

等离子激元诱导的宽光谱二硫化钼异质结器件

黄明

湖南大学，湖南长沙，410082；

摘要：随着光电技术的持续发展，光电探测器在成像技术、光谱分析以及通信等多个领域扮演着关键角色。然而，采用过渡金属二硫化物（TMD）材料的光电器件，因载流子迁移率较低及光与物质相互作用较弱等固有缺陷，面临着在新型探测器应用中展现优异性能的难题。本论文中，我们报告了利用化学气相沉积（CVD）技术成功合成单层 MoS₂，并通过微纳加工技术在 MoS₂ 表面构造等离子体纳米结构的过程。借助 COMSOL 软件的模拟分析，我们发现等离子体效应能显著提升 MoS₂ 的光吸收能力，使其光谱吸收范围扩展至红外区域。最终，我们将此材料制成了电学器件，并在可见光条件下测得该器件的光响应度高达 1000 A/W。

关键词：光电探测器；二硫化钼；等离子激元；COMSOL

DOI:10.69979/3041-0673.25.02.085

研究背景

光电探测技术在现代科技领域，诸如成像技术、通信传输、遥感监测以及生物医学研究中扮演着至关重要的角色。在众多新兴材料中，尤其是二硫化钼（MoS₂），作为低维材料的杰出代表，但其单层结构却面临着光吸收效率低和载流子迁移率受限的双重挑战。这直接导致了沟道内光生载流子数量不足以及电荷收集效率低下的问题，这意味着，在面对更广泛光谱范围的应用需求时，单层 MoS₂ 的性能可能无法满足预期。

目前，为解决这些问题，已探索出几种策略，包括表面化学改性、纳米光子结构的集成设计以及与其他材料的混合应用。表面等离子体（SP）是指金属纳米结构中的电子在电磁波共振激发下产生的集体振荡现象。这种等离子体共振模式对纳米结构的形状、两个纳米结构之间的间隙以及周围的介电环境高度敏感，因此能够为高性能光电探测器和发光器件提供显著的局部电场增强效应以及热电子掺杂机制。据目前的研究报道，基于等离子体纳米结构的光电探测器已经得到了广泛的研究，这些探测器展现出了增强的光响应性、更高的探测率以及可调的波长响应特性。然而，尽管这些成果显著，但关于将等离子体纳米结构用于耦合单层 MoS₂ 以构建光电子器件的报道却相对较少。特别是，等离子体增强 MoS₂ 光吸收的具体机制以及如何通过等离子体效应降低肖特基势垒，仍然是当前研究中的热点和难点问题，有待进一步深入探索和揭示。为了推动这一领域的发展，未来的研究可以聚焦于设计更优化的等离子体纳米结

构，以实现与单层 MoS₂ 的高效耦合，并深入探究等离子体效应对 MoS₂ 光电性能的具体影响机制。同时，通过调控等离子体纳米结构的参数，如形状、尺寸和分布等，可以进一步调控和优化 MoS₂ 基光电子器件的性能，为高性能光电探测器和发光器件的研制提供新的思路和方法。

在本论文中，我们成功利用化学气相沉积法制备了二硫化钼（MoS₂）单层材料。接着，我们详细说明了如何运用 COMSOL 仿真软件对该材料进行系统性的模拟与分析。在此基础上，我们进一步制备了金纳米结构/MoS₂ 异质结器件，并通过电学性能测试，该器件展现出了高达 1000 A/W 的卓越光响应度。

1 单层二硫化钼的制备

单层二硫化钼是通过化学气相沉积方法制备的，在 4 英寸的水平石英管双温区炉内，于常压环境下成功培育出了单层二硫化钼（MoS₂）薄膜。在此过程中，硫（S）粉末被精心放置于加热区（即上游区域）的石英舟内，且与经过预氧化的钼粉保持约 30 厘米的距离。同时，表面覆盖有 SiO₂ 层的 Si 基底巧妙地置于氧化钼源的上方，构建出一个相对封闭的生长环境。在加热阶段，我们精心设计了一套升温程序：加热区经过 30 分钟的逐步升温，最终稳定在 800℃。生长结束后，炉子遵循自然冷却过程，缓缓降至室温，以确保薄膜结构的稳定性。尤为值得一提的是，这项改进后的 CVD 工艺不仅在生长条件上实现了优化，更通过精确调控温度曲线与时间节点，有力保障了单层 MoS₂ 的高品质生长。此外，一个

独特的创新点在于，我们将 NaCl 晶粒巧妙地掺杂进 MoO₃ 粉末中。这一举措有效降低了反应所需的熔点，从而微妙地调控了生长过程中的化学反应动力学，进一步提升了单层 MoS₂ 的生长质量及其均匀性。这一生长策略不仅为未来 MoS₂ 基光电器件的制备奠定了坚实的技术基础，更有望为相关领域的技术革新与产业发展注入新的活力，推动其迈向更加广阔的未来。

借助上述精心设计的化学气相沉积（CVD）技术，我们成功地合成了单层二硫化钼（MoS₂）。在图 1 所呈现的光学图像中，通过鲜明的对比度，我们可以直观地观察到单层 MoS₂ 材料所展现出的卓越均匀性与结晶性。这幅图像不仅验证了我们的制备方法的有效性，还进一步彰显了单层 MoS₂ 在微观尺度上的高质量特性。图像中的比例尺设定为 50 微米，这为我们提供了对单层 MoS₂ 薄膜尺寸与形态的直观认识。值得一提的是，图 1 中的光学图像不仅展示了单层 MoS₂ 的宏观分布状态，还通过细腻的纹理与均匀的色泽，揭示了其在微观结构上的高度有序性。这种高度的均匀性与结晶性对于 MoS₂ 基光电器件的性能至关重要，它们能够确保器件在光电转换、载流子传输等方面表现出优异的稳定性与可靠性。此外，我们的制备方法不仅具有高度的可重复性，还能够在保持单层 MoS₂ 高质量的同时，实现大面积、高效率的生长。



图 1. 光学显微镜下的单层二硫化钼

2 等离子体物理场模拟

在光电器件的创新设计中，MoS₂（二硫化钼）与光的相互作用增强机制扮演着核心角色。然而，单层 MoS₂ 器件的本征特性，尤其是其相对较低的迁移率和较弱的光物质相互作用，成为了制约这类器件在新兴技术领域应用的一大瓶颈。为了克服这一挑战，科研人员提出了 0D-2D 混合维度异质结构的概念，旨在通过引入零维（0D）材料来增强二维（2D）MoS₂ 的性能。这种混合

维度的设计策略，其精髓在于通过减小材料的尺寸来增加比表面积，进而提升 MoS₂ 对光的捕获与吸收能力。在众多潜在的 0D 材料中，金属纳米结构凭借其卓越的稳定性、灵活的结构设计性、与二维材料的良好兼容性、显著的光吸收效率以及独特的等离子体效应，逐渐崭露头角，成为提升 MoS₂ 光电器件性能的理想选择。

为了进一步探索金属纳米结构与 MoS₂ 之间的相互作用机制，特别是等离子体共振效应对光电子过程的影响，科研人员构建了金超表面/MoS₂ 的简化模型框架，用于电磁场模拟分析。其中，精心设计的金纳米结构巧妙地垂直于 MoS₂ 层上方排列，形成了一种新颖的光学耦合体系。在模拟过程中，科研人员利用平面波源作为激发光源，并配置了平面监测器（分别标记为 R 和 T），以精确捕捉并记录超结构与 MoS₂ 在光照条件下的相互作用动态。这一设置不仅有助于深入理解等离子体共振效应如何调制 MoS₂ 的光学性质，还为优化结构设计、提升器件性能提供了宝贵的理论依据与实验指导。

图 2 直观地呈现了 520 nm 共振激发条件下，通过模拟获得的电磁场分布图。图像清晰地揭示了电磁场能量主要集中于金纳米结构与 MoS₂ 的交界区域，形成了所谓的等离子体“热点”。在这些“热点”附近，表面产生了大量的热电子，这些热电子随后被高效地注入到 MoS₂ 层中，从而在光激发下显著增强了材料的吸收能力。这一光吸收增强的现象，其根源在于等离子体效应的独特作用。具体而言，金纳米结构能够激发并局域化表面等离子体，使得在纳米尺度的界面上能够捕获到更多的光子。此外，金纳米结构表面丰富的粗糙特征进一步扩展了光在材料内部传播的路径，从而增强了光吸收的效率。

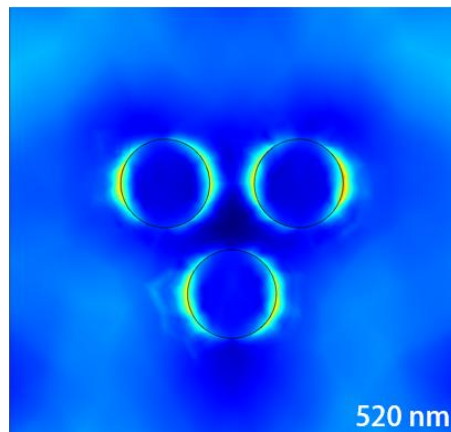


图 2. 520 nm 波长下的金纳米结构/MoS₂ 异质结电磁场模拟图

3 电学测试

为了更深入地评估金纳米结构/MoS₂ 光探测器的性能,我们计算了关键的性能指标:光响应度($R=I_{ph}/P_{eff}$)其中, I_{ph} 表示光电流强度与暗态电流强度的差值, P_{eff} 为有效入射激光功率($P_{eff}=P_{in}\times S_{device}/S_{laser spot}$), S_{device} 代表器件的有效探测面积, I_{dark} 为暗电流, e 为单位电荷。在 520 nm 光刺激下,我们获得了高达 1000A/W 的光响应度,这项指标超过了大多数 MoS₂ 器件。

4 结论

综上所述,我们已成功采用化学气相沉积(CVD)技术制备出单层二硫化钼(MoS₂),并通过精细的微纳加工手段,在其表层巧妙地构筑了等离子体纳米结构。光学显微镜下的清晰图像为这一异质结构的成功合成提供了清晰的证据。进一步的物理模拟分析有力地证明,相较于纯 MoS₂ 器件,金属纳米结构的巧妙融入显著提升了 MoS₂ 超表面光探测器的载流子迁移率,并使其光电器性能得到了大幅度增强——特别是在 520 nm 波长下,光响应度惊人地达到了 1000 A/W。这一创新性的异质结构与器件设计理念,有望为探索和开发下一代高性能光电器件开辟出一条崭新的道路。

参考文献

- [1] Paul T, Ahmed T, Kanhaiya Tiwari K, et al. A high-performance MoS₂ synaptic device with floating gate engineering for neuromorphic computing[J]. 2D Materials, 2019, 6(4): 045008.
- [2] Abnavi A, Ahmadi R, Hasani A, et al. Free-Standing Multilayer Molybdenum Disulfide Memristor for Brain-Inspired Neuromorphic Applications[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2021, 13(38): 45843-45853.
- [3] Kim S G, Kim S H, Park J, et al. Infrared Detectable MoS₂ Phototransistor and Its Application to Artificial Multilevel Optic-Neural Synapse[J]. ACS Nano, 2019, 13(9): 10294-10300.
- [4] Park M, Kang G, Ko H. Plasmonic-tape-attach-

hed multilayered MoS₂ film for near-infrared photodetection[J]. Scientific Reports, 2020, 10(1): 11340.

- [5] Wang K, Dai S, Zhao Y, et al. Light-Stimulated Synaptic Transistors Fabricated by a Facile Solution Process Based on Inorganic Perovskite Quantum Dots and Organic Semiconductors[J]. Small, 2019, 15(11): 1900010.
- [6] Xu L, Xiong H, Fu Z, et al. High Conductance Margin for Efficient Neuromorphic Computing Enabled by Stacking Nonvolatile van der Waals Transistors[J]. Physical Review Applied, 2021, 16(4): 044049.
- [7] Vatansever D, Smallwood J, Jefferies E. Varying demands for cognitive control reveals shared neural processes supporting semantic and episodic memory retrieval[J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 2134.
- [8] Liang S-J, Li Y, Cheng B, et al. Emerging Low-Dimensional Heterostructure Devices for Neuromorphic Computing[J]. Small Structures, 2022, 3(10): 2200064.
- [9] Liu P, Luo H, Yin X, et al. A memristor based on two-dimensional MoSe₂/MoS₂ heterojunction for synaptic device application[J]. Applied Physics Letters, 2022, 121(23): 233501.
- [10] Wang K, Ren S, Jia Y, et al. An Ultrasensitive Biomimetic Optic Afferent Nervous System with Circadian Learnability[J]. Advanced Science, 2024, 11(21): 2309489.

作者简介:黄明(1996—),男,汉族,河南省信阳市人,在读博士,单位:湖南大学材料科学与工程学院材料科学与工程专业,研究方向:电子信息与能源材料。

基金项目:湖南省研究生科研创新项目资助《晶圆级硫化钼制备及视觉融合感知器件》;立项编号:CX20240406。