

# 单层MoS<sub>2</sub>生长机理及光电性能的研究

吴远安\*, 余 豪

上海理工大学理学院, 上海

收稿日期: 2026年4月15日; 录用日期: 2026年5月8日; 发布日期: 2026年5月18日

## 摘 要

本文采用盐辅助化学气相沉积法, 以MoO<sub>3</sub>、S为前驱体, NaCl为生长促进剂, 在SiO<sub>2</sub>/Si衬底上成功制备了单层二硫化钼。系统研究了反应物位置、载气流量等工艺参数对MoS<sub>2</sub>生长形貌的影响, 发现当N<sub>2</sub>流量为150 sccm时, 可获得尺寸超过50 μm的大面积单层MoS<sub>2</sub>三角形岛状结构。通过拉曼光谱、扫描电子显微镜和原子力显微镜对材料质量进行表征, 结果表明所制备的MoS<sub>2</sub>为单层结构, 厚度约0.83 nm, 但局部存在由衬底残留物或成核缺陷引起的纳米“帐篷”结构, 导致局部应变和双层区域的出现。进一步基于单层MoS<sub>2</sub>构筑了光电器件, 器件在532 nm激光照射下表现出优异的光电性能: 光暗电流比接近10<sup>3</sup>, 响应时间快至微秒级(上升时间12 μs, 下降时间85 μs), 响应率最高可达63.4 mA/W。研究表明, 盐辅助CVD法生长的单层MoS<sub>2</sub>在高速光电探测领域具有良好应用前景。

## 关键词

二维材料, MoS<sub>2</sub>薄膜, 化学气相沉积

# Study on the Growth Mechanism and Optoelectronic Properties of Monolayer MoS<sub>2</sub>

Yuan'an Wu\*, Hao Yu

College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: April 15, 2026; accepted: May 8, 2026; published: May 18, 2026

## Abstract

In this paper, monolayer molybdenum disulfide was successfully synthesized on SiO<sub>2</sub>/Si substrates via the salt-assisted chemical vapor deposition (CVD) method, using MoO<sub>3</sub> and S as precursors and

\*通讯作者。

NaCl as a growth promoter. The effects of process parameters such as reactant position and carrier gas flow rate on the growth morphology of MoS<sub>2</sub> were systematically investigated. It was found that large-area triangular island structures of monolayer MoS<sub>2</sub> with sizes exceeding 50 μm could be obtained at a N<sub>2</sub> flow rate of 150 sccm. The material quality was characterized by Raman spectroscopy, scanning electron microscopy and atomic force microscopy. The results demonstrate that the as-prepared MoS<sub>2</sub> exhibits a monolayer structure with a thickness of approximately 0.83 nm. However, local nano-“tent” structures induced by substrate residues or nucleation defects exist, leading to local strain and the formation of bilayer regions. Furthermore, optoelectronic devices were constructed based on the monolayer MoS<sub>2</sub>, which exhibit excellent photoelectric performance under 532 nm laser irradiation: the photocurrent-to-dark-current ratio is close to 10<sup>3</sup>, the response time is as fast as the microsecond level (rise time 12 μs, decay time 85 μs), and the maximum responsivity reaches up to 63.4 mA/W. This study suggests that monolayer MoS<sub>2</sub> grown by the salt-assisted CVD method holds promising application prospects in the field of high-speed photodetection.

## Keywords

Two-Dimensional Materials, Molybdenum Disulfide (MoS<sub>2</sub>) Thin Films, Chemical Vapor Deposition (CVD)

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

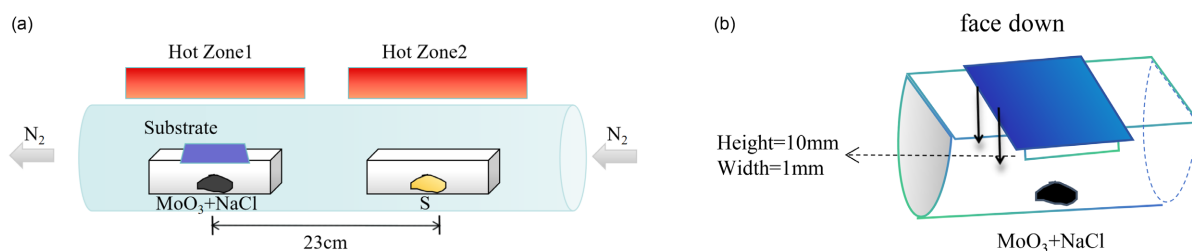
## 1. 引言

二维过渡金属硫族化合物(transition metal disulfides, TMDs)因其原子级厚度、可调的带隙和优异的光电性能,在下一代光电器件中展现出广阔的应用前景[1]-[3]。TMDs 多为 MX<sub>2</sub> 形式的化合物,其中 M 代表过渡金属元素(如钛、钒、钼、钨、铼),X 代表硫族元素(如硫、硒、碲)[4]。二维过渡金属硫族化合物因其原子级厚度、可调的带隙和优异的光电性能,在下一代光电器件中展现出广阔的应用前景。MoS<sub>2</sub> 薄膜作为典型的层状过渡金属硫化物,是其中的研究热点。MoS<sub>2</sub> 具有独特的层状结构,S-Mo-S 层间以范德华力相互作用,因此可通过机械剥离法获得单层片层[5]。当 MoS<sub>2</sub> 由体材料转变为二维材料时,其带隙由间接带隙(1.29 eV)转变为直接带隙(1.90 eV)[6],这一独特的半导体特性使其在光致发光、气体传感、场效应晶体管电路等领域具有广阔应用前景[7]-[9]。二硫化钼作为典型代表,从体材料到单层经历了从间接带隙到直接带隙的转变,显著增强了光与物质的相互作用,使其在光电探测器、场效应晶体管和柔性电子器件等领域备受关注[10]-[12]。

为实现高质量、大面积且层数可控的单层 MoS<sub>2</sub>,化学气相沉积法因其与半导体工艺兼容、可控性好等优势成为主要制备手段。然而,传统 CVD 过程中前驱体挥发温度高、成核密度难控等问题限制了单层 MoS<sub>2</sub> 的均匀生长[13]。近年来,盐辅助 CVD 策略通过在反应体系中引入 NaCl 等卤化物盐,有效降低了 MoO<sub>3</sub> 的挥发温度,促进了前驱体的均匀输运和 MoS<sub>2</sub> 的二维生长[14]。尽管如此,盐辅助 CVD 生长过程中载气流速、反应物空间分布等参数对 MoS<sub>2</sub> 形貌、层数及质量的影响机制尚需系统研究,且所制备材料的器件性能仍需进一步评估。

本文系统优化了盐辅助 CVD 生长条件,分析了不同 N<sub>2</sub> 流速下 MoS<sub>2</sub> 的形貌演变与生长机制,并对所得单层 MoS<sub>2</sub> 的光电探测性能进行了深入研究,为高性能二维材料光电探测器的制备提供了实验依据。为实现高质量、大面积且层数可控的单层 MoS<sub>2</sub>,化学气相沉积法因其与半导体工艺兼容、可控性好等优势成为主要制备手段。本文系统优化了盐辅助 CVD 生长条件,分析了不同 N<sub>2</sub> 流速下 MoS<sub>2</sub> 的形貌演变

与生长机制, 并对所得单层  $\text{MoS}_2$  的光电探测性能进行了深入研究, 为高性能二维材料光电探测器的制备提供了实验依据。



**Figure 1.** Schematic diagram of salt-assisted growth of  $\text{MoS}_2$ . (a) Substrate  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (285 nm/500 $\mu\text{m}$ ), placement of  $\text{MoO}_3$ ,  $\text{NaCl}$ , and  $\text{S}$  in quartz tube, with  $\text{S}$  placed in the second upstream temperature zone and  $\text{MoO}_3$  and  $\text{NaCl}$  placed in the first downstream temperature zone; (b) Substrate placed at the corresponding opening, with one side of  $\text{SiO}_2$  facing downwards

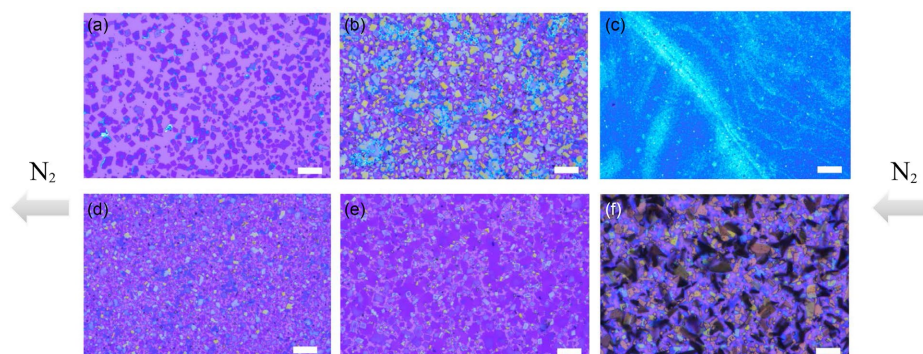
**图 1.** 盐辅助生长  $\text{MoS}_2$  示意图。(a) 衬底  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (285 nm/500  $\mu\text{m}$ ),  $\text{MoO}_3$ 、 $\text{NaCl}$ 、 $\text{S}$  在石英管的放置位置,  $\text{S}$  放在上游第二温区,  $\text{MoO}_3$ 、 $\text{NaCl}$  放在下游第一温区; (b) 衬底在对应开口处放置,  $\text{SiO}_2$  的一面朝下

## 2. 实验方法

用金刚石刀制取约为  $16 \text{ mm} \times 16 \text{ mm}$  的硅片( $\text{SiO}_2/\text{Si}$ , 285 nm/500  $\mu\text{m}$ ), 随后分别在丙酮, 异丙醇和去离子水中超声清洗 5 min, 最后使用  $\text{N}_2$  吹干。用分析天平称量约 5 mg  $\text{MoO}_3$ , 1 mg  $\text{NaCl}$  和 500 mg  $\text{S}$ 。如图 1(b)所示, 将  $\text{MoO}_3$  和  $\text{NaCl}$  放置在石英舟两开口(高 1 mm, 宽 10 mm)处对应的底部, 清洗好的硅片平放在对应开口处, 表面为  $\text{SiO}_2$  的一面朝下。完成后将放有  $\text{S}$  粉和硅片的石英舟分别放入第二温区和第一温区, 如图 2(a)所示。使用超过 500 sccm 的  $\text{N}_2$  冲洗石英管 5 min, 然后使用大功率真空泵抽真空持续 5 min, 最后通  $\text{N}_2$  将腔体气压升高至大气压强, 恢复实验使用的气体流量 200 sccm。将第二温区和第一温区在 15 min 内分别升高至  $180^\circ\text{C}$  和  $750^\circ\text{C}$ , 并在达到设定温度后保温生长 3 min。生长完成后打开炉盖等待腔体温度自然冷却至约  $50^\circ\text{C}$  后将硅片取出。

本文采用光学显微镜、拉曼光谱仪、原子力显微镜、扫描电子显微镜对材料表面进行表征。使用光刻技术与双离子束溅射制备了  $\text{Ti}/\text{Au}$  (5 nm/45 nm)金属电极, 沟道有效面积为  $4 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m}$ 。使用  $\lambda = 532 \text{ nm}$  的激光器与测试系统(包括斩波器、测试盒、SR570 前置放大器、SR830 锁相、示波器)等进行光电学测试。

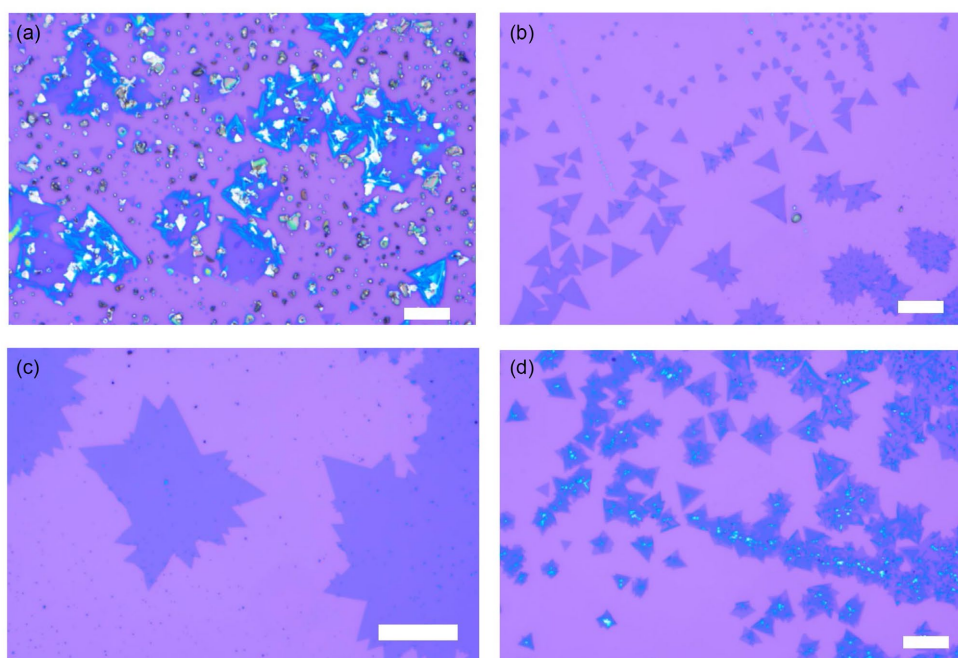
## 3. 结果与讨论



**Figure 2.** Impact of gas flow and position on the growth of  $\text{MoS}_2$ . (a)~(c) Optical microscopy images depicting the growth morphology of materials at the substrate's edge, with a scale bar indicating 10  $\mu\text{m}$ ; (d)~(f) Optical microscopy images illustrating the growth morphology of materials in the central region of the substrate, also with a scale bar of 10  $\mu\text{m}$

**图 2.** 气流与位置对  $\text{MoS}_2$  生长的影响。(a)~(c) 衬底边缘材料生长形貌的光学显微镜图像, 比例尺为 10  $\mu\text{m}$ ; (d)~(f) 衬底中部材料生长形貌的光学显微镜图像, 比例尺为 10  $\mu\text{m}$

如图 2 所示, 这是在 S 区温度  $180^{\circ}\text{C}$ , Mo 区温度  $750^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{N}_2$  流量为 100 sccm 条件下常压生长的显微镜图片(比例尺  $10\ \mu\text{m}$ ), 图中箭头标记的是  $\text{N}_2$  的流向。图 2(a)~(c)是靠近边缘的一侧, 依次距离气源端越来越远。可以观察到由远端处的图 2(a)到中端图 2(b)到近端图 2(c), 气体浓度逐渐增大。图 2(a)中可以看到少量的  $\text{MoS}_2$  淡蓝色薄膜, 到图 2(b)淡蓝色薄膜的分布增加, 到最靠近气源的图 2(c)可以看到大面积分布的多层堆叠蓝白色  $\text{MoS}_2$  块体材料。图 2(d)~(f)是靠近硅片中部的显微镜图片, 依然可以判断出中部区域气体浓度依次增大, 在最靠近气源处甚至有黑色的  $\text{MoO}_3$  附着, 说明该处  $\text{MoO}_3$  气体浓度过大, 未能及时参与反应。图 2 中多处出现蓝紫色的岛状颗粒, 这有可能是  $\text{MoO}_3$ 、S、NaCl 发生反应的中间产物  $\text{MoS}_{2-y}\text{O}_y$  [15]。

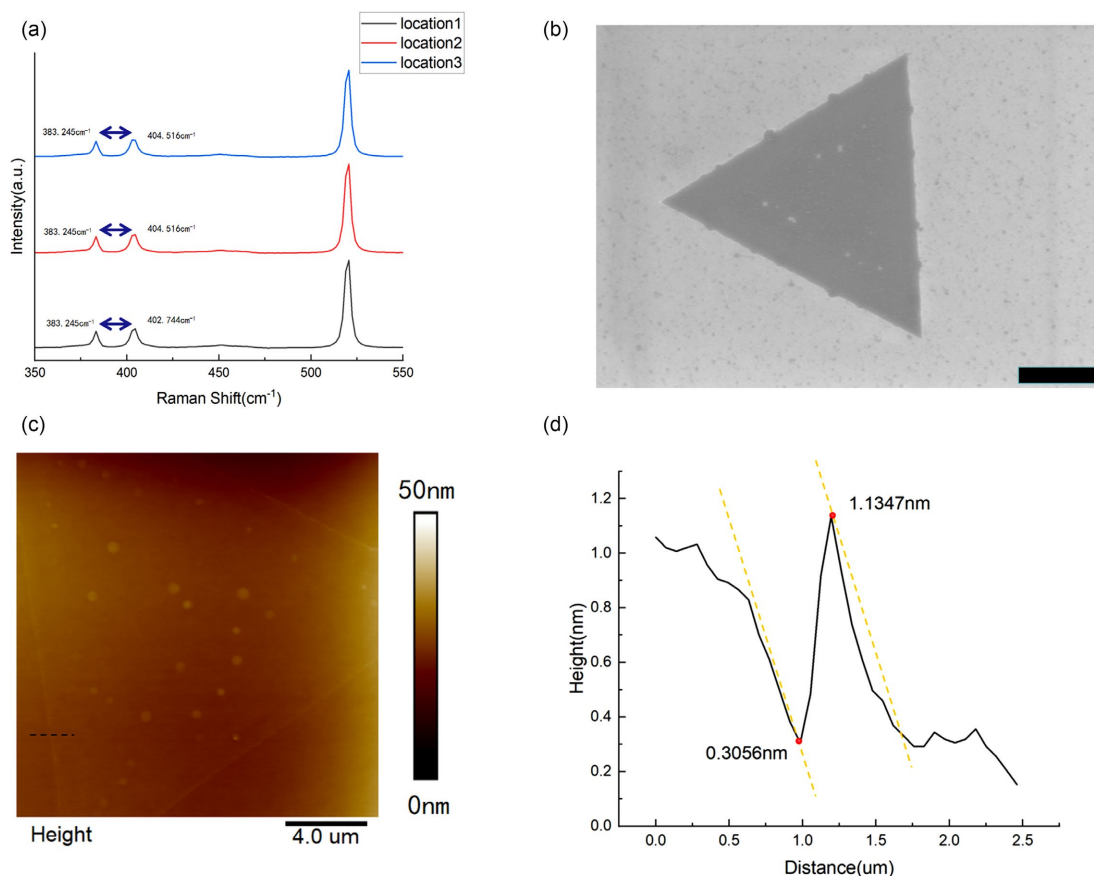


**Figure 3.** The morphologies of  $\text{MoS}_2$  grown at varying  $\text{N}_2$  flow rates are depicted in (a)~(d), which correspond to images of  $\text{MoS}_2$  morphologies obtained at  $\text{N}_2$  flow rates of 50 sccm, 100 sccm, 150 sccm, and 200 sccm, respectively. The scale bars for these images are  $10\ \mu\text{m}$ ,  $10\ \mu\text{m}$ ,  $20\ \mu\text{m}$ , and  $10\ \mu\text{m}$ , respectively

**图 3.** 不同  $\text{N}_2$  流速下生长的  $\text{MoS}_2$  形貌。(a)~(d)是分别在 50 sccm、100 sccm、150 sccm、200 sccm  $\text{N}_2$  流速下生长的  $\text{MoS}_2$  形貌图像, 比例尺分别为  $10\ \mu\text{m}$ 、 $10\ \mu\text{m}$ 、 $20\ \mu\text{m}$ 、 $10\ \mu\text{m}$

图 3(a)~(d)分别是在 50、100、150、200 sccm  $\text{N}_2$  流速下生长的  $\text{MoS}_2$  岛状显微镜图片, 保持其他条件一区温度  $750^{\circ}\text{C}$ , 二区温度  $180^{\circ}\text{C}$  以及  $\text{MoO}_3$ 、NaCl、S 等反应物使用量不变。图 3(a)、图 3(b)、图 3(d)的比例尺为  $10\ \mu\text{m}$ , 图 3(c)的比例尺为  $20\ \mu\text{m}$ 。这四幅图的拍摄位置都取自于硅片边缘与硅片中部之间的位置, 而且都处于较为靠近气源的位置。图 3(a)中可以观察到有岛状单层  $\text{MoS}_2$ , 并且其中还混杂着有多层  $\text{MoS}_2$  及块体  $\text{MoS}_2$ , 说明硅片此处的  $\text{N}_2$  流速过低, 没有带走过多的反应气体, 使得在单层  $\text{MoS}_2$  生长后, 反应物继续参与反应, 接着在单层  $\text{MoS}_2$  上生长, 以至于出现多层与块体材料。图中还观察到黑色点状物质, 有可能是  $\text{MoS}_2$  与  $\text{MoO}_3$  的混合物,  $\text{MoO}_3$  并没有完全反应完成, 由此可以看出在 50 sccm 的  $\text{N}_2$  流速下, 硅片此处的气体流速并不稳定,  $\text{MoO}_3$  与 S 的气体浓度分布不均匀, 且没有呈现梯度分布的现象。可以看出 50 sccm 的  $\text{N}_2$  流速过低, 气流容易被扰动, 不利于单层  $\text{MoS}_2$  的生长。于是设计多次提高  $\text{N}_2$  流速, 以期望获得稳定且适宜生长的  $\text{N}_2$  流速。图 3(b)是在其他条件不变,  $\text{N}_2$  流速提升到 100 sccm 的  $\text{MoS}_2$  生长显微镜图片。图中可以观察到许多尺寸约为  $10\ \mu\text{m}$  的三角形状单层  $\text{MoS}_2$ , 并且几乎没有多层

MoS<sub>2</sub> 及未反应完成的 MoO<sub>3</sub> 的存在, 说明在 100 sccm 的 N<sub>2</sub> 流速下, 硅片此处的气体流速比较稳定, MoO<sub>3</sub> 与 S 的气体浓度较为适宜单层 MoS<sub>2</sub> 的生长。当 N<sub>2</sub> 流速提升到 150 sccm 时, 同样在硅片边缘与中部之间发现了生长的单层 MoS<sub>2</sub>, 如图 3(c) 所示, 可以观察到尺寸大于 50 μm 的单层 MoS<sub>2</sub> 薄膜, 说明 N<sub>2</sub> 流速为 150 sccm 时, 该处处于单层 MoS<sub>2</sub> 的适宜条件。图 3(c) 中还观察到细小的蓝紫色小点, 这是 CVD(化学气相沉积)的生长特点导致的, 薄膜生长基本上要经过一系列原子尺度过程: 吸附、扩散、成核、岛生长、合并、连续薄膜。当沉积粒子到达生长基底表面时, 首先发生吸附这一过程, 原子附着在基底表面。随后这些原子在基底表面进行随机扩散, 并在某些位置形成稳定的晶核。随着沉积持续进行, 晶核逐渐长大, 形成规则的二维岛状结构, 并最终合并形成完整的薄膜[16] [17]。图 3(c) 中连续的 MoS<sub>2</sub> 薄膜就是经过这样一系列过程长成的, 图中细小的蓝紫色小点就是 MoS<sub>2</sub> 生长过程中的成核位点。将 N<sub>2</sub> 流速提升到 200 sccm, MoS<sub>2</sub> 的生长状况如图 3(d) 所示。与前三幅图有所不同的是, 在与其他上述 3 个实验相同的位置上及硅片边缘与中部之间且对应的石英舟缺口水平方向处并未发现单层 MoS<sub>2</sub> 薄膜, 而是在非缺口水平处(悬空处)也就是硅片压到石英舟水平处(支撑处)发现有淡蓝色 MoS<sub>2</sub> 薄膜生长。200 sccm 的 N<sub>2</sub> 流速过高, 其他部位并没有单层 MoS<sub>2</sub> 薄膜生长, 反应气体浓度紊乱, 只在石英舟与硅片的缝隙之间存在淡蓝色 MoS<sub>2</sub> 薄膜, 推测单层 MoS<sub>2</sub> 适宜在低蒸汽压环境下生长[18]。

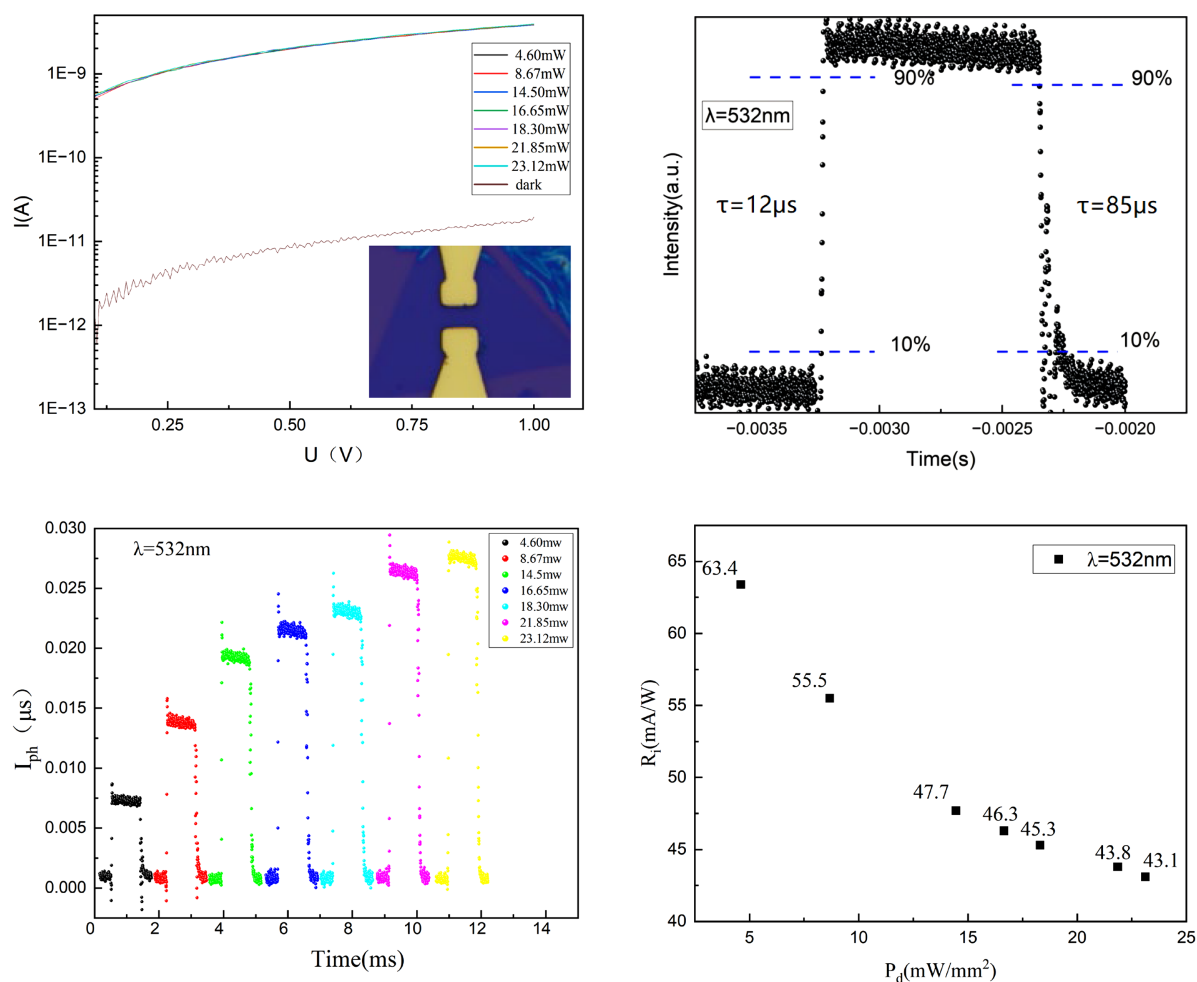


**Figure 4.** Characterization of the growth quality of MoS<sub>2</sub>. (a) Raman spectra obtained from three distinct locations on a single triangular MoS<sub>2</sub> flake; (b) SEM (scanning electron microscopy) image of a monolayer MoS<sub>2</sub>, featuring a scale bar of 1 μm; (c) (d) AFM (atomic force microscopy) image of a monolayer MoS<sub>2</sub>, along with the corresponding height profile along the black dashed line indicated in (c)

**图 4.** MoS<sub>2</sub> 生长质量的表征。(a) 同一三角形状 MoS<sub>2</sub> 的三个不同位置的拉曼光谱图; (b) 单层 MoS<sub>2</sub> 的 SEM(扫描电子显微镜)图像, 比例尺为 1 μm; (c) (d) 单层 MoS<sub>2</sub> 的 AFM(原子力显微镜)图像及对应的图(c)黑色虚线位置的高度图像

拉曼光谱是一种基于光与物质非弹性散射的分析技术, 通过检测散射光的频率变化(拉曼位移), 可以获取材料的“振动指纹”信息, 从而实现对物质结构、组成和物理状态的无损表征。拉曼光谱的峰位、峰强、峰宽和峰形是提取有用信息的关键要素。如图 4(a), 在同一三角形状 MoS<sub>2</sub> 的不同位置测试的拉曼光谱图。对于生长的 MoS<sub>2</sub> 薄膜, E<sub>2g</sub><sup>1</sup> 峰显示面内振动: 金属原子 Mo 与硫原子在层平面内发生反向振动, A<sub>1g</sub> 峰面外振动: 硫原子沿垂直于层面的方向发生反向振动。两个峰的频率差( $\Delta$ )是判断材料层数的关键指标。随着层数减少, 发生蓝移, 发生红移, 两峰间距缩小, 可据此精确鉴别层数[19][20]。黑色曲线的 A<sub>1g</sub> 峰位与 E<sub>2g</sub><sup>1</sup> 峰位差为 19.499 cm<sup>-1</sup>, 符合单层 MoS<sub>2</sub> 的拉曼光谱特征。而红色与蓝色曲线的 A<sub>1g</sub> 峰位与 E<sub>2g</sub><sup>1</sup> 峰位差为 21.271 cm<sup>-1</sup>, 说明存在双层 MoS<sub>2</sub>。如图 4(b)、图 4(c)所示, 图 4(b)为单层 MoS<sub>2</sub> 的 SEM 图像, 比例尺为 1  $\mu$ m, 图 4(c)为单层 MoS<sub>2</sub> 的 AFM 图像, 两处单层 MoS<sub>2</sub> 都为同一条件下生长。这两幅图像中都能观察到纳米小帐篷, 这有可能是衬底表面残留物: CVD 过程中使用的碱金属卤化物 NaCl 促进剂, 在衬底上有的微量钠残留, 在界面处形成纳米级的凸起。还有可能是生长过程中的成核缺陷: 在 SiO<sub>2</sub>/Si 衬底上的 CVD 生长中, 温度和前驱体比例的不协调会导致衬底表面局部成核点的不均匀分布, 这些成核残留物最终作为帐篷的“支撑柱”。帐篷结构的核心影响在于它在原子级薄膜中引入了非均匀应变场[21]。在帐篷顶部, 薄膜受到拉伸应变(张力); 而在帐篷边缘和褶皱区域, 则存在压缩应变。有文献研究表明, 这种应变梯度的空间分布可以通过拉曼光谱直接探测——帐篷区域的 E<sub>2g</sub><sup>1</sup> 模式会发生显著的频率偏移[22][23]。这也可以解释红色与蓝色曲线的 A<sub>1g</sub> 峰位与 E<sub>2g</sub><sup>1</sup> 峰位差为什么为 21.271 cm<sup>-1</sup>, 是双层 MoS<sub>2</sub> 的拉曼光谱特征。图 4(d)为图 4(c)黑色虚线位置的高度图像, 黄色虚线是为了比拟衬底与单层 MoS<sub>2</sub> 两个平面, 因为对 MoS<sub>2</sub> 做 AFM 测试时, 衬底可能存在一定程度的倾斜。测得 MoS<sub>2</sub> 的高度约为 0.83 nm, 接近单层 MoS<sub>2</sub> 的理论厚度 0.65 nm, 可以证实生长的 MoS<sub>2</sub> 为单层[24]。

如图 5(a), 浅棕色虚线为暗态电流(dark): 无光照时器件的漏电流, 在 1 V 偏压下仅约 10~11 A 量级, 说明器件暗电流极低、绝缘性好。彩色实线: 不同光功率(4.60 mW~23.12 mW)的 532 nm 激光照射下的光电流: 随电压升高电流显著增大, 且光功率越高, 电流越大。但明显观察到 4.60 mW 后光电流增幅不大, 说明光吸收饱和了[22][25]。但仍有微小的提升, 这可能是随着入射光功率的增加, 材料内部的温度可能会升高, 这可能轻微改变能带结构或载流子动力学, 从而对光吸收产生微妙的影响, 从而略微增强光电流。从图 5(a)观察到接近 10<sup>3</sup> 的光暗电流之比, 这可能在光电探测中有一定的应用。结合图 4(c)与图 5(a), 观察到极低的暗电流, 但对应的光电流提升不强, 这可能是由于小帐篷结构区域富集的硫空位或其他缺陷会在带隙中引入深能级缺陷态[26]。这些缺陷态充当非辐射复合中心, 捕获光生电子和空穴, 导致它们在未贡献电流之前就复合消失, 这直接缩短了载流子寿命, 从而降低了光电导增益[27]。图 5(b)表现出了微秒级的响应时间, 上升 12  $\mu$ s、下降 85  $\mu$ s, 说明该 CVD-MoS<sub>2</sub> 光电探测器响应速度极快, 远优于传统硅基光电探测器(毫秒级), 可用于高速光探测场景。上升时间短于下降时间, 是二维材料光电探测器的典型特征: 光生载流子在 MoS<sub>2</sub> 中快速产生, 而部分载流子被缺陷态捕获, 导致恢复时间略长, 但整体仍保持微秒级高速。图 5(c)为不同光功率下的响应时间, 观察到不同光功率(4.60 mW~23.12 mW)下, 器件的周期性光电流响应, 开关光循环光功率越高, 光电流峰值越大, 从~0.008  $\mu$ A 提升至~0.03  $\mu$ A, 与上图 I-V 曲线的规律一致。所有功率下, 光电流都能快速上升和下降, 无明显衰减, 证明器件重复性好、稳定性高, 可长期工作。如图 5(d)所示, 低功率密度(4.6 mW/mm<sup>2</sup>)时, 响应率最高达 63.4 mA/W, 随光功率密度升高, 响应率逐渐下降(55.5  $\rightarrow$  47.7  $\rightarrow$  46.3  $\rightarrow$  45.3  $\rightarrow$  43.8  $\rightarrow$  43.1 mA/W)。响应率随光功率升高而下降, 是二维材料光电探测器的普遍规律: 高功率下, MoS<sub>2</sub> 中的光生载流子发生饱和效应(缺陷态被填满、载流子复合率升高), 导致单位光功率产生的光电流减少, 从而响应率逐渐降低[28]。



**Figure 5.** Investigation into the photoelectrical performance of single-layer MoS<sub>2</sub> devices. (a) Photocurrent characteristics of single-layer MoS<sub>2</sub> under varying light intensities, with the applied voltage spanning from 0 to 1 V. The inset depicts an image of the electrode fabricated on the single-layer MoS<sub>2</sub>; (b) Response time of the device when subjected to laser irradiation at a wavelength ( $\lambda$ ) of 532 nm and a power of 4.60 mW; (c) Waveform diagrams illustrating the response time under laser irradiation at  $\lambda = 532$  nm with light powers of 4.60 mW, 8.67 mW, 14.50 mW, 16.65 mW, 18.30 mW, 21.85 mW, and 23.12 mW, respectively; (d) Current responsivity of the device under different light intensities at  $\lambda = 532$  nm

**图 5.** 单层 MoS<sub>2</sub> 器件光电性能的研究。(a) 单层 MoS<sub>2</sub> 在不同光功率下的光电流, 电压为 0 到 1 V, 插图为在单层 MoS<sub>2</sub> 上所做的电极图片; (b) 在  $\lambda = 532$  nm, 功率为 4.60 mW 激光照射下, 器件的响应时间; (c) 在  $\lambda = 532$  nm, 光功率分别为 4.60 mW、8.67 mW、14.50 mW、16.65 mW、18.30 mW、21.85 mW、23.12 mW 下响应时间波形图; (d) 在  $\lambda = 532$  nm 下, 器件在不同光功率下的电流响应率

#### 4. 结论

本文系统研究了盐辅助化学气相沉积法中载气流量对单层 MoS<sub>2</sub> 形貌与层数的影响规律, 并评估了所制备材料的光电探测性能。结果表明, 在 N<sub>2</sub> 流量为 150 sccm 时, 可获得尺寸超过 50  $\mu\text{m}$  的大面积单层 MoS<sub>2</sub> 三角形单晶, 而流量过低(50 sccm)易导致多层堆垛与反应不完全, 过高(200 sccm)则因局部蒸汽压紊乱而抑制连续成膜。拉曼光谱与原子力显微镜表征证实, 生长的 MoS<sub>2</sub> 主体为单层结构(厚度 $\sim 0.83$  nm,  $E_{2g}^1$  与  $A_{1g}$  峰位差  $19.5\text{ cm}^{-1}$ ), 但衬底表面残留物或成核缺陷会诱导纳米“帐篷”状凸起, 引入局部应变并导致部分区域呈现双层拉曼特征(峰位差  $21.3\text{ cm}^{-1}$ )。基于单层 MoS<sub>2</sub> 构筑的光电器件在 532 nm 光照下展现出极低的暗电流( $\sim 10^{-11}$  A 量级)、近  $10^3$  的光暗电流比、微秒级响应速度(上升 12  $\mu\text{s}$ /下降 85  $\mu\text{s}$ )

以及最高 63.4 mA/W 的响应率, 且器件在不同光功率下均保持稳定的周期性开关特性。尽管“帐篷”结构可能引入缺陷辅助复合从而制约响应率进一步提升, 但材料的高速响应能力与高信噪比使其在高速光电探测领域具有明确的应用潜力。后续通过优化衬底预处理与生长界面洁净度以抑制纳米凸起形成, 有望进一步改善单层 MoS<sub>2</sub> 的光电增益与均匀性。

## 基金项目

本研究得到中国科学院战略性先导科技专项(课题编号: XDB0580000)、国家自然科学基金(课题编号: 12174416、12574087、12393833、U2241219、12227901、U23A6002、12393831、12088101)及国家重点研发计划(课题编号: 2022YFA1404603、2024YFA1409802、2024YFA1409800)资助。

## 参考文献

- [1] Bisen, O.Y., Atif, S., Mallya, A. and Nanda, K.K. (2022) Self-Assembled TMD Nanoparticles on N-Doped Carbon Nanostructures for Oxygen Reduction Reaction and Electrochemical Oxygen Sensing Thereof. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **14**, 5134-5148. <https://doi.org/10.1021/acsami.1c11300>
- [2] Jian, J., Dong, P., Jian, Z., Zhao, T., Miao, C., Chang, H., *et al.* (2022) Ultralow-Power RRAM with a High Switching Ratio Based on the Large Van Der Waals Interstice Radius of TMDs. *ACS Nano*, **16**, 20445-20456. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.2c06728>
- [3] Bozhayev, F. and Ellmer, K. (2022) Thin Film Transition Metal Dichalcogenide Photoelectrodes for Solar Hydrogen Evolution: A Review. *Journal of Materials Chemistry A*, **10**, 9327-9347. <https://doi.org/10.1039/d2ta01108e>
- [4] Baidoo, J.K., Choi, S.H., Agyapong-Fordjour, F.O., Boandoh, S., Yun, S.J., Adofo, L.A., *et al.* (2022) Sequential Growth of Vertical Transition-Metal Dichalcogenide Heterostructures on Rollable Aluminum Foil. *ACS Nano*, **16**, 8851-8859. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.1c10233>
- [5] Garcia-Esparza, A.T., Park, S., Abroshan, H., Paredes Mellone, O.A., Vinson, J., Abraham, B., *et al.* (2022) Local Structure of Sulfur Vacancies on the Basal Plane of Monolayer MoS<sub>2</sub>. *ACS Nano*, **16**, 6725-6733. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.2c01388>
- [6] Yang, X., Zheng, X., Liu, Q., Zhang, T., Bai, Y., Yang, Z., *et al.* (2020) Experimental Study on Thermal Conductivity and Rectification in Suspended Monolayer MoS<sub>2</sub>. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **12**, 28306-28312. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c07544>
- [7] Li, X., Zhang, Z., Gao, T., Shi, X., Gu, C. and Wu, Y. (2022) Van Der Waals Epitaxial Trilayer MoS<sub>2</sub> Crystals for High-Speed Electronics. *Advanced Functional Materials*, **32**, Article ID: 2208091. <https://doi.org/10.1002/adfm.202208091>
- [8] 王晨, 王承浩, 王琦, 成丁尔, 张大伟. 二氧化钒薄膜制备工艺及其在开关器件的应用研究进展[J]. *光学仪器*, 2021, 43(3): 78-85+94.
- [9] 谢明章, 李留猛, 李明, 叶艳, 张金中, 姜凯, 商丽燕, 胡志高, 褚君浩. 脉冲激光沉积法制备的单层 MoS<sub>2</sub> 薄膜变温光响应研究(英文)[J]. *红外与毫米波学报*, 2021, 40(3): 302-307.
- [10] Kumar, K. and Kaur, D. (2024) A Review on Recent Advancements in the Growth of MoS<sub>2</sub> Based Flexible Photodetectors. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **268**, Article ID: 112736. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2024.112736>
- [11] Li, X. and Zhu, H. (2015) Two-Dimensional MoS<sub>2</sub>: Properties, Preparation, and Applications. *Journal of Materiomics*, **1**, 33-44. <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2015.03.003>
- [12] Ling, Z.P., Yang, R., Chai, J.W., Wang, S.J., Leong, W.S., Tong, Y., *et al.* (2015) Large-Scale Two-Dimensional MoS<sub>2</sub> Photodetectors by Magnetron Sputtering. *Optics Express*, **23**, Article No. 13580. <https://doi.org/10.1364/oe.23.013580>
- [13] Wang, T., Guo, J., Zhang, Y., Yang, W., Feng, X., Li, J., *et al.* (2024) Synthesis of High-Quality Monolayer MoS<sub>2</sub> via a CVD Upstream Deposition Strategy for Charge Capture and Collection. *Crystal Growth & Design*, **24**, 2755-2763. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.3c01369>
- [14] Suleman, M., Lee, S., Kim, M., Nguyen, V.H., Riaz, M., Nasir, N., *et al.* (2022) NaCl-Assisted Temperature-Dependent Controllable Growth of Large-Area MoS<sub>2</sub> Crystals Using Confined-Space CVD. *ACS Omega*, **7**, 30074-30086. <https://doi.org/10.1021/acs.omega.2c03108>
- [15] Wu, Q., Wang, R., Xiong, J., Cai, X., Wu, S., Jiao, J., *et al.* (2024) Transformation from MoO<sub>3</sub> into MoS<sub>2</sub>: Experimental Study on Phase Transition and Energy Band Modulation. *Applied Surface Science*, **659**, Article ID: 159951. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2024.159951>
- [16] Lei, J., Xie, Y., Kutana, A., Bets, K.V. and Yakobson, B.I. (2022) Salt-Assisted MoS<sub>2</sub> Growth: Molecular Mechanisms

- from the First Principles. *Journal of the American Chemical Society*, **144**, 7497-7503. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c02497>
- [17] Saseendran, S.B., Ashok, A., Jayaraj, M.K., Reshmi, R. and Asha, A.S. (2023) Single Step Growth of Vertical MoS<sub>2</sub> Thin Films by Chemical Vapor Deposition for Hydrogen Evolution Reaction. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, **34**, Article No. 1233. <https://doi.org/10.1007/s10854-023-10677-3>
- [18] 武鹏, 谈论, 李炜, 曹立伟, 赵俊博, 曲尧, 李昂. 大面积单层二硫化钼的制备及其光电性能[J]. *物理学报*, 2023, 72(11): 296-302.
- [19] Rommelfangen, J., Redinger, A., Gonzalez-Angulo, M.A., Pareek, D. and Gütay, L. (2025) Influence of Sulfur Vacancies on the High Frequency Phonon Modes of ALD-Grown Monolayer MoS<sub>2</sub>. *Physical Review Materials*, **9**, L121001. <https://doi.org/10.1103/kzhl-5sy6>
- [20] Bhakhar, S., Patel, N.F., Pataniya, P.M., Gupta, S., Solanki, G.K. and Jha, P.K. (2023) Investigation of Electron-Phonon Interaction in Pure and Indium Doped MoS<sub>2</sub> Using Temperature Dependent Raman Spectra. *Surfaces and Interfaces*, **36**, Article ID: 102489. <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2022.102489>
- [21] Durairaj, S., Ponnusamy, K., Shinde, N.B., Eswaran, S.K., Asokan, V., Park, J.B., *et al.* (2021) Oxygen-Driven Growth Regulation and Defect Passivation in Chemical Vapor Deposited MoS<sub>2</sub> Monolayers. *Crystal Growth & Design*, **21**, 6793-6801. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00688>
- [22] Senkić, A., Supina, A., Akturk, M., Gadermaier, C., Maiuri, M., Cerullo, G., *et al.* (2023) Microscopic Investigation of Intrinsic Defects in CVD Grown MoS<sub>2</sub> Monolayers. *Nanotechnology*, **34**, Article ID: 475705. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/acf29b>
- [23] Dong, R., Gong, X., Yang, J., Sun, Y., Ma, L. and Wang, J. (2022) The Intrinsic Thermodynamic Difficulty and a Step-guided Mechanism for the Epitaxial Growth of Uniform Multilayer MoS<sub>2</sub> with Controllable Thickness. *Advanced Materials*, **34**, Article ID: 2201402. <https://doi.org/10.1002/adma.202201402>
- [24] Chong, C., Liu, H., Wang, S. and Yang, K. (2021) First-Principles Study on the Effect of Strain on Single-Layer Molybdenum Disulfide. *Nanomaterials*, **11**, Article No. 3127. <https://doi.org/10.3390/nano11113127>
- [25] Wang, Y., Deng, L., Wei, Q., Wan, Y., Liu, Z., Lu, X., *et al.* (2020) Spin-Valley Locking Effect in Defect States of Monolayer MoS<sub>2</sub>. *Nano Letters*, **20**, 2129-2136. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c00138>
- [26] Abedin, S., Kurtash, V., Mathew, S., Thiele, S., Jacobs, H.O. and Pezoldt, J. (2024) Defects Contributing to Hysteresis in Few-Layer and Thin-Film MoS<sub>2</sub> Memristive Devices. *Materials*, **17**, Article No. 1350. <https://doi.org/10.3390/ma17061350>
- [27] Liu, J., Jin, Y., Lei, B., Zhao, X., Huang, Y., Zhang, L., *et al.* (2024) Studies on Electronic Structure and Optical Properties of MoS<sub>2</sub>/X (X = WSe<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, AlN, and ZnO) Heterojunction by First Principles. *Catalysts*, **14**, Article No. 678. <https://doi.org/10.3390/catal14100678>
- [28] Gu, M., Han, M. and Kim, S. (2024) Electron Transport through the Multiple Sulfur Vacancies in MoS<sub>2</sub>. *Current Applied Physics*, **57**, 20-25. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2023.10.008>