用于横向异质结构二硫化钼场效应晶体管的化学气相沉积石墨烯接触

Daniel S. Schneider[1,2], Leonardo Lucchesi[3], Eros Reato[1,2], Zhenyu Wang[4], Agata Piacentini[1,2], Jens Bolten[1], Damiano Marian[3], Enrique G. Marin[5], Aleksandra Radenovic[4], Zhenxing Wang[4], Gianluca Fiori[3], Andras Kis[4], Giuseppe Iannaccone[3], Daniel Neumaier[1,6] 和 Max C. Lemme[1,2,*]

[1]亚琛先进微电子中心（AMICA），AMO GmbH，52074 亚琛，德国。[2]亚琛工业大学，52074 亚琛，德国。[3]比萨大学，56122 比萨，意大利。[4]洛桑联邦理工学院（EPFL），CH-1015，洛桑，瑞士。[5]格拉纳达大学，18070 格拉纳达，西班牙。[6]伍珀塔尔大学，42285 伍珀塔尔，德国*电子邮箱：lemme@amo.de / 电话：(+49) 241 8867 201

关键词：二硫化钼、场效应晶体管、单层石墨烯、接触、横向异质结构、接触电阻、传输线法

摘要

目前正针对二维材料，尤其是二硫化钼，开展大量研究，以开发用于集成电路的高性能晶体管[1]。由于肖特基势垒较高，会严重限制晶体管性能，因此制造具有欧姆接触的晶体管颇具挑战性。石墨烯基异质结构可作为不适用金属的补充或替代方案。我们展示了采用可规模化的化学气相沉积二硫化钼和化学气相沉积石墨烯制成的横向异质结构晶体管，其接触电阻约为 9 kΩ·μm，开关电流比为 10^8。我们还提出了一种经实验校准的理论模型，显示晶体管及接触区域仍有进一步缩小至数纳米范围的潜力；通过层优化，还可显著提升性能，从而使这类晶体管有望应用于未来的逻辑电路。

过渡金属二硫属化物（TMDCs）中的二维半导体材料有望用于下一代集成电路中大幅缩小尺寸、且基本不受短沟道效应影响的晶体管[2–5]。目前，针对研究最广泛的过渡金属二硫属化物二硫化钼（MoS_2），已实现稳定的晶圆级沉积技术[6–9]。此外，MoS_2 已被证明是高性能 N型场效应晶体管（FETs）的适用沟道材料[10–12] ，并已成功应用于电路[13–15]。低电压、低功耗应用要求晶体管不仅具有足够高的迁移率和较高的电流开关比，还要使金属电极与二维沟道之间具有较低的接触电阻。MoS_2 与金属直接接触可能会在界面处形成肖特基势垒并产生费米能级钉扎。这会导致接触电阻过高，进而限制载流子注入，最终降低器件性能[16,17]。因此，研究人员评估了各种接触方法。有人提出，将MoS_2 从半导体相 2H转变为金属相 1T，并将其用作接触区[18]。然而，值得注意的是，对于化学气相沉积（CVD）生长的MoS_2，尚未能以可重复的方式实现稳定的1T接触区域。另有研究表明，超高真空沉积的金接触也能实现极低的接触电阻[12,19,20]。然而，由于与硅基 CMOS 不兼容，金通常不适用于单片集成。另一种方法是氯化物分子掺杂，虽能显著降低接触电阻，但稳定性也会随时间下降[21]。最近，McLellan 等人[22]提出了一种稳定的掺杂工艺，通过氧化铝（AlO_x）钝化层可实现极低的接触电阻，但也会引起强烈的N型掺杂，而且

难以将其限制在接触区域内[22]。另一种降低二维材料接触电阻的方法是使用铋、锑等半金属[23,24],，但这些元素相对稀缺，可能限制其作为接触金属的长期应用。[25]另一方面，石墨烯具有出色的电导率和化学稳定性，因此有望成为与MoS_2 [26–34]形成低电阻接触的候选材料。已有多项研究证明，石墨烯可作为用途广泛的接触材料，因为通过静电掺杂可调节其功函数，从而最大限度地降低石墨烯-半导体界面处的肖特基势垒高度[26,32,35–37]。采用半金属石墨烯作为接触材料，可形成原子级平整、无悬挂键的界面，因而能够避免在与过渡金属二硫属化物的接触界面处发生费米能级钉扎[38 33]。二维材料的机械强度、柔性、透明性和热稳定性，使其非常适用于柔性电子应用[39]。在此类应用中，器件可弯曲性是一个重要考量因素。石墨烯接触可为传统金属提供一种出色的替代方案，因为在高应变水平下，传统金属往往会成为限制因素。尽管石墨烯的优势显而易见， 除石墨烯-TMDC接触电阻外，石墨烯片电阻和金属-石墨烯接触电阻也会增加总电阻，因此在接触设计和制备过程中必须对这些因素进行协同优化。此外，由于石墨烯作为电极本身非常薄，使用石墨烯接触还需要额外的金属化层以进行电学表征。这类接触固有的局限之一是范德华间隙较大，在某些情况下甚至大于金属-MoS_2 间隙[40]。不过，通过实现金属与石墨烯之间理想的边缘接触，可以解决这一问题[41]。

在这项工作中，我们通过实验展示了一种利用化学气相沉积生长的单层石墨烯，实现 MoS_2 低接触电阻且具有可扩展性的技术。我们进一步证明，单层石墨烯（SLG）与镍（Ni）之间的金属一维边缘接触，是实现低接触电阻[42,43]的适用方法。通过模拟验证了这些结果；模拟探究了基于这一方法进一步优化接触电阻的可扩展性潜力。

结果

材料表征

对单层石墨烯/MoS_2 横向异质结构（LH）（图 1a）进行了共聚焦拉曼测量，以分析转移后的二维薄膜。将单层石墨烯转移至 SiO_2 后进行的 400 点拉曼映射图（见图 1b）显示了单层石墨烯的 2D（2692 cm^{-1}）和 G（1589 cm^{-1}）模态。未检测到约 1350 cm^{-1} 处的缺陷峰，表明转移后的石墨烯质量很高。此前生长工艺中通过原子力显微镜测得的 MoS_2, 厚度约为 0.7 nm，与拉曼数据一致，证实其为单层结构。[9]

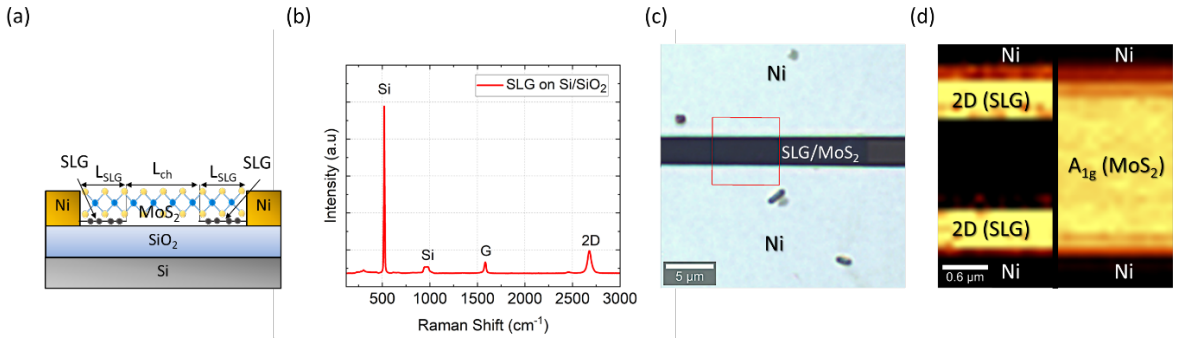


图 1：样品设计与二维层排列概览。(a) 横向异质结场效应晶体管的器件示意图。L_{SLG} 表示单层石墨烯/MoS_2 异质结构的长度，L_{ch} 定义了晶体管的沟道。(b) 转移 MoS_2之前，Si/SiO_2 上单层石墨烯的拉曼光谱。(c) 横向异质结场效应晶体管的光学显微镜图像。(d) 所示的拉曼区域扫描是在红框标记的区域内进行的。(d) 空间分辨拉曼映射图显示了单层石墨烯 2D 模式（左）和 MoS_2 A_{1g} 模式（右）的强度。暗区表示该模式不存在，亮度较高的区域则表示强度更高。

对微米尺度场效应晶体管进行了空间分辨拉曼映射（图 1c 中的红框）。图 1d 中 MoS_2 的 A_{1g} 模态强度很高，证实 MoS_2 沟道均匀覆盖了镍接触电极之间的整个区域，而单层石墨烯与镍和 MoS_2接触。

器件特性

镍边缘接触与单层石墨烯的接触电阻 R_c 通常仅为几百 Ω μm，而单层石墨烯的片电阻 R_s 为 ~1 kΩ/square[43] （补充图 4），比 MoS_2低 100 倍以上。

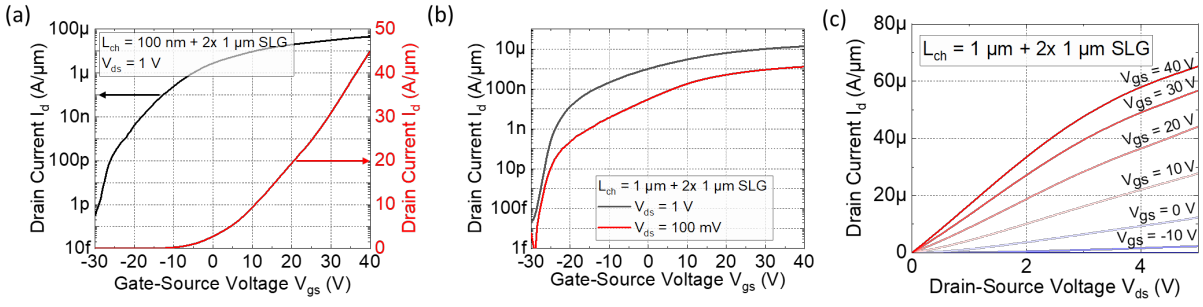


图 2：器件的晶体管性能特性。(a) 沟道长度为 L_{ch} = 100 nm 的 MoS_2横向异质结场效应晶体管在 V_{ds} = 1 V 下的转移特性，对数刻度（黑线）和线性刻度（红线）。(b) 转移

L_{ch} = 1 μm 的横向异质结场效应晶体管在 V_{ds} = 1 V（黑线）和 V_{ds} = 100 mV（红线）下的特性，以及 (c) 对应的输出曲线。

图2a显示了V_{ds} = 1 V下的转移特性。对于L_{ch} = 100 nm、V_{gs} = 40 V的器件，测得的最大导通电流为I_{on}/W = 43 μA/μm。

图图2b展示了沟道长度为L_{ch} = 1 μm的横向异质结场效应晶体管的转移特性。该器件实现了超过10^8 的高电流开关比，关态电流仅约为10 fA/μm，条件为V_{gs} = -30 V（更宽V_{gs} 扫描范围的曲线见补充图3）。转移曲线在V_{gs} = -20 V处出现拐点，这可能归因于源极/漏极区域[44]中的受主型界面态。图图2c中沟道长度为1 μm的横向异质结场效应晶体管的输出曲线显示，漏极电流具有欧姆特性，表明石墨烯接触方案适用。由于栅氧化层相对较厚（90 nm SiO_2），该器件漏极电流的饱和范围受到限制；较厚的栅氧化层阻碍了沟道内强静电势的形成。随着沟道长度减小，器件的导通电流持续增加，近似遵循$1/\sqrt{L_{ch}}$ 关系，如图3图3a所示；其中V_{ds} = 100 mV（红色）和V_{ds} = 1V（黑色），V_{gs} = 40V。采用传输线法（TLM）从总电阻中提取接触电阻

$$R_{total} = 2 \cdot R_c + R_{ch} \quad (1)$$

其中，R_{ch} 为沟道电阻。图3b 展示了不同 L_{ch} 下 R_{total} 的线性拟合，直线与 Y 轴的交点对应于 $2 \cdot R_c$ 的值。这里，a

R_c = 9 ±2 kΩ μm 是从横向异质结场效应晶体管中提取的，其数值比采用纯镍侧接触的参考 MoS_2 场效应晶体管低一个数量级以上（补充图 5；补充图 6 对比了横向异质结场效应晶体管与镍接触场效应晶体管的转移特性）。两类器件提取出的片电阻均为 R ~60 kΩ /平方。为展示该方法的可扩展性，我们对每种沟道长度的 10 个横向异质结场效应晶体管进行了测量（补充图8），结果显示器件间差异极小。文献数据的基准对比图比较了石墨烯接触的多层化学气相沉积和剥离 MoS_2 场效应晶体管的接触电阻（图3c）。为强调这种可扩展方法的重要性，比较对象选取了石墨烯接触的 MoS_2-场效应晶体管；该方法在材料质量方面仍有提升空间。尽管此前基于薄片的 MoS_2 和石墨烯已实现更低的接触电阻，但本研究采用可扩展材料，并在化学气相沉积单层 MoS_2 沟道上实现了已报道的最低接触电阻，从而缩小了与薄片材料优越性能之间的差距。

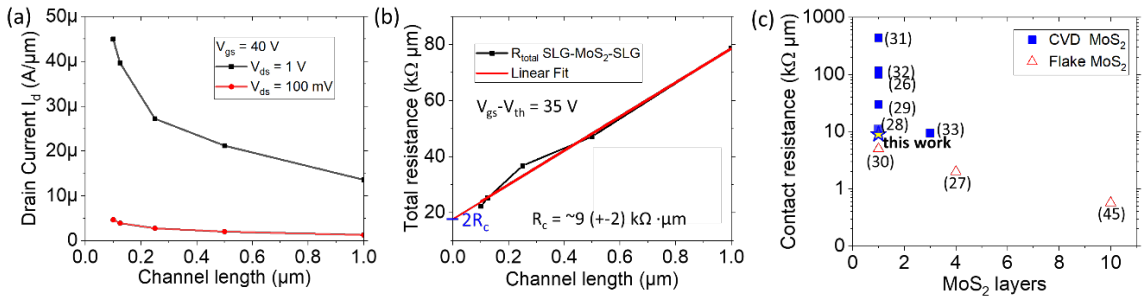


图3：接触电阻的补充性能数据和基准比较。(a) 在双对数刻度下，绘制了 V_{ds} = 1 V（黑线）和 V_{ds} = 100 mV（红线）对应的 I_{on} 随 L_{ch} 的变化关系。(b) 不同横向异质结构场效应晶体管的器件总电阻随沟道长度的变化，以及通过传输线法提取的接触电阻。

(c) 石墨烯接触的 MoS_2 场效应晶体管 [26–30,32,33,45] 的接触电阻基准对比图，横轴为 MoS_2 层数（蓝色：化学气相沉积 MoS_2；红色：剥离 MoS_2）。

器件模拟

为了更好地理解器件工作以及缩小至纳米尺寸的潜力，我们对横向异质结场效应晶体管进行了多尺度模拟。

在我们的模型中，我们将顶部接触描述为由电阻和电流源组成的电阻梯形网络，如图 4a 所示。水平方向（层内）的电阻与各层的方块电阻成正比；垂直电流源则提供由弹道输运产生的单位面积垂直电流，该电流非线性地取决于两个节点的电化学势以及垂直静电势分布。由于我们可以沿水平方向为每一层定义局部电化学势 $\mu_{Gr}(x)$ 和 $\mu_{MoS_2}(x)$，因此非线性电流源通过修正的朗道尔公式描述。为使用可测量的物理量，我们采用层内施加电势，其定义如下：

$$V_i(x) = -(1/e)\mu_i(x) \qquad (2)$$

而非化学势：

$$I_v(x) = I_0 \cdot \int T\left(E, \phi\left(V_{Gr}(x), V_{MoS_2}(x)\right)\right)\left(f\left(E + V_{MoS_2}(x)\right) - f\left(E + V_{Gr}(x)\right)\right) dE. \qquad (3)$$

假设静电势在水平方向上平滑变化，我们可以通过依赖于栅极电压 V_{gs} 和施加电势的一维垂直泊松模拟，计算每个水平位置 x 处的静电势。通常，层间透射系数 $T(E,x)$取决于垂直方向上静电势的具体分布。假设两层的电化学势之差很小，我们可以将 $T(E,x)$近似为一个$T(E+e\phi(x))$，其中 $\phi(x)$是相同水平坐标 x 处两层静电势的平均值：$\phi(x) = (\phi_{Gr}(x) + \phi_{MoS_2}(x))/2$ (4)

这相当于假设垂直方向上的势垒形状对各层的电化学势的依赖可以忽略不计，并且垂直方向上的透射系数仅受势垒平均位移的影响。我们按照方法部分所述的步骤，采用多尺度方法，在平衡态下考虑两个无限层，计算了 $T(E)$。

泊松方程的解使我们能够同时采用上述近似，将 $T(E)$ 平移至 $T(E+e\phi(x))$，并计算两层中的载流子密度，而这些密度又会影响方块电阻

$$R_{sh,a}(x) = \frac{1}{[e\mu_{c,a}n_{s,a}(x)]} \qquad (5)$$

，其中 $n_{s,\ a}(x)$ 是多数载流子密度，μ_c 是由 a 表示的层中的载流子迁移率，其中（$a = Gr$，MoS_2）。

因此，栅极电压 V_{gs} 的影响完全体现在 $T(E+\phi(x))$ 和 $R_{sh,1,2}(x)$ 中。模型参数包括材料迁移率 $\mu_{c,\ Gr}$、 $\mu_{c,\ MoS2}$，以及相应的掺杂浓度 n_{Gr}、 n_{MoS_2}。我们根据参考文献 [43] 中类似结构的电荷中性点位置，估算出 SiO_2 衬底上的 n_{Gr} 为 $4.5\times10^{12}\text{cm}^{-2}$；对于 MoS_2，则假设其为 $2\times10^{12}cm^{-2}$。利用估算出的掺杂浓度，我们可以使用泊松模拟得到的载流子密度，根据参考文献 [43] 中的片电阻以及由补充图 7 所示 TLM 得到的沟道片电阻，通过反演来分别估算 $\mu_{c,\ Gr}$ 和 $\mu_{c,\ MoS2}$

$$R_{sh}=\frac{1}{[e\mu_c n_s]} \quad (6)$$

对于 MoS_2，我们估计样品 1 的数值为 $\mu_{c,MoS2}\approx 1\ \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$，样品 2 的数值为 $\mu_{c,\ MoS2}\approx 7\ \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$；对于石墨烯，我们估计其数值为 $\mu_{c,Gr2}\approx 629\ \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$。我们还引入了一个拟合参数：界面质量因子 η，定义为

$$\eta = \quad (7)$$

它表示我们对晶面之间实际距离的认知不足以及整体界面质量。

我们采用非线性传输线模型的结构构建模型，并求解了一组微分方程，用于描述带有代表垂直输运源项的水平输运[43]。借助该模型，我们得以获得施加电势 $V_{Gr,MoS_2}(x)$ 以及

两层中的水平电流 $I_{Gr,MoS_2}(x)$ 分布。根据这些电流分布，我们提取出描述顶部接触性能的两个主要参数：i) 接触电阻（R_c）和 ii) 转移长度（λ_T）。前者是衡量接触性能的主要品质因数。通过计算，我们确认了实验结果；对于样品 2 的估算迁移率，所得结果为 $R_c = 9\ k\Omega \cdot \mu m$ 。至于后者，它表示电流从一层流向另一层的特征长度，因此也代表顶部接触的最小长度；我们得到 $\lambda_T = 27\ nm$，显示出接触长度缩放和集成的潜力。通过在金属与二维半导体之间插入半金属石墨烯，可实现低电阻。正如 Shen 等人[23], 所示，这在一定程度上避免了半导体带隙中杂化态的形成，而这些杂化态会导致费米能级钉扎现象。石墨烯与 MoS_2 之间相对较低的肖特基势垒为 ~0.5 eV；由于石墨烯是半金属，不能假设其态密度无限大，因此可通过栅极电压进一步降低该势垒[26,35,36,47]。此外，栅极电压会在接触区域引入较高的载流子密度，从而进一步提高电导率。采用先进的制备工艺还能确保获得杂质和缺陷密度较低的洁净异质结构。

我们的模型有效性的主要佐证是接触电阻R_c 随$\mu_{c、MoS2}$的正确缩放。如图 4d 所示，增大 $\mu_{c,\ MoS2}$ 并保持其他所有参数不变，会使R_c非线性下降。我们的迁移率缩放模型能够通过对两个迁移率不同的样品采用相同的η值，描述它们的R_c 。这表明η 是一个

通用参数，仅取决于材料选择和界面质量，而与材料本身的质量无关。因此，获得一个μ_c值下的η后，MoS_2使我们能够外推采用更高质量材料制成的接触的接触电阻，从而评估镍-石墨烯/二硫化钼$_2$接触在未来实际应用中的潜力。可以看出，即使接触采用具有创纪录迁移率的材料制成（石墨烯为~10000 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ 44，二硫化钼为~200 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ ），在当前界面质量$\eta = 0.17$下，最低接触电阻也将为R_c~2 $k\Omega \cdot \mu m$，对应的转移长度为λ_T~80 nm。对于理想界面质量$\eta = 1$，我们估计可实现的最低接触电阻为$R_c \sim 0.5\ k\Omega \cdot \mu m$，对应$\lambda_T \sim 35\ nm$。图 4d 还表明，界面质量比二维材料迁移率更为重要，因为接触电阻会迅速达到饱和，这是由于垂直接口的有效电阻所致。

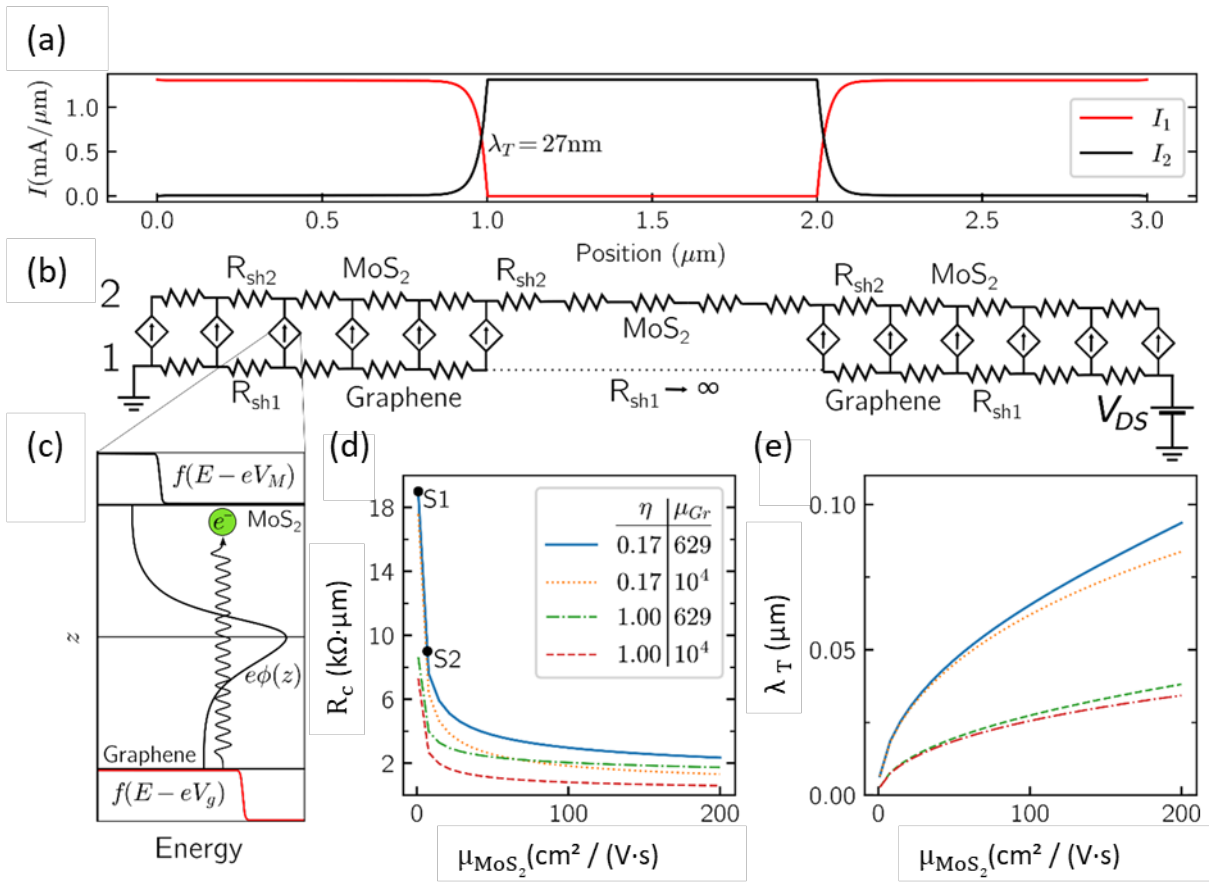


图 4： 输运的多尺度模拟。 (a) 典型器件工作条件下整个器件中各层的模拟水平电流。石墨烯层 (1) 与 MoS_2 层 (2) 之间的水平电流转移表明，垂直载流子输运可持续数个转移长度 λ_T。(b) 器件的类电路示意图，即非线性传输线模型设置。两层电阻层之间的垂直弹道输运由非线性电流发生器表示。(c) 垂直弹道输运示意图。载流子从局域静电势 $V_{1、2}(x)$所产生的局域费米分布出发，穿过层间势垒$\phi(z)$传播。(d) 不同界面质量 η 和石墨烯迁移率 μ_{Gr}下，模拟的接触电阻 R_c 对 MoS_2 迁移率 μ_{MoS_2} 的依赖关系。我们的模拟正确预测了具有不同 μ_{MoS_2}的两个样品（S1 和 S2）之间的接触电阻差异。(e) 不同 η 和 μ_{Gr} 下，模拟的传输长度 λ_T 对μ_{MoS_2} 的依赖关系（图例同 (d)）。λ_T 对μ_{Gr}的依赖性较弱。

总之，我们通过实验展示了基于可扩展材料的横向单层石墨烯/MoS_2 异质结构，其接触电阻低至 ~9 kΩ μm，电流开关比为

10^8。经实验校准的理论模型表明，电荷转移长度可低至 27 nm，显示了单层石墨烯方案应用于超微缩二维场效应晶体管的缩放潜力。此外，我们的模型表明，采用迁移率更高且界面经过优化的过渡金属二硫属化物，可实现极具前景的 0.5 kΩ μm 接触电阻。未来，要改善异质结构的界面并降低可扩展器件中的接触电阻，需要采用直接生长工艺，或更洁净地转移大面积生长的二维材料。

方法

MoS_2 沉积

采用六羰基钼（$Mo(CO)_6$）和二硫化氢（H_2S）作为前驱体，通过金属有机化学气相沉积（MOCVD）在 2 英寸蓝宝石晶圆上生长了连续的单层 MoS_2 薄膜。材料的全面表征已在参考文献 [9] 中完成，包括通过透射电子显微镜（TEM）评估材料质量。

材料表征

使用波长为 532 nm、功率为 1 mW 的激光，对 MoS_2 进行了共焦拉曼和光致发光测量，分别在其蓝宝石生长衬底上以及转移至硅衬底上的 90 nm 氧化硅层后进行（补充图 1）。MoS_2 的光致发光测量和单层石墨烯的拉曼测量使用 300 线/mm

光栅进行，MoS_2的拉曼测量则使用1800线/mm光栅进行。通过原子力显微镜测得MoS_2的台阶高度为~0.7 nm。

器件制备

通过 PMMA辅助湿法转移，将市售生长于铜（Cu）上的化学气相沉积单层石墨烯转移到带有预制对准标记的 90 nm SiO_2/Si 衬底上。采用电子束光刻和氧（O_2）等离子体反应离子刻蚀对单层石墨烯接触区域进行图案化。随后通过湿法转移[48]将化学气相沉积 MoS_2 转移到整个芯片上。使用电子束光刻以及后续采用四氟甲烷（CF_4）和 O_2混合气体的反应离子刻蚀来定义场效应晶体管沟道。最后，使用电子束光刻和后续的 CF_4/O_2 等离子体反应离子刻蚀工艺，并采用相同的抗蚀剂掩模，定义与单层石墨烯接触的自对准溅射镍边缘接触。采用沟道长度为 100 nm 至 1 μm 的背栅场效应晶体管，通过传输线法确定接触电阻。器件沟道宽度相对较大，为 100 μm，以补偿二维层中的单材料缺陷或转移造成的残留物[49]。图 S2 展示了横向异质结构场效应晶体管的制备工艺示意图。尽管石墨烯和 MoS_2 垂直堆叠，‘横向异质结构’一词指的是横向晶体管构型，其中 MoS_2 沟道可在两个石墨烯接触之间进行调制。

计算方法

器件模型需要准确描述物理学，以及水平方向（~1 μm）和垂直方向（~1 nm）上相差很大的两个长度尺度。因此，我们假设水平方向为扩散输运，而在异质结的范德华间隙中垂直方向为弹道输运。采用单一多尺度模型描述这两种截然不同的输运机制。对于弹道输运，我们按照参考文献[50]中详述的流程，计算石墨烯与 MoS_2 之间的垂直透射系数：i) 对无限石墨烯-MoS_2 异质结构进行密度泛函理论模拟；ii) 使用适当的投影，将 DFT 哈密顿量变换到最大局域化 Wannier 函数（MLWF）基组，以便清晰识别顶部和底部薄片，即 MoS_2 和石墨烯；iii) 使用非平衡格林函数模拟计算垂直透射，并构建包含单层和双层区域的适当 MLWF 哈密顿量[50]。DFT 计算使用 QUANTUM ESPRESSO 软件套件完成[51]。我们考虑了一个由 5×5 个石墨烯原胞和 4×4 个 MoS_2 原胞组成的超胞，对石墨烯施加 3% 应变，而 MoS_2, 不施加应变，层间距设为 3.4 A。我们采用 GGA-PBE 赝势和 Grimme-D2 修正来考虑范德华力。计算在 $3 \times 3 \times 1$ 网格上进行。通过 Wannier90 代码[52] 获得 MLWF 表示下的哈密顿量：对每个碳原子的 p_z 轨道以及每两个碳原子的三个 sp2 轨道进行投影，同时对 Mo 原子采用 d 轨道，对 S 原子采用 s 轨道和 p 轨道。透射系数使用 NanoTCAD ViDES[53]计算。

数据可用性声明

本研究期间生成的数据集可根据合理请求向通讯作者获取。

致谢

我们感谢欧盟地平线2020研究与创新计划资助的 QUEFORMAL (829035) 和石墨烯旗舰计划 (881603)，德国研究联合会 (DFG) 项目 MOSTFLEX (407080863)、ULTIMOS$_2$ (LE 2440/8-1) 和 INST 221/96-1，以及德国联邦教育与研究部 (BMBF) 项目 NeuroTec II (16ME0399, 16ME0400) 和 NeuroSys (03ZU1106AA)。

作者贡献

本稿件由所有作者共同贡献撰写。所有作者均已批准稿件的最终版本。

利益冲突

作者声明不存在财务或非财务利益冲突。

相关内容

补充材料可在线获取，也可向作者索取。

作者信息

通讯作者

*Lemme@amo.de

参考文献

1. Tosun, M. 等. 基于 WSe_2 的互补场效应晶体管高增益反相器。《ACS纳米》8, 4948–4953（2014年）。

2. Yoon, Y.、Ganapathi, K. 和 Salahuddin, S. 单层二硫化钼晶体管的性能能有多好?《纳米快报》11, 3768–3773（2011年）。

3. Sebastian, A.、Pendurthi, R.、Choudhury, T. H.、Redwing, J. M. 和 Das, S. 单层二硫化钼和 WS 2 场效应晶体管的基准比较。Nature Communications 12, 693（2021年）。

4. Chung, Y.-Y. 等. 首次展示栅长为 40 nm 的全环绕栅极单层二硫化钼纳米片型n沟道场效应晶体管，在 1 V VD 下具有410μA/μm ID。载于 2022 年国际电子器件会议（IEDM）, 34.5.1-34.5.4（2022年）。doi:10.1109/IEDM45625.2022.10019563。

5. Lemme, M. C., Akinwande, D., Huyghebaert, C. & Stampfer, C. 面向未来异质电子学的二维材料。《Nature Communications》13, 1392（2022年）。

6. Kang, K. 等。具有晶圆级均匀性的高迁移率三原子层厚半导体薄膜。《Nature》520, 656–660（2015年）。

7. Yu, H. 等。高度取向单层二硫化钼连续薄膜的晶圆级生长与转移。《ACS纳米》11, 12001–12007（2017年）。

8. Marx, M. 等. 二维二硫化钼的金属有机化学气相外延生长参数。Journal of Electronic Materials 47, 910–916 (2018).

9. Cun, H. 等. 蓝宝石和二氧化硅上单层二硫化钼的晶圆级 MOCVD 生长。《纳米研究》12, 2646–2652 (2019).

10. Radisavljevic, B., Radenovic, A., Brivio, J., Giacometti, V. & Kis, A. 单层二硫化钼晶体管。《自然·纳米技术》6, 147–150（2011年）。

11. Smets, Q. 等。采用42 nm接触间距、漏极电流为250 μA/μm的超缩放MOCVD二硫化钼金属氧化物半导体场效应晶体管。载于2019年IEEE国际电子器件会议（IEDM）, 23.2.1–23.2.4（2019年）。doi:10.1109/IEDM19573.2019.8993650。

12. Chou, A.-S. 等。采用锡欧姆接触的化学气相沉积单层二硫化钼n型场效应晶体管的高导通态电流。《IEEE电子器件快报》42, 272–275（2021年）。

13. Radisavljevic, B., Whitwick, M. B. & Kis, A. 基于单层二硫化钼的集成电路与逻辑运算。《ACS纳米》5, 9934–9938（2011年）。

14. Polyushkin, D. K. 等. 模拟二维半导体电子学. Nature Electronics 3, 486–491 (2020年).

15. Conti, S. 等. 用于纸张上集成数字与模拟电子学的低电压二维材料基印刷场效应晶体管. Nature Communications 11, 3566 (2020年).

16. Liu, W., Sarkar, D., Kang, J., Cao, W. 和 Banerjee, K. 接触对背栅单层二硫化钼场效应晶体管运行和性能的影响. 《ACS纳米》9, 7904–7912 (2015年).

17. Schulman, D. S., Arnold, A. J. & Das, S. 二维材料和器件的接触工程。《化学学会评论》47, 3037–3058（2018年）。

18. Kappera, R. 等. 用于超薄二硫化钼晶体管的相工程化低电阻接触。Nat Mater 13, 1128–1134（2014年）。

19. English, C. D., Shine, G., Dorgan, V. E., Saraswat, K. C. & Pop, E. 通过超高真空金属沉积改善MoS2晶体管的接触。《纳米快报》16, 3824–3830（2016年）。

20. Smithe, K. K. H., English, C. D., Suryavanshi, S. V. & Pop, E. 合成单层二硫化钼中的高场输运与速度饱和。《纳米快报》18, 4516–4522（2018）。

21. Yang, L. et al. 二维材料的氯化物分子掺杂技术：WS_2和MoS_2。《纳米快报》14, 6275–6280（2014年）。

22. McClellan, C. J., Yalon, E., Smithe, K. K. H., Suryavanshi, S. V. & Pop, E. AlOx掺杂单层二硫化钼中的高电流密度。《ACS纳米》15, 1587–1596（2021年）。

23. Shen, P.-C. 等. 半金属与单层半导体之间的超低接触电阻. Nature 593, 211–217（2021年）。

24. Li, W. 等. 二维半导体接触中的量子极限探讨. Nature 613, 274–279（2023）。

25. Henckens, T. 稀缺矿产资源：开采、消耗与可持续性限制. 《资源、保护与回收》169, 105511（2021年）。

26. Yu, L. 等. 面向大规模二维电子学的石墨烯/二硫化钼混合技术. 《纳米快报》14, 3055–3063（2014年）。

27. Cui, X. 等。利用范德华异质结构器件平台对 MoS 2 进行多端输运测量。《自然·纳米技术》10，534–540（2015年）。

28. Zhao, M. 等。原子级薄晶体管和电路的大规模化学组装。《自然·纳米技术》11, 954–959（2016年）。

29. Guimarães, M. H. D. 等. 原子级薄二维材料之间的欧姆边缘接触。《ACS纳米》10, 6392–6399（2016年）。

30. Xie, L. 等. 石墨烯接触的超短沟道单层二硫化钼晶体管。《先进材料》29, 1702522（2017年）。

31. Hong, W.、Shim, G. W.、Yang, S. Y.、Jung, D. Y. 和 Choi, S.-Y. 二硫化钼-石墨烯横向异质结构的电接触特性得到改善。《先进功能材料》29, 1807550（2019）。

32. Chee, S.-S. 等. 石墨烯/银电极降低肖特基势垒高度，实现高迁移率二硫化钼场效应晶体管。《先进材料》31, 1804422（2019）。

33. Mootheri, V. 等。基于石墨烯的范德华接触在二硫化钼$_2$场效应晶体管中的应用。《二维材料》8，015003（2020年）。

34. Tang, J. 等。用于全二维电子器件的二维构件垂直集成。《先进电子材料》6, 2000550（2020年）。

35. Qiu, D. & Kim, E. K. 多层石墨烯/二硫化钼异质结构晶体管中的电可调负肖特基势垒。《科学报告》5，13743（2015年）。

36. Du, H. 等. 二硫化钼场效应晶体管中单层和双层石墨烯接触的肖特基势垒差异。《应用物理快报》107, 233106（2015年）。

37. Jin, C., Rasmussen, F. A. 和 Thygesen, K. S. 通过电子掺杂调控石墨烯/MoS2界面的肖特基势垒：密度泛函理论与多体计算。《物理化学杂志C》119, 19928–19933（2015年）。

38. Kim, C. 等. 单层二硫属化钼电学金属接触处的费米能级钉扎。《ACS纳米》11, 1588–1596（2017年）。

39. Akinwande, D. 等. 二维材料——石墨烯及其他材料的力学与机械性能综述。《极端力学快报》13, 42–77（2017年）。

40. Ma, Y., Dai, Y., Guo, M., Niu, C. & Huang, B. 石墨烯在钼硫化物单层上的黏附：一项第一性原理研究。《纳米尺度》3, 3883–3887（2011年）。

41. Allain, A., Kang, J., Banerjee, K. & Kis, A. 二维半导体的电学接触。《自然·材料》14, 1195–1205（2015年）。

42. Wang, L. 等. 与二维材料的一维电接触。《科学》342, 614–617（2013年）。

43. Shaygan, M. 等. 使用 CMOS兼容金属实现 CVD生长石墨烯的低电阻边缘接触。《物理学年鉴》529, 1600410（2017年）。

44. Rodder, M. A. 和 Dodabalapur, A. MoS2双栅场效应晶体管 I-V 特性中栅极依赖拐点的现象学模型。《IEEE电子器件学会期刊》9, 441–446（2021年）。

45. Liu, Y. 等. 突破亚100纳米二硫化钼晶体管的性能极限。《纳米快报》16, 6337–6342（2016年）。

46. Novoselov, K. S. 原子级薄碳膜中的电场效应。《科学》306, 666– 669（2004）。

47. Chuang, H.-J. 等. 采用高掺杂石墨烯接触以实现低电阻接触的高迁移率二硒化钨 p型和n型场效应晶体管。《纳米快报》14, 3594–3601（2014年）。

48. Schneider, D. S. 等. 基于金属有机气相外延生长的均匀少层二硫化钼制备的高响应性柔性光探测器。ACS光子学 7, 1388–1395（2020年）。

49. Tongay, S. 等. 利用化学气相沉积生长的二硫化钼和二硫化钨单层调控大面积异质结构中的层间耦合。《纳米快报》14, 3185–3190（2014年）。

50. Cannavò, E., Marian, D., Marín, E. G., Iannaccone, G. 和 Fiori, G. 通过多尺度研究部分重叠范德华结中的输运性质。《物理评论B》104, 085433（2021年）。

51. Giannozzi, P. 等. QUANTUM ESPRESSO：一个用于材料量子模拟的模块化开源软件项目。《凝聚态物理杂志》21, 395502 (2009).

52. Mostofi, A. A. 等. wannier90 的更新版本：一种用于获得最大局域化 Wannier函数的工具。《计算物理通讯》185, 2309–2310 (2014年).

53. NanoTCAD
ViDES. 图注

图*1*：样品设计和二维层排列概览。 (a) 横向异质结构场效应晶体管的器件示意图。L_{SLG} 表示单层石墨烯/MoS_2 异质结构的长度，L_{ch} 定义了晶体管的沟道。(b) 转移MoS_2之前，Si/SiO_2 上单层石墨烯的拉曼光谱。(c) 横向异质结场效应晶体管的光学显微镜图像。(d)所示的拉曼区域扫描是在红框标记的区域内进行的。

(d) 空间分辨拉曼映射图显示了单层石墨烯2D 模式的强度（左）和MoS_2 的A_{1g} 模式强度（右）。暗区表示该模式不存在，较亮区域则表示强度较高。

图 *2*：器件的晶体管性能特性。 (a) MoS_2LH-FET 在 L_{ch} = 100 nm、V_{ds} = 1 V 下的转移特性，对数刻度（黑线）和线性刻度（红线）。(b) LH-FET 在 L_{ch} = 1 μm 下，V_{ds} = 1 V（黑线）和 V_{ds} = 100 mV（红线）时的转移特性；(c) 相应的输出曲线。

图 *3*：接触电阻的补充性能数据和基准比较。 (a) 双对数刻度下，绘制了 V_{ds} = 1 V（黑线）和 V_{ds} = 100 mV（红线）时 I_{on} 随 L_{ch} 的变化。(b) 不同 LH-FET 的器件总电阻随沟道长度的变化，以及通过 TLM 提取的接触电阻。(c) 石墨烯接触的 MoS_2 FETs [26–30,32,33,45] 的接触电阻基准对比图，随 MoS_2层数变化（蓝色：化学气相沉积 MoS_2；红色：剥离 MoS_2）。

图 *4*： 输运的多尺度模拟。 (a) 在典型器件工作条件下，模拟整个器件中每个层的水平电流。石墨烯层 (1) 与 MoS_2 层 (2) 之间的水平电流转移表明，存在跨越几个转移长度 λ_T 的垂直载流子输运。(b) 器件的电路式示意图，即非线性传输线模型设置。两个电阻层之间的垂直弹道输运由非线性电流发生器表示。(c) 垂直弹道输运示意图。载流子通过层间势垒 $\phi(z)$，从由局域静电势生成的局域费米分布 $V_{1,\ 2}(x)$ 中传播。(d) 对于不同界面质量 η 和石墨烯迁移率 μ_{Gr}，模拟接触电阻 R_c 对 MoS_2 迁移率 μ_{MoS_2} 的依赖关系。我们的模拟正确预测了两个具有不同 μ_{MoS_2} 的样品（S1 和 S2）之间的接触电阻差异。(e) 对于不同 η 和 μ_{Gr} （图 (d) 使用相同图例），模拟传输长度 λ_T 对 μ_{MoS_2} 的依赖关系。λ_T 不强烈依赖于 μ_{Gr}。

补充材料

用于横向异质结构的化学气相沉积石墨烯接触 MoS_2 场效应晶体管

Daniel S. Schneider[1,2], Leonardo Lucchesi[3], Eros Reato[1,2], Zhenyu Wang[4], Agata Piacentini[1,2], Jens Bolten[1], Damiano Marian[3], Enrique G. Marin[5], Aleksandra Radenovic[4], Zhenxing Wang[4], Gianluca Fiori[3], Andras Kis[4], Giuseppe Iannacone[3], Daniel Neumaier[1,6] 和 Max C. Lemme[1, 2*]

[1]亚琛先进微电子中心（AMICA），AMO GmbH，52074 亚琛，德国。

[2]亚琛工业大学，52074 亚琛，德国。

3比萨大学，56122 比萨，意大利。

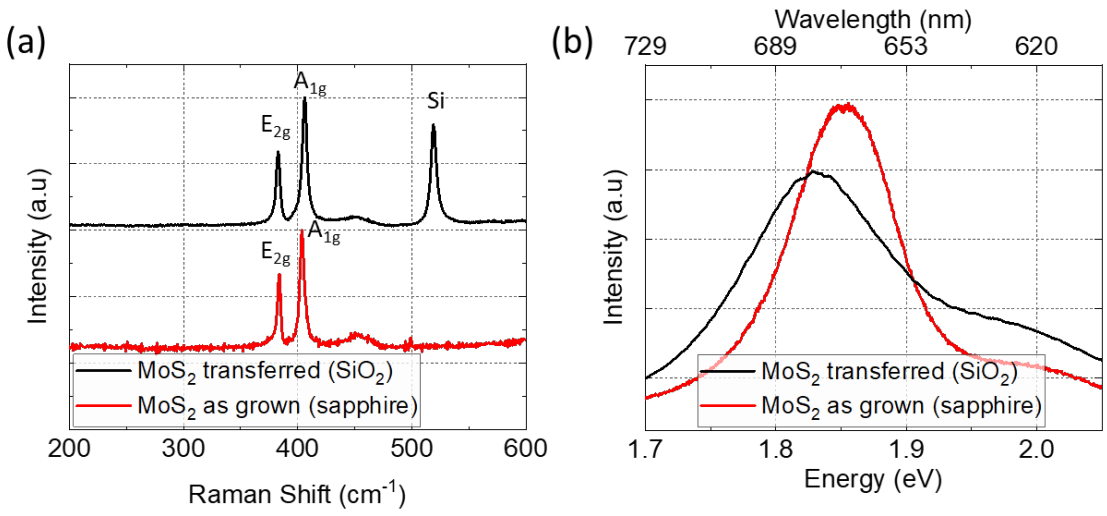
[4]洛桑联邦理工学院（EPFL），CH-1015，洛桑，瑞士。

[5]格拉纳达大学，18070 格拉纳达，西班牙。

[6]伍珀塔尔大学，42285 伍珀塔尔，德国

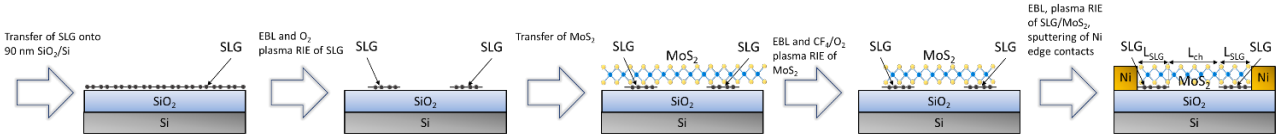
*电子邮箱：lemme@amo.de / 电话：(+49) 241 8867 201

使用波长为 532 nm、功率为 1 mW 的激光，对 MoS_2 进行了共焦拉曼和光致发光（PL）测量；测量对象包括其生长衬底蓝宝石上的样品，以及转移至硅衬底上 90 nm 厚氧化硅层后的样品（补充图 1）。光致发光和拉曼测量分别使用了 300 g/mm 和 1800 g/mm 的光栅。补充图 1a 中的拉曼光谱显示，MoS_2 转移前的 A_{1g} (404 cm^{-1}) 和 E_{2g} (384 cm^{-1}) 模式，以及转移至 SiO_2, 后的 A_{1g} (406 cm^{-1}) 和 E_{2g}(383 cm^{-1}) 模式。A_{1g} 与 E_{2g} 之间相距 20 cm^{-1}，表明生长衬底[1]上的 MoS_2 薄膜厚度为单层。补充图 1b 中的光致发光光谱显示，在 1.86 eV 处有强烈的 A 激子峰发射（红色曲线），由此凸显出较高的薄膜质量。转移后峰值受到抑制（黑色曲线），这是由于 Si/SiO_2 衬底[2]的反射特性不同所致。



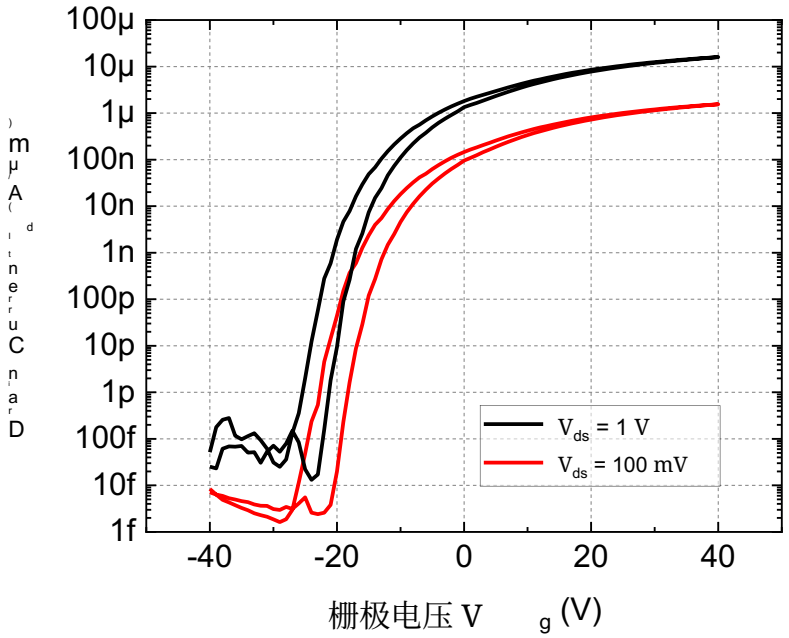
补充图 1：蓝宝石上生长的 MoS_2单层（红线）及转移至 SiO_2 衬底上的样品（黑线）的 (a) 共焦拉曼和 (b) 光致发光测量。

器件的示意性截面图见补充图 2。所有器件的沟道宽度均设计为 100 μm。石墨烯接触的长度（L_{SLG}）为 1 μm，且不计入晶体管的实际沟道长度（L_{ch}）。L_{ch} 由单层石墨烯接触之间的间隙定义，范围为 100 nm（图 1b）至 1 μm。



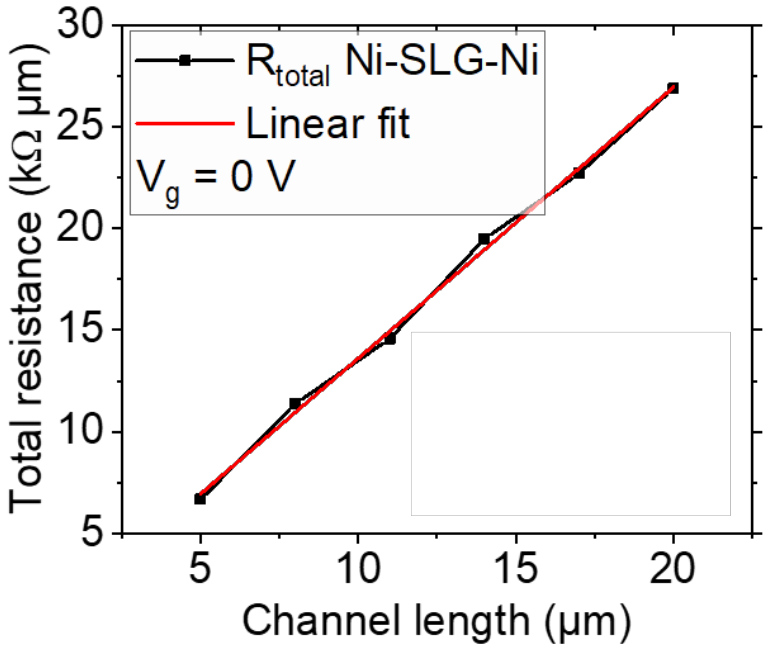
补充图 2：横向异质结构场效应晶体管的制备工艺和器件示意图。底部预先构图的石墨烯接触用作钼S_2的低欧姆接触。二维异质结构通过镍边缘接触连接。石墨烯的接触长度记为 L，其间的钼S_2沟道记为 L_{ch}。

补充图3展示了钼S_2 横向异质结场效应晶体管在 V_{ds} = 1 V 和 100 mV 下的双向扫描转移特性，采用对数刻度显示。值得注意的是，当 V_{gs} = 为 −30 V 时，器件完全处于关断状态。



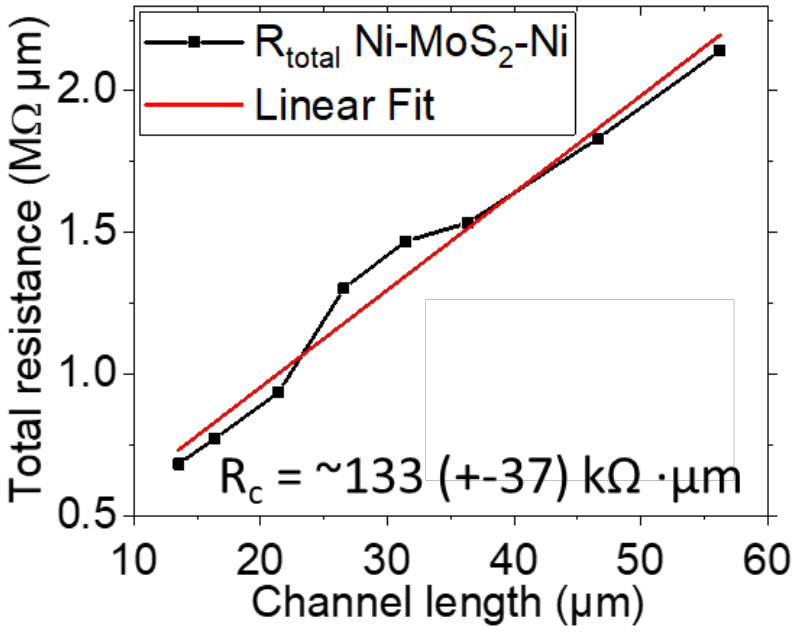
补充图3：带有石墨烯接触的 MoS_2 晶体管在 V_{ds} = 100 mV 和 V_{ds} = 1 V 下的转移曲线。

除了进行拉曼光谱分析外，还制备了镍边缘接触单层石墨烯沟道的 TLM 测试结构，以评估石墨烯质量。采用传输线法测得接触电阻为 $R_c = 275 \pm 455\ \Omega\ \mu m$，片电阻为 R_s ~1 kΩ /square（补充图 4）。



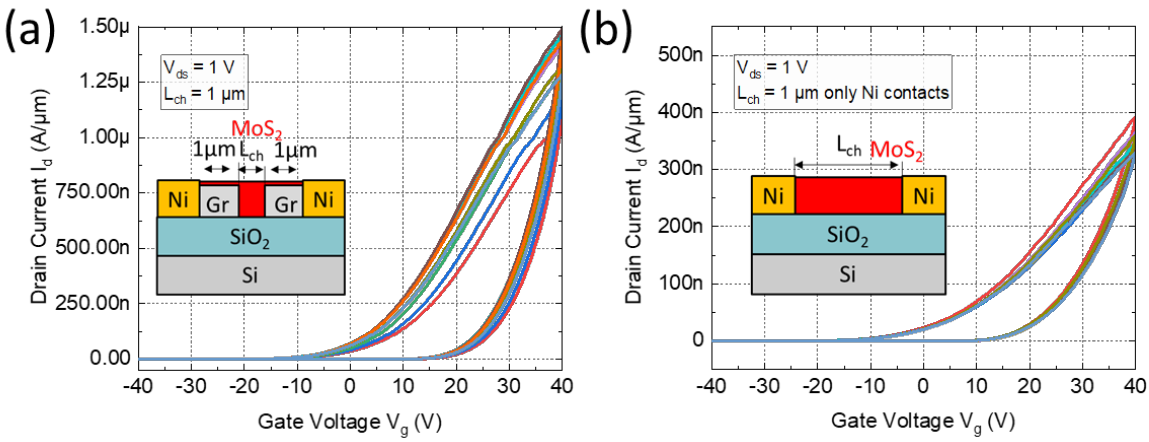
补充图 4：通过传输线法测得的镍边缘接触单层石墨烯场效应晶体管器件总电阻与沟道长度的关系。

除 LH 场效应晶体管外，还制备了镍边缘接触的 MoS_2 场效应晶体管。采用传输线法测得接触电阻为 R_c = 133 ±37 kΩ μm，片电阻为 R_s ~34 kΩ /square（补充图 5）。



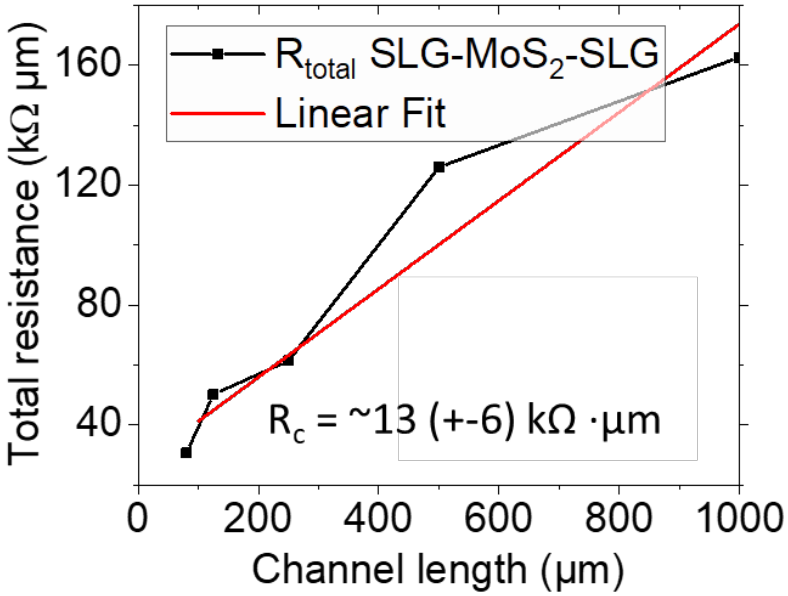
补充图 5：通过传输线法（TLM）测得的镍边缘接触 MoS_2 场效应晶体管的器件总电阻与沟道长度的关系。

补充图6直接比较了仅接触金属不同的场效应晶体管的转移特性。结果清楚表明，采用纯镍接触电极的器件具有显著更高的接触电阻和更低的电流水平。



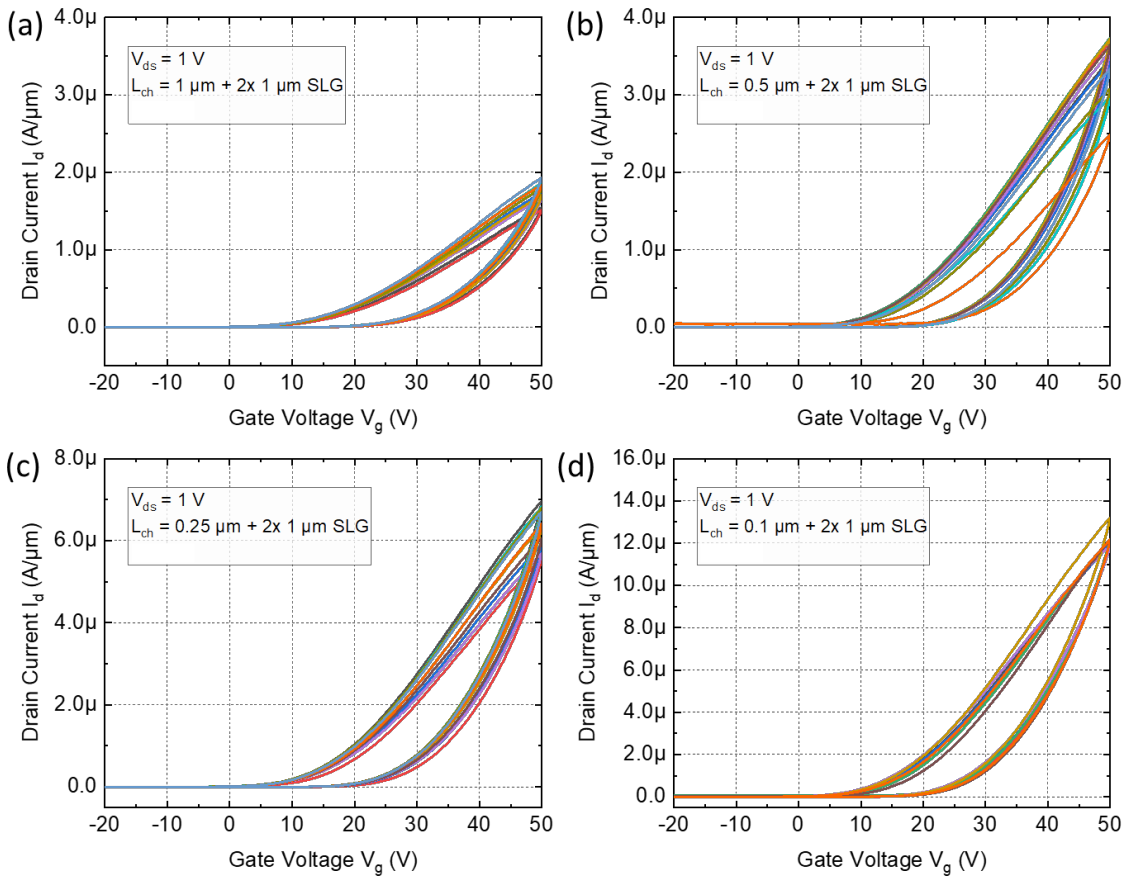
补充图 6：比较具有 (a) 单层石墨烯接触和 (b) 仅镍侧接触的 MoS_2 晶体管。

按照本文所述的相同工艺，采用少层 MoS_2 [3] 和单层石墨烯制备了横向异质结场效应晶体管（S1）。通过传输线法测定测试结构的 R_c = 13 ±6 kΩ μm 和片电阻 R_s ~147 kΩ / □。



补充图7：通过传输线法测得的少层 MoS_2 横向异质结场效应晶体管的器件总电阻与沟道长度的关系。

针对全部 4 种沟道长度，选取 10 个不同器件评估横向异质结场效应晶体管的重现性。器件间的差异极小，表明该工艺具有可扩展性。



补充图8：沟道长度 L_{ch} 分别为 (a) 1 μm、(b) 0.5 μm、(c) 0.25 μm 和 (d) 0.1 μm 的 MoS_2 场效应晶体管。

补充参考文献

1. Mak, K. F., Lee, C., Hone, J., Shan, J. & Heinz, T. F. 原子级薄的钼二硫化物： 一种新型直接带隙半导体。物理评论快报 105, (2010年)。

2. Buscema, M., Steele, G. A., van der Zant, H. S. J. & Castellanos-Gomez, A. 衬底对单层二硫化钼的拉曼和光致发光发射的影响。《纳米研究》7, 561–571（2014年）。

3. Schneider, D. S. 等。基于金属有机气相外延生长的均匀少层二硫化钼的高响应柔性光探测器。ACS光子学7, 1388–1395（2020年）。