三维材料大不相同, 因此其相关研究引起了人们的广泛关注。与石墨烯相比, 二硫化钼具有天然的直接带隙, 在发光二极管、太阳能电池以及场效应管等电子设备方面具有巨大的应用前景。为了使器件得到更广泛的应用, 调节材料的能带带隙显得十分重要, 已有理论工作指出, 随着双轴拉伸应变强度的增加, 二硫化钼单层电子能带的带隙减小。

影响材料性能的另一个关键因素为载流子迁移率, 双轴拉伸应变除了影响材料的能隙大小, 还能有效地调节材料的载流子迁移率, 进而影响其他相关性能。在室温情况下, 材料的电输运性质主要受电子-声子散射影响, 在低温情况下, 则主要受电子-杂质散射。如果要计算受电子-声子散射主导的迁移率, 计算量十分庞大, 故近年来, 多采用各种近似方法, 例如形变势模型、压电势模型等等, 而采用这种经验模型计算并不适合全部材料, 是否对实验结果具有指导意义是有待商榷的。在本次工作中, 我们基于密度泛函理论、密度泛函微扰理论以及波尔兹曼输运方程的迭代求解方法计算了二硫化钼单层的电子能带、声子频率以及电子迁移率。在施加双轴拉伸应变前后, 二硫化钼单层都是直接带隙半导体, 可以广泛的应用于多种电子器件, 并通过应变强度调节材料的输运性能。

本工作其余部分的安排如下: 首先, 在第二部分简要阐述计算二硫化钼单层电子迁移率的理论方法; 然后, 在第三部分对数据结果进行展示以及讨论; 最后, 对主要结论进行总结。

## 2 研究方法

本次研究的理论工作以第一性原理计算为基础, 利用 Quantum Espresso 软件包, 得到室温下 2H 型二硫化钼单层的电子能带和声子谱。利用 Wannier 插值方法得到细密网格下的电子-声子相互作用矩阵元, 解决计算

中无法承担的计算量的问题。

$$\tilde{g}(\mathbf{R}_p, \mathbf{R}_e) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [U_{\nu}^{ph}]^{-1}(\mathbf{q}) U^T(\mathbf{k} + \mathbf{q}) g_{mn}^{\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) U^*(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_e} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_p}$$

其中,  $N$  为原胞数。利用该公式可即其逆变换可将稀疏网格下的电子-声子相互作用矩阵元, 转换为细密网格下的电子-声子相互作用矩阵元。

求解二硫化钼单层电子迁移率的关键物理量为电导率, 载流子迁移率和电导率的关系为:

$$\mu = \frac{\sigma}{n_c e}$$

其中  $e$  是电荷量,  $n_c$  是载流子浓度,

$$n_c = n_e + n_h = \frac{2}{S} \left( \sum_{\mathbf{nk}} f_{\mathbf{nk}}^0 + \sum_{\mathbf{n}'\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{n}'\mathbf{k}}^0) \right)$$

其中  $S$  为单层二硫化钼的面积,  $f_{\mathbf{nk}}^0$  为平衡态下费米分布。

本次工作利用对波尔兹曼输运方程进行迭代求解得到二硫化钼单层的电导率,

$$\sigma = \frac{2e^2}{k_B T} \sum_{\mathbf{nk}} f_{\mathbf{nk}}^0 (1 - f_{\mathbf{nk}}^0) (v_{\mathbf{nk}}^x)^2 F_{\mathbf{nk}}$$

其中  $F_{\mathbf{nk}}$  是平均自由程,  $T$  为温度。求解平均自由程的时候需要用到我们上述所说的细密网格下的电子-声子相互作用矩阵元, 从而得到收敛的结果。

在计算中, 我们的电子能量、声子频率以及电子-声子相互作用矩阵元, 皆在第一原理计算层面得到, 没有采用任何经验参数。

## 3 结果和讨论

二硫化钼单层的晶格结构如图 1 所示, 由一个 Mo 原子和两个 S 原子组成, 未施加应变情况下的晶格常数为  $a=3.188\text{\AA}$ , 层厚  $3.148\text{\AA}$ , 与实验值较为吻合。在垂直于层面的方向设置真空层设为  $17\text{\AA}$ , 以防止周期性结构之间产生范德瓦尔斯相互作用, 平面波截断能为  $500\text{eV}$ 。计算时利用模守恒赝势模拟离子势场, 用 PBE 广义梯度近似描述交换关联作用,  $\mathbf{k}$  和  $\mathbf{q}$  网格均采用  $10 \times 10 \times 1$  的倒格矢空间, 进行能量收敛为  $10^{-6}\text{eV}$ , 力收敛为  $10^{-4}\text{eV/\AA}$  的变胞弛豫计算, 在对结构优化的过程中, 原胞和原子位置皆进行弛豫, 最后找到拉伸后二硫化钼单层的稳定结构。

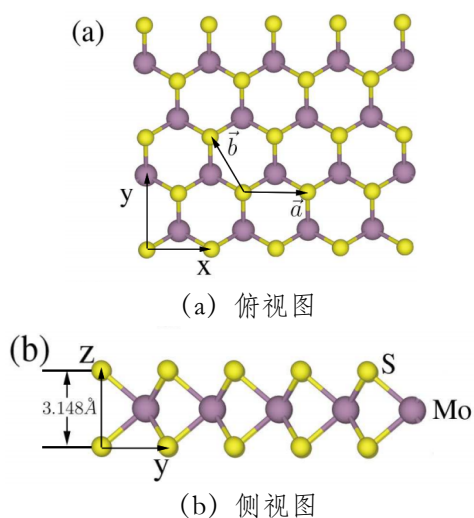


图 1 2H 型二硫化钼单层的晶格结构

从第一性原理计算层面得到二硫化钼单层的电子迁移率，需要电子能量、声子频率以及电子-声子相互作用矩阵元三个物理量。我们首先利用 Quantum Espresso 软件包，计算得到二硫化钼单层的电子能带结构、声子谱以及电子-声子相互作用矩阵元。如图 2 所示，2H 型二硫化钼单层随应变强度的增加，电子能带带隙减小，而并未发生从直接带隙到间接带隙的转变。通过密度泛函理论得到未施加应变情况下的电子能带带隙为 1.702 eV，与之前的理论研究结果接近。然后，在此基础上，我们进行 Wannier 插值计算，得到细密网格下的二硫化钼单层的电子能量、声子频率以及电子-声子相互作用矩阵元，用于计算得到其电导率，进而进一步得到电子迁移率。

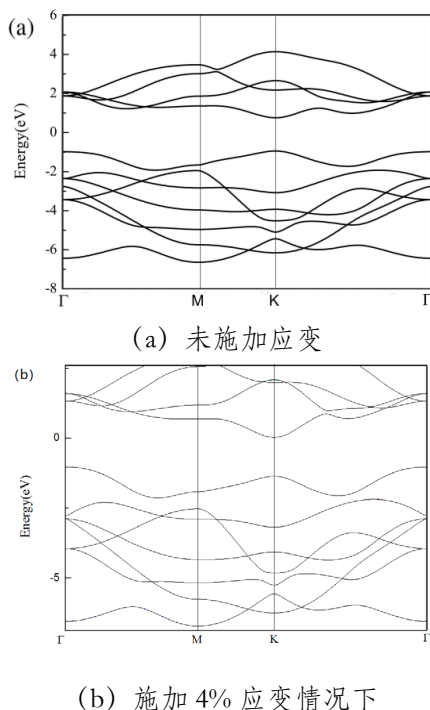


图 2 二硫化钼单层的电子能带结构

为了得到可靠的电子迁移率，我们利用 EPW 对二硫化钼单层的电导率进行了收敛测试。首先，我们将温度设为 300K，电子密度为  $6.99 \times 10^{11} \text{ (m}^{-2}\text{)}$ ，此时计算

出的化学势距导带底约为 0.3 eV，高斯展宽设为 0.01 eV，接下来对 k 和 q 网格进行了收敛测试，当 k 和 q 网格为  $600 \times 600 \times 1$  时，相对误差小于 0.2%，于是接下来本工作中相关计算皆采用该网格。计算得到，未施加应变时的电子迁移率为  $96.8 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ ，施加 1% 应变后的电子迁移率为  $110.2 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ ，4% 对应的电子迁移率为  $135.9 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ 。意味着，随应变强度的增加，电子迁移率增大。与电子迁移率有关的是速度项和电子-声子散射率，由二者共同作用导致了室温下二硫化钼单层的电子迁移率随应变的增加而增大。同时我们的计算表明，双轴拉伸应变可有效地调节二硫化钼单层的电子迁移率。

速度项仅有二硫化钼单层电子能带结构有关，而电子-声子相互作用矩阵元不仅与电子能量有关，还与声子频率以及电子-声子相互作用矩阵元有关，其背后的物理意义与对电子迁移率与应变的依赖关系值得进一步的研究。

#### 4 结论

本文基于密度泛函理论、密度泛函微扰理论以及波尔兹曼输运方程研究了室温下受电子-声子散射影响的二硫化钼单层的电子迁移率。我们的计算结果基于第一性原理计算，没有采用任何经验参数和模型。我们的主要发现如下，施加双轴拉伸应变后，二硫化钼单层仍为直接带隙半导体，并没有发生结构上的突变。双轴拉伸应变可以有效地调节室温下二硫化钼单层的电子迁移率，随应变强度的增加，电子迁移率增大。是由于，施加双轴拉伸应变，带隙减小，速度项改变以及散射率与应变的依赖关系，共同导致了施加双轴拉伸应变后电子迁移率的增大。

#### 参考文献：

[1] Liang Dong, Raju R. Namburu, Terrance P. O'Regan, Madan Dubey, Avinash M. Dongare, Theoretical study on strain-induced variations in electronic properties of monolayer MoS<sub>2</sub>[J]. Journal of Materials Science, 2014(49).  
 [2] Riccardo Frisenda, Matthias Drüppel, Robert Schmidt, Steffen Michaelis de Vasconcellos, David Perez de Lara, Rudolf Bratschitsch, Michael Rohlfing and Andres Castellanos-Gomez, Biaxial strain tuning of the optical properties of single-layer transition metal dichalcogenides[J]. 2D Materials and Applications 2017, 1(10).

#### 作者简介：

郭菲 (1993-)，女，苏州经贸职业技术学院讲师，研究方向：低维材料的电子输运性质和物联网应用技术。  
 赵泽晨 (2000-)，男，苏州经贸职业技术学院学生。  
 苏州经贸职业技术学院院级课题一般项目 (自科类)，项目号：YJ-ZK2014；江苏省大学生创新创业训练计划项目《基于无线 mesh 组网及机器学习的智能环境监控系统》，项目号：61202127。