文章编号:1671-7872(2026)05-0551-14



苏贤礼 武汉理工大学研究员,博士生导师,国家级高层次青年人才,中国材料研究学会热电材料与器件及应用分会理事。博士毕业于武汉理工大学,曾赴美国西北大学担任访问学者。长期从事热电材料的应用基础研究,研究方向涵盖热电材料的设计与制备、微结构调控、电子-声子动力学过程及其对电热传输性能的影响机制。迄今在 *Nature*、*Nature Communications*、*Science Advances*、*Energy & Environmental Science*、*Advanced Materials*、*Advanced Energy Materials*、*Journal of the American Chemical Society*、*Angewandte Chemie International Edition* 等国际期刊发表学术论文200余篇,论文总被引逾10 000次,H指数56。主持国家重点研发计划、国家自然科学基金等国家级/省部级项目10余项。获湖北省技术发明一等奖1项、中国建筑材料科学技术奖基础研究一等奖1项及该奖基础研究二等奖1项。

二硫化钼层间耦合调控及电热输运性质研究进展

杨 振[1],韩淑君[2],苏贤礼[2]
(1. 德州学院 化学化工学院,山东 德州 253000;2. 武汉理工大学 材料复合新技术国家重点实验室,武汉 430070)

摘要: 二硫化钼(MoS_2)作为过渡金属硫族化合物的典型代表,凭借优异的电学、光学和热学性能,在电子器件、热管理和能源转换等领域展现出广阔的应用前景。MoS_2层内由强共价键结合,层间通过弱范德华力堆叠,这一结构特征使层间耦合成为调控其物理性质的关键自由度。层间耦合不仅影响能带结构与载流子输运行为,还通过调制声子色散和散射过程显著影响晶格热输运性质,因而成为连接微观原子构型与宏观电热性能的核心纽带。本文围绕层间耦合工程对MoS_2电子-声子输运行为的调控作用,系统梳理层间耦合的物理机制,总结其耦合强度的主要表征方法,归纳不同调控策略对层间耦合状态的作用机制,并分析层间耦合对电子性质和声子行为的影响规律。本综述旨在阐释层间耦合实现电热输运协同调控的内在逻辑,为MoS_2基功能器件的性能优化及产业化应用提供理论支撑与设计思路。

关键词: 二硫化钼;层间耦合;表征方法;电输运;热输运;热电性能
中图分类号: O 469 **文献标志码:** A **doi:** 10.12415/j.issn.1671-7872.26123

收稿日期: 2026-08-10;**修回日期:** 2026-08-26
基金项目: 国家重点研发计划项目(2024YFF0505900);国家自然科学基金项目(W2412066)
作者简介: 杨振(1996—),男,山东德州人,博士,讲师,主要研究方向为二维半导体材料的电热输运性能优化。
通信作者: 苏贤礼(1983—),男,湖北武汉人,博士,教授,博士生导师,主要研究方向为热电材料的应用基础。
引文格式: 杨振,韩淑君,苏贤礼. 二硫化钼层间耦合调控及电热输运性质研究进展[J]. 安徽工业大学学报(自然科学版),2026,43(5):551-564.
Citation: YANG Z, HAN S J, SU X L. Research Progress on Interlayer Coupling Modulation and Electronic-thermal Transport Properties of Molybdenum Disulfide[J]. Journal of Anhui University of Technology (Natural Science), 2026, 43(5):551-564.

Research Progress on Interlayer Coupling Modulation and Electronic-thermal Transport Properties of Molybdenum Disulfide

YANG Zhen[1], HAN Shujun[2], SU Xianli[2]

(1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Dezhou University, Dezhou 253000, China; 2. State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Processing, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: Molybdenum disulfide (MoS_2), a representative transition metal dichalcogenide, has attracted extensive research interest owing to its exceptional electronic, optical, and thermal properties, offering great potential for applications in next-generation electronic devices, thermal management systems, and energy conversion technologies. Structurally, MoS_2 consists of strongly bonded S–Mo–S layers through in-plane covalent interactions, while adjacent layers are held together by weak van der Waals forces. This unique layered architecture provides an additional structural degree of freedom, where interlayer coupling plays a critical role in regulating the intrinsic physical properties of MoS_2. Interlayer coupling not only governs the electronic band structure and carrier transport behavior but also strongly influences phonon dispersion, scattering processes, and lattice thermal transport. Therefore, interlayer coupling serves as a critical link between atomic-scale structural configurations and macroscopic electronic-thermal performance. This review summarized recent advances in interlayer couplingmodulation and its effects on electron-phonon transport in MoS_2. The fundamental mechanisms of interlayer interactions were first introduced, followed by a comprehensive overview of advanced characterization techniques for evaluating interlayer coupling strength and structural evolution. Subsequently, various strategies for engineering interlayer coupling were discussed. The influence of interlayer coupling on electronic structures, carrier transport, phonon dynamics, and thermoelectric performance was further analyzed. Finally, the challenges and future perspectives of interlayer coupling engineering toward high-performance MoS_2-based functional devices were presented. This review provides insights into the intrinsic relationship between interlayer coupling and electron-phonon transport regulation, offering fundamental understanding and design principles for the development of advanced two-dimensional materials and their practical applications.

Keywords: molybdenum disulfide; interlayer coupling; characterization methods; electronic transport; thermal transport; thermoelectric performance

2004 年石墨烯的发现开启了二维层状材料的研究热潮, 这类材料兼具原子级厚度与丰富物理性质, 迅速成为凝聚态物理和材料科学的前沿[1−2]。过渡金属硫族化合物 (transition metal dichalcogenides, TMDs) 是其中备受关注的一大类二维材料, 化学式为 MX_2(M 为过渡金属, X 为硫族元素)[3]。与石墨烯缺乏本征带隙不同, TMDs 通常具有明显的半导体特性、较强的自旋轨道耦合效应和谷自由度, 在低功耗电子器件与新型信息技术领域展现出独特优势[4]。其中, MoS_2 凭借优异的力学、光学、电学和热学性质, 以及在催化、储能、电子器件等领域的广阔应用前景, 成为研究热点[5−8]。

MoS_2 由 S–Mo–S 三明治结构单元组成, 层间以弱范德华力结合[9−10], 赋予材料稳定的层状框架与可调控的物性空间, 通过改变层间距离、相对位置及堆垛方式可实现性能调节。尽管层间相互作用较弱, 但其对宏观性质影响显著: 电子结构方面, 层间轨道杂化可改变电子波函数分布, 进而调节能带、带隙及载流子输运行为[11]; 声子行为方面, 层间耦合可影响低频层间振动模式与声子传播, 改变晶格热输运特性[12]。此外, 层间电荷转移、界面极化及电子–声子耦合等机制进一步丰富了物性调控的维度。因此, 如何理解并利用层间耦合效应, 实现电子态与声子态的协同调控, 已成为该领域的重要科学问题。

近年来, 转角工程、应变工程、电场调控、压

力调控、元素掺杂及原子插层等多种调控策略被用于调控层间耦合[13−14]。这些方法通过改变层间距离、局域晶格结构与电子环境, 实现对电子结构及声子输运的调节。如扭转二维材料可形成莫尔超晶格, 引入新的电子态与声子模式[15−16]; 元素掺杂能改变局域电子结构并增强缺陷散射, 协同优化载流子浓度与热导率[17−18]; 插层工程则可调节层间间距, 诱导结构相变或电子态重构[19−22]。上述策略路径各异, 但均以层间耦合为共同调控枢纽。基于此, 本文以层间耦合工程调控 MoS_2 电子与声子输运行为为主线, 梳理其物理机制, 归纳不同调控策略及其作用规律, 并分析层间耦合对电子结构和热输运性质的影响, 以期为 MoS_2 在电子器件、热管理和能源转换领域的应用提供设计思路。

1　MoS_2 的本征层间耦合与基础物性

尽管层间作用远弱于层内共价键, 但二维材料原子级厚度使层间相互作用可显著影响电子波函数分布、晶体对称性及声子传播行为。因此, 层间耦合并非简单的结构连接, 而是决定二维材料物理性质的重要调控因素。

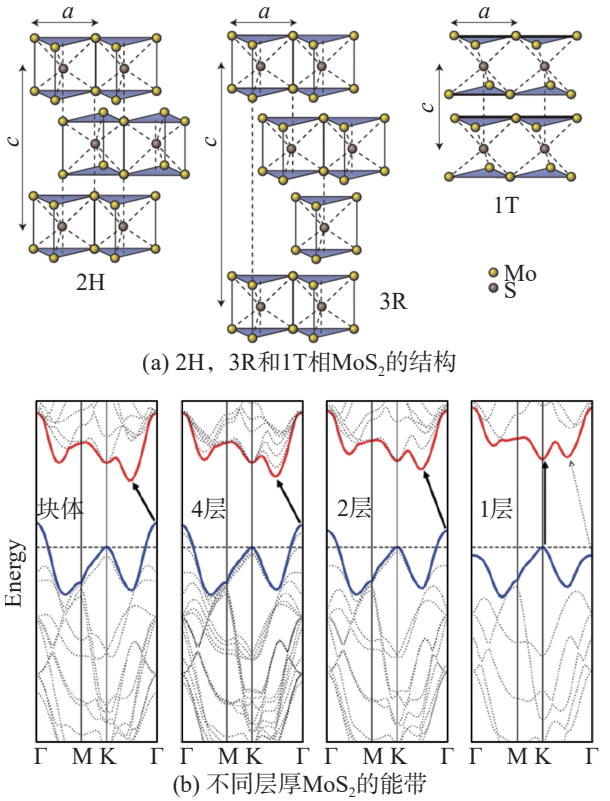
1.1　晶体结构与堆垛构型

MoS_2 的常见物相包括 1T 相、2H 相和 3R 相, 如图 1(a)[23] 所示。2H 相属六方晶系, AB 堆垛, 层间反平行排列 (旋转 60°), 具中心对称性, 空间群为 P63/mmc。3R 相属菱方晶系, ABC 堆垛, 层间平行排列 (旋转 0°), 反演对称性破缺, 空间群为 R3m。1T 相中 Mo 原子位于 S 原子八面体中心。2H 相为室温下最稳定结构, 3R 与 1T 相为亚稳态。

2H 与 3R 相均为层内 S–Mo–S 三棱柱配位, 差异仅在于层间堆垛方式[24], 却导致对称性、电极化及非线性光学等性质显著不同[25]。3R 相因非中心对称结构, 本征状态即具备二次谐波产生活性, 并在滑移铁电性、谷电子学等方面具有优势[26−31]。2H 相相邻两层间沿 c 轴平移 (1/3, 2/3, 1/2) 形成 AB 堆垛; 3R 相邻层平移 (1/3, 2/3, 1/3) 和 (2/3, 1/3, 2/3) 形成 ABC 堆垛。这一堆垛差异导致两相在布里渊区折叠和能带结构上产生细微但关键的差异。

1.2　能带结构与带隙演变

本征状态单层 MoS_2 的导带底与价带顶均位于布里渊区 K 点, 形成直接带隙, 带隙值约1.90 eV。随层数增加, 层间耦合使导带底从 K 谷转移至 Q 谷 (位于 Γ−K 路径上), 价带顶从 K 谷转移至Γ 谷, 发生直接–间接带隙转变, 如图 1(b)[32] 所示。带隙由单层的约 1.90 eV 逐渐减小至双层的约 1.65 eV、三层的约 1.55 eV, 直至块体的约 1.30 eV[31]。



(a) 2H，3R和1T相MoS_2的结构

(b) 不同层厚MoS_2的能带

图1　MoS_2 的结构和能带[23, 32]

Fig. 1　Crystal structures and band structures of MoS_2[23, 32]

该转变的物理本质在于不同能谷对层间耦合的响应差异。K 谷的电子态面内局域性较强, 层间波函数重叠较小, 对层间耦合相对不敏感; 而 Q 谷和 Γ 谷的电子态沿 c 轴方向延伸更显著, 层间波函数重叠更大, 受层间耦合影响更为明显。因此, 层间耦合增强会优先导致 Γ 谷价带上移、Q 谷导带下移, 使间接带隙成为主导。2H 相与 3R 相层内结构相同, 能带特征基本一致, 主要差异在于 3R 相因反演对称性破缺, K 和 K′谷的自旋劈裂不再简并, 表现出本征的自旋–谷极化特性[33]。

1.3　声子色散特征

在本征状态下, 2H 相与 3R 相声子色散特征相似: 面内纵向声学 (LA) 支和面内横向声学 (TA) 支在 Γ 点附近呈线性色散, 面外横向声学 (ZA) 支呈二次色散, 如图 2 所示[34]。因层间范德华相互作用较弱, 声子分支在多数波矢处呈现简并, 反映了弱层间耦合条件下各层声子振动模式的相对独立性。2H 相因 AB 堆垛具有二重简并特征, 3R 相因 ABC 堆垛具有三重简并特征, 但两相声学支截止频率和声子带隙几乎一致。通常, 层间距离越小、层间波函数重叠越大, 声学支声子的频率越高。

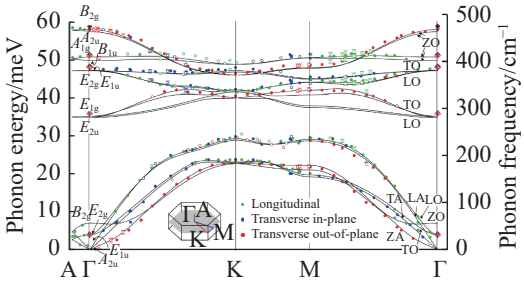


图2 $2H–MoS_2$ 的声子色散关系[34]

Fig. 2 Phonon dispersion relation of $2H–MoS_2$[34]

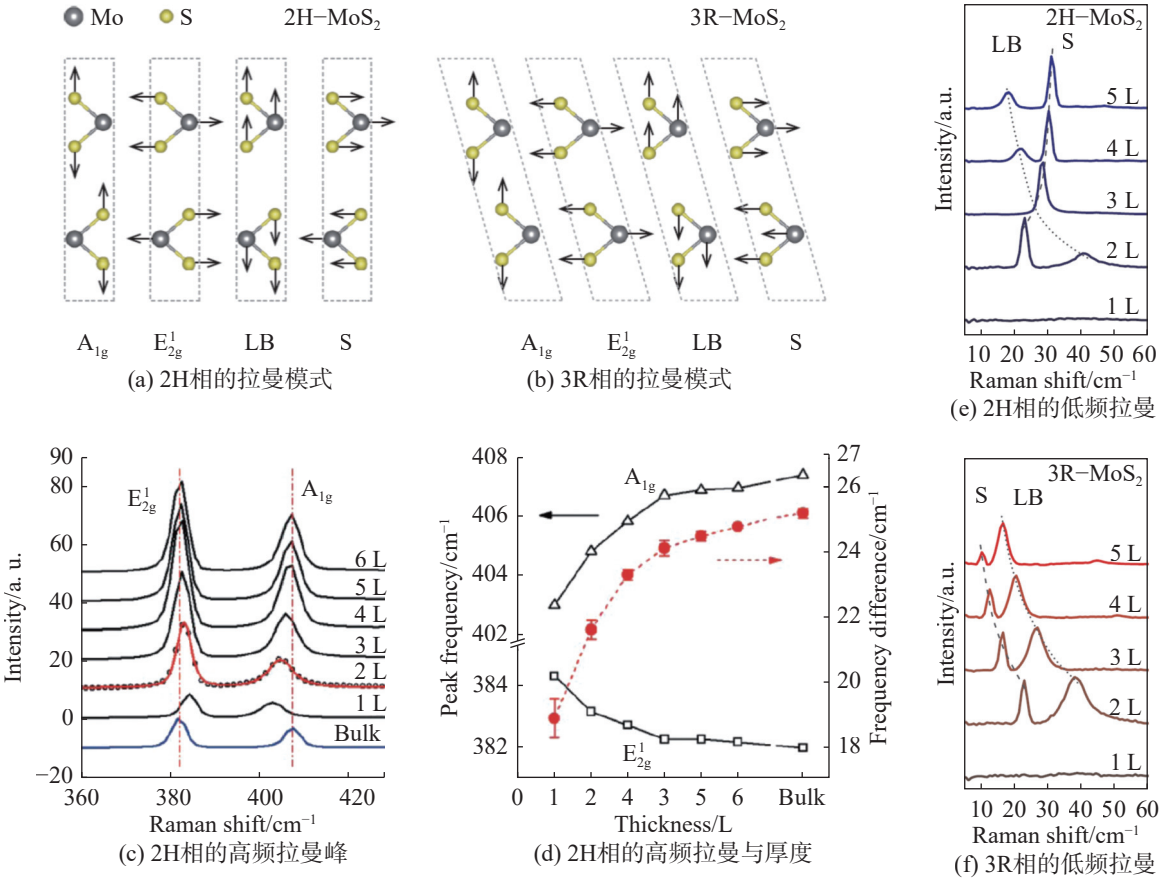
上述本征能带结构与声子色散是层间耦合调控效应的基线。当扭转角、掺杂、应变或电场等调控手段改变层间耦合强度时，能带与声子色散将相对本征值发生偏移，其方向与幅度可定量反映层间耦合的变化程度。因此，本征物理图像是理解层间耦合状态影响材料性质及输运性能的基础。

2 层间耦合的表征方法与理论描述

层间耦合直接影响晶格振动、能带结构和对称性，这些变化可通过光谱学与显微学技术加以探测。MoS_2 层间耦合研究中，常用的表征手段主要有拉曼光谱、光致发光光谱、二次谐波产生及透射电镜等。

2.1 拉曼光谱法

拉曼光谱是表征层间耦合最常用且信息最丰富的手段。MoS_2 的振动模式按能量范围可分为高频层内模式 (>300 cm^{-1}) 与低频层间模式 (<50 cm^{-1})，两者对层间耦合的响应存在本质区别，构成互补的表征维度。图 3(a)(b) 分别展示了 2H 相和 3R 相 MoS_2 典型的振动模式。



(a) 2H相的拉曼模式 (b) 3R相的拉曼模式 (e) 2H相的低频拉曼

(c) 2H相的高频拉曼峰 (d) 2H相的高频拉曼与厚度 (f) 3R相的低频拉曼

图3 MoS_2 的拉曼光谱[22, 35]

Fig. 3 Raman spectra of MoS_2[22, 35]

高频层内模式主要包括面内 E^1_{2g} 和面外 A_{1g} 模式。A_{1g} 模式涉及层间 S 原子的面外相对振动，对层间恢复力敏感；E^1_{2g} 模式涉及面内 Mo—S 键的伸缩振动，对层间耦合相对不敏感。因此，两者的频率差 $\Delta\omega$ 随层数增加而增大，该特征已广泛用于判定 MoS_2 层厚，如图 3(c)(d) 所示[35]。

低频层间模式是表征层间耦合更为直接和定量的探针。这些模式对应于相邻层间的相对剪切 (shear mode, S) 和呼吸 (breathing mode, B) 振动，其频率由层间力常数决定，频率越高代表层间耦合越强[22](图 3(e)(f) 分别对应 2H 相和 3R 相)。低频拉曼光谱不仅能定量耦合强度，还能有效区分 2H 和 3R

堆垛构型。Van 等[36] 发现, 2H 相的呼吸模式频率比 3R 相高出数个波数, 表明 2H 相具有稍强的层间晶格耦合; 而剪切模式的拉曼响应则呈现互补特征: 2H 相中最强的剪切模式对应最高频分支, 3R 相中则对应最低频分支。这种互补光谱差异使得通过低频拉曼即可快速辨别堆垛构型。结合空间分辨成像, 低频拉曼光谱还可用于探测少层 MoS_2 中不同堆垛构型的空间分布及层间相互作用的变化。

2.2　光致发光光谱法

光致发光 (photo luminescence, PL) 光谱通过探测层间耦合对能带结构的影响, 间接表征层间耦合状态。单层 MoS_2 为直接带隙半导体, 具有强 PL 发射; 多层 MoS_2 因层间耦合导致间接带隙, PL 强度显著猝灭, 峰位随层数增加红移 (图 4(a))[37],这是层间耦合增强的直接证据。PL 光谱对层间堆垛构型也高度敏感。扭转角体系中, PL 峰位和强度的变化可反映层间耦合随扭转角的演变。Plechinger 等[38] 发现, 即使在电子态退耦合的人工结构中, 层间仍存在共振能量转移, 并表现为有效的发光猝灭。该结果说明 PL 光谱不仅能反映能带变化, 还能揭示层间激子动力学和能量转移过程。此外, PL 光谱可用于表征层间耦合的电场响应。Zhang 等[12] 在 3R–MoS_2 的双电层晶体管中, 通过 PL 光谱监测静电掺杂对层间耦合的影响, 发现随掺杂浓度增加, PL 峰位及强度呈规律性变化, 反映了层间耦合增强所致的能带结构重构。

2.3　二次谐波产生光谱法

二次谐波产生 (second harmonic generation, SHG) 是一种二阶非线性光学过程, 对结构对称性极为敏感, 是表征层间耦合和堆垛对称性的有力工具。中心对称的 2H 相双层 MoS_2 在本征状态下不产生 SHG 信号; 而非中心对称的 3R 相由于反演对称性破缺, 可产生强烈 SHG 响应 (图 4(b))[39]。因此, SHG 信号的有无和强度可直接反映层间堆垛对称性, 其增强信号可作为非中心对称堆垛的指纹特征。

基于这一对称性判据, SHG 被广泛用于探测扭转角体系中层间耦合随角度的演变, 通过 SHG 显微镜可快速分辨不同形状晶体的对称性和多畴晶相。在 AA 堆垛中, SHG 信号作为非中心对称堆垛的增强指纹被观测到。在人工堆垛的 MoS_2 双层中, SHG 与拉曼光谱、PL 测量的结合可用于判定层间耦合程度。此外, SHG 还可用于探测扭转 WSe_2/WSe_2 和 WSe_2/MoS_2 异质结中的层间耦合角度依赖性。在 MoS_2/CrOCl 异质结中, 不对称 SHG 信号的出现表明晶格对称性因较强层间耦合作用而发生改变[40]。

SHG 的偏振依赖性还可用于定量提取层间耦合引起的面内应变信息。在多场耦合诱导的 3R–MoS_2 中, 面内应变打破了电子云的三重旋转对称性, 在 armchair 方向产生净极化, SHG 偏振花样从六重对称变为变形六重对称, 如图 4(c) 所示[39]。通过拟合 SHG 偏振花样可获得面内应变的具体数值[41], 这是其他表征手段难以实现的定量能力。

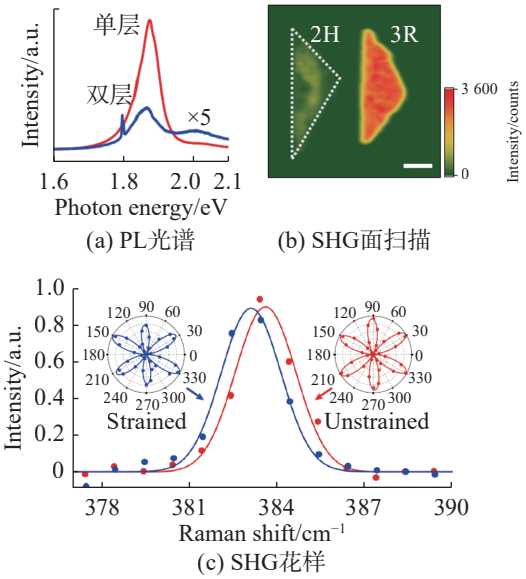


图4　MoS_2 层间耦合的几种表征手段[37, 39]

Fig. 4　Several characterization techniques for interlayer coupling in MoS_2[37, 39]

2.4　X 射线光电子能谱法

X 射线光电子能谱 (X ray photoelectron spectroscopy, XPS) 通过探测内层电子结合能位移, 间接反映层间耦合引起的化学环境变化。层间耦合的增强或减弱会改变原子间电荷转移及化学键强度, 体现为核心能级结合能的位移。

在界面体系中, XPS 是揭示层间化学键合本质的关键手段。MoS_2/Au 和 MoS_2/Pd 界面形成弱共价键, XPS 谱中 S–Au 和 S–Pd 峰位的差异反映了界面处掺杂浓度的不同[42]。在 MoS_2/GaN 异质结中, 高分辨 XPS 揭示了与局域电荷转移相关的界面偶极, 确定了 MoS_2 与 GaN 之间的价带和导带偏移[43]。在原子层沉积的 MoS_2 单层/SiO_2 界面研究中, XPS 结合 X 射线吸收光谱揭示了范德华相互作用对 MoS_2 电子结构的影响。

在置换掺杂体系中, XPS 可灵敏反映层间耦合的化学调控。以 Nb 掺杂 MoS_2 为例, 掺杂后 S 2p, Mo 3d 和 Nb 3d 结合能的位移直接反映了化学键强

度变化及原子间电荷转移[17], 为层间耦合的化学调控提供了实验证据。XPS 对化学环境变化极为敏感, 其结合能位移的精细分析可区分不同掺杂位点和浓度对层间力常数的影响。

2.5 结构表征法

高分辨透射电子显微镜 (high-resolution transmission electron microscope, HRTEM) 和扫描透射电子显微镜 (scanning transmission electron microscope, STEM) 可在原子尺度观察层间堆垛构型和层间距。通过高角环形暗场扫描透射电子显微镜 (HAADF–STEM) 图像可分辨 2H 相 (六边形中心无原子) 和 3R 相 (六边形中心有原子) 的原子排列差异, 结合选区电子衍射 (selected area electron diffraction, SAED) 可确认堆垛周期。几何相位分析 (geometric phase analysis, GPA) 可定量提取层间应变分布, 反映层间耦合的非均匀性。

X 射线衍射 (X ray diffraction, XRD) 可宏观表征层间距和堆垛信息, 通过 (002) 衍射峰位移可计算层间距变化, (101) 峰宽化可反映堆垛层错密度, Warren 判据表明其源于层间平移无序导致满足布拉格衍射条件的原子数减少。对于扭转双层体系, XRD 极图可表征面内取向分布, 获取扭转角信息。

2.6 第一性原理计算

第一性原理计算可从理论上定量描述层间耦合, 为实验光谱提供微观解释与定量标度。通过密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 计算层间剥离能、层间力常数、声子色散和能带结构随层间距的变化, 可深入理解层间耦合的物理本质。其中, 原子间力常数 (interatomic force constant, IFC) 的迹可作为层间化学键强度的定量度量: IFC 迹为正值对应范德华“anti-spring”性质 (弱层间耦合), 为负值对应强化学键合 (强层间耦合), 其绝对值大小直接反映层间力常数强度[11, 18]。声子谱计算可获得层间剪切和呼吸模式的频率, 与实验拉曼光谱直接对比, 建立计算与实验间的定量桥梁; 能带结构计算可揭示层间耦合对能谷位置、有效质量和带隙的影响, 与 PL 和角分辨光电子能谱 (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) 实验对照。

2.7 分子动力学模拟

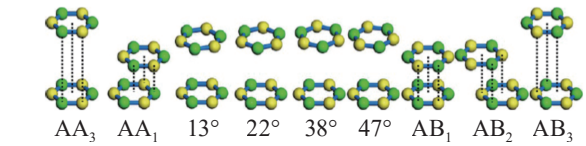
与第一性原理计算侧重电子基态不同, 分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟通过求解牛顿运动方程追踪原子在有限温度下的运动轨迹, 适于研究层间耦合的动态行为和非平衡过程。MD 模拟可系统考察层间力常数和振动模式频率随温度的演化: 温度升高时, 层间范德华作用的非谐性增强, 声子频率软化, 层间耦合强度随之衰减。MD 模拟可在原子尺度追踪扭转双层 MoS_2 中莫尔超晶格的形成和演化[44]。小扭转角 (<5°) 时, 层间原子为降低局域失配能而发生显著晶格重构, 形成大面积 AA 堆垛畴区, 耦合局域增强; 大扭转角 (>10°) 时, 晶格重构受限, 层间耦合趋于空间均匀但整体较弱。此外, MD 模拟还可构建层间随机旋转堆垛的大尺度模型, 研究不同堆垛构型组合对面外声子输运的影响[45]。通过声子态密度和参与率, 可定量表征耦合强度的空间涨落, 进而判断非均匀层间耦合导致局域化的临界条件。MD 模拟与第一性原理计算的结合, 已成为研究层间耦合动态行为的标准范式: 第一性原理提供力常数与势能面参数, MD 模拟将其外推至更大尺度与更长时域。

3 层间耦合的调控策略

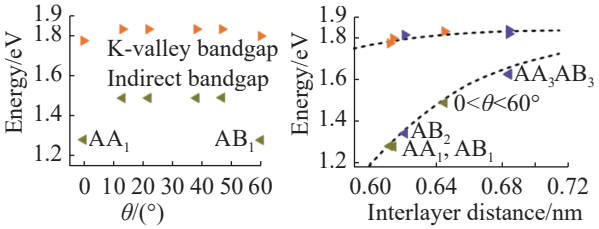
MoS_2 层间耦合的物理根基在于波函数交叠与范德华力的消长, 二者共同决定其能带结构和激子行为。调控层间耦合, 本质上就是干预这一平衡。目前发展的调控手段主要有以下几种。

3.1 扭转角工程

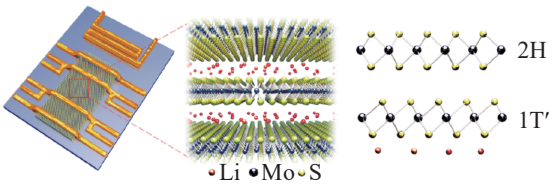
将两层 MoS_2 扭转一定角度堆垛, 可形成纳米级周期的莫尔超晶格。层间耦合强度随扭转角呈非单调变化: AA 堆垛 (0°) 和 AB 堆垛 (60°) 时耦合最强, 高频拉曼振动模式的差值 $\Delta\omega$ 最大, 间接带隙红移最显著; 其他角度下耦合较弱, 带隙变化趋于平缓[10]。这一演变的物理根源在于空间位阻效应: 不同堆垛构型下两层原子面内相对位置不同, 层间距发生周期性变化。AA 和 AB 堆垛时原子间排斥力较小, 层间距更小, 波函数重叠更大, 耦合更强 (图 5(a)~(c))。



(a) 不同转角的双层MoS_2的结构示意图



(b) 带隙与转角的关系 (c) 带隙与层间距离的关系



(d) Li插层促进2H相向1T'相转变

图5　转角和插层对层间耦合状态的影响[46, 48]

Fig. 5　Effects of twist angle and intercalation on interlayer coupling states[46, 48]

扭转角同时决定莫尔超晶格周期和局域堆垛构型的空间分布, 形成对层间耦合的周期性调制[44]。小角度范围 (2°~6°) 内晶格重构效应显著, 耦合随扭转角的变化更加复杂。低频拉曼振动模式对此更敏感, 频率变化可达 8 cm^{-1}, 强度变化约 5 倍[15]。

3.2　插层调控

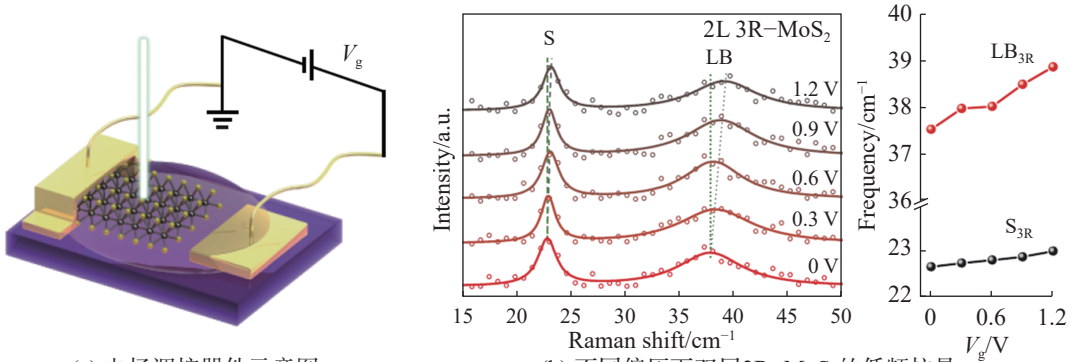
MoS_2 层间的范德华间隙为外来原子或分子提供了插层空间。插层对层间耦合的调控通过 2 个途径实现: 插入的原子或分子占据层间位置, 增大层间距, 削弱范德华作用; 插入原子与 MoS_2 层间发生电荷转移, 改变层间电荷分布, 进而影响静电相互作用。以 Li 插层为例, Li 离子占据层间 S–S 四面体位置, 向 MoS_2 层注入电子[47]。电子掺杂使 2H 相导带底的电子–声子耦合不稳定性, 导致 2H 相结构弛豫为 1T 相。这一结构相变本质上是层间电荷转移诱导的层间耦合状态重构, 如图 5(d) 所示[46, 48]。插层浓度决定层间距增大幅度与电荷转移量, 可作为连续调节层间耦合强度的有效参量。

3.3　压力调控

压力可直接改变层间距, 是调控层间耦合最直接的物理手段[49−51]。随着压力升高, 层间距减小, 波函数重叠增加, 层间耦合增强。超过 20.0 GPa 时, MoS_2 发生从 $2H_c$ 相到 $2H_a$ 相的一级结构相变, 层间堆垛方式和键合状态随之改变, 并伴随半导体态向金属态的转变[52]。这一相变压力具有厚度依赖性: 块体 MoS_2 的临界压力约 19.0 GPa, 多层 (厚度减少) 时升至 25.6 GPa, 理论计算显示减薄至两层时进一步增至 36.0 GPa[53]。临界压力随厚度减薄而升高的趋势表明, 层间排斥力随厚度减少而降低。

3.4　电场调控

外加电场通过改变层间电荷分布实现对层间耦合的调控。Zhang 等[12] 发现, 3R–MoS_2 中随静电掺杂浓度增加, 载流子电子云逐步扩展至范德华间隙, 层间耦合增强, 层间拉曼振动模式发生蓝移 (图 6)。Dandu 等[54] 对扭转角双层 MoS_2 施加栅压, 观察到莫尔激子振荡强度的电可调性, 并发现共振拉曼散射因莫尔激子–声子耦合同样具有电可调性。



(a) 电场调控器件示意图　　(b) 不同偏压下双层3R−MoS_2的低频拉曼

图6　静电掺杂对 3R–MoS_2 的低频拉曼模式的影响[12]

Fig. 6　Effect of electrostatic doping on the low-frequency Raman modes of 3R–MoS_2[12]

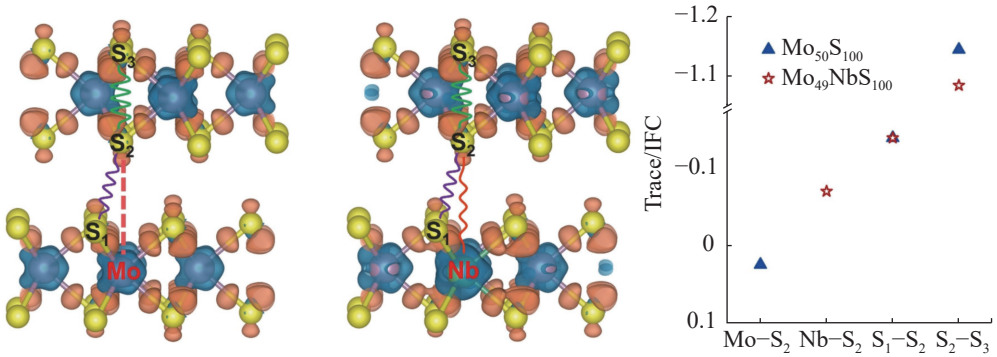
电场还可显著改变结构相变的动力学势垒。第一性原理计算表明, 0.1 V/nm 的电场可使 2H 相向 3R 相转变的过渡态势垒显著降低[55]。其机制在于: 电场使过渡态局部 1T 结构的 电子积聚, 降低了该结构的不稳定性, 从而加速相变过程。这表明电场不仅通过热力学途径改变层间耦合的平衡态, 还通过降低原子重排能垒的动力学途径施加影响。

3.5　置换掺杂

与物理调控手段不同, 置换掺杂通过化学方法直接改变层间化学键合状态, 是一种更为根本的调控策略。不同元素电负性差异引起掺杂后电荷重新分布, 进而改变层间原子间力常数 (interatomic force constant, IFC) 的大小和符号。

以 2H–MoS_2 中 Nb 置换掺杂为例, Nb 的电负性 (1.60) 低于 Mo(2.16), 掺杂后电子倾向于从 Nb 原子向邻近 S 原子转移 (图 7(a) (b))[17]。这一电荷重分布使层间 Nb—S 键的 IFC 迹从正值 (对应范德华 “anti-spring” 性质) 变为负值, 绝对值增大约 3 倍, 表明层间相互作用从弱范德华力向强化学键合转变, 如图 7(c) 所示。在 3R–MoS_2 中, 本征 ABC 堆垛导

致层间电荷分布非对称, Nb 掺杂的影响更加复杂: 掺杂层与邻近层之间键合增强, 而非掺杂层之间键合减弱[18]。这种增强与减弱共存的现象, 反映出掺杂对层间力常数的非均匀调制。



(a) 本征的变形电荷密度 (b) 掺杂2H相的变形电荷密度 (c) 原子间力常数

图7 Nb 掺杂对 2H–MoS_2 电荷分布和原子间力常数的影响[17]

Fig. 7 Effects of Nb doping on charge distribution and interatomic force constants in 2H–MoS_2[17]

3.6 异质结工程

将 MoS_2 与其他二维材料构筑范德华异质结, 可在界面处引入额外的层间耦合通道[56−58]。异质结中的层间耦合由界面两侧材料的电子亲和能差异和晶格匹配程度共同决定。界面电荷转移在 MoS_2 层中引入载流子掺杂, 同时界面处声子模式的杂化会改变界面热输运特性。异质结的层间耦合强度可通过选择不同配对材料和堆垛取向进行调节。相比同质结, 异质结提供更丰富的层间耦合参数空间, 但也面临界面质量、晶格失配及热力学稳定性等额外约束。

3.7 多场协同调控

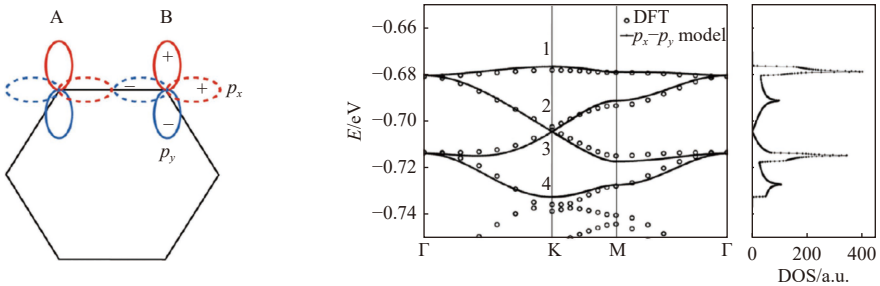
除上述单一调控手段外, 多场耦合为层间耦合调控提供了新维度。放电等离子烧结 (spark plasma sintering, SPS) 可同时施加电场、压力场和温度场, 在 60 MPa 和 1 573 K 的条件下实现 MoS_2 由 2H 相到 3R 相的相变, 该条件远低于传统高压实验所需的 5 GPa 和 1 773 K[55]。多场耦合的核心作用在于: 温度、压力和电场的协同升高使 2H 相和 3R 相之间的吉布斯自由能差发生符号翻转, 为层间堆垛方式的重排提供热力学驱动力; 同时, 电场显著降低过渡态势垒, 加速层间剪切与原子重排的动力学过程。此外, 相变后 3R 相中面内应变打破电子云的三重旋转对称性, 在 armchair 方向产生净极化, 电场可进一步迫使极化方向与电场方向对齐, 实现了层间耦合状态与面内取向的耦合调控。

4 层间耦合与电输运调控

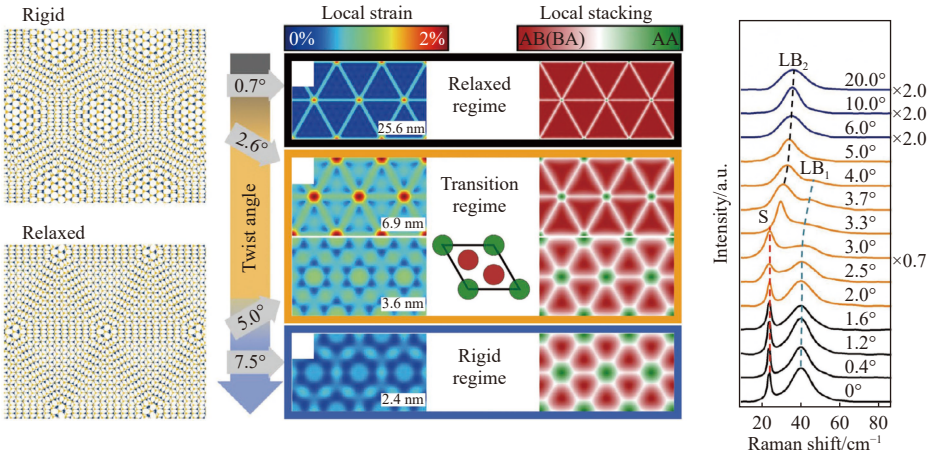
电子输运性质是二维材料实现电子器件应用的基础, 而层间耦合则是其区别于传统半导体的关键结构变量。该耦合作用从电子结构、载流子动力学 (浓度、有效质量及散射行为) 全面调控输运过程, 为低功耗电子器件提供了超越化学组分的新型调节途径。厘清层间构型与电子输运的内在联系, 是实现 MoS_2 性能优化的核心科学问题。

4.1 能带结构的层间耦合调制

层间耦合强度直接决定 MoS_2 的能带结构, 是理解其电输运性质变化的物理基础。转角对能带结构的调控, 催生了诸多新奇量子态。van der Zande 等[59] 发现, 转角通过改变两层硫原子的相对位置调节层间距, 进而影响 Γ 点价带顶的能级位置, 显著调控了双层 MoS_2 的电子结构。Xian 等[60] 在小角度极限下观察到近乎无色散的超平电子能带, 如图 8(a) 所示, 其形成源于莫尔势与破坏性干涉的协同作用。该研究进一步预言, 当系统处于 1/4 填充时, 可能涌现出关联绝缘态、多种轨道序和磁序, 甚至在量子涨落下出现量子自旋液体等物态, 为探索强关联物理提供了全新平台。



(a) 转角MoS_2中的电荷分布和能带结构



(b) 转角MoS_2中的晶格弛豫和低频拉曼声子振动模式的变化

图8　转角结构中的能带结构和声子振动模式[44, 60]

Fig. 8　Band structures and phonon vibrational modes in twisted structures[44, 60]

应变对能带结构的调控同样遵循层间耦合路径。双轴压缩应变下, 层间距减小, 层间耦合增强, 能带杂化程度加剧, 带隙相应变化。在 MoS_2/Au 金属接触体系中, 拉伸应变可降低肖特基势垒高度, 促进电子从 Au 向 MoS_2 转移, 实现电子掺杂, 使费米能级向导带底移动[61]。反之, 层间距增大时层间电荷转移减少, 费米能级向高能态移动[62]。可见, 转角与应变均通过层间距调制能带结构。

4.2　载流子散射与迁移率的层间耦合效应

层间耦合通过改变电子–声子相互作用强度和散射环境, 影响载流子弛豫时间。Quan 等[44] 发现, 在不同扭转角范围 (弛豫区 0°~2°、重构区 2°~6°、刚性区>6°) 内, 层间耦合状态的差异导致声子重整化行为截然不同, 如图 8(b) 所示。重构区内, 层间耦合的强非均匀性引发声子模式超强耦合, 声子谱变化直接改变电子–声子耦合矩阵元和散射相空间。应变对载流子散射的影响同样以层间耦合为中介: 层间距变化改变界面声子模式匹配条件, 进而影响电子–声子散射强度。面外压缩应变下, 层间耦合增强, 声学支声子硬化, 声子分支的贡献权重随之改变。在 MoS_2/WS_2 异质结中, 4% 拉伸应变可抑制界面电荷转移动力学, 改变能带对齐方式[62]。

综合来看, 层间耦合对散射机制的影响体现在 3 个层面: 改变声子频率、群速度和态密度, 直接影响电子–声子散射强度; 重构能带色散, 调节散射相空间和跃迁选择定则; 莫尔超晶格和堆垛缺陷等引入额外散射势, 可诱导弱局域化或反局域化效应。

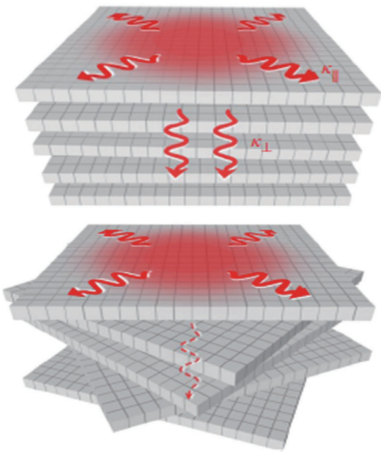
5　层间耦合与热输运调控

热输运性质是决定二维材料在热管理、能源转换及热电应用中表现的关键因素。与金属和传统半导体不同, 二维材料的各向异性晶体结构使其热传导受层内强共价键与层间弱范德华力的共同制约。

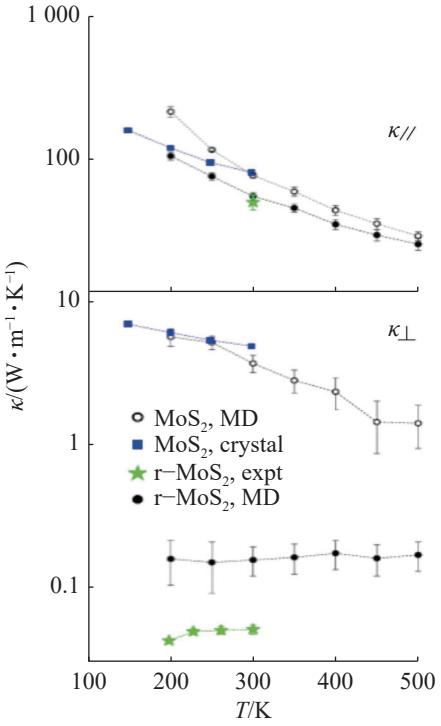
5.1　热导率各向异性的层间耦合调控

MoS_2 作为典型二维半导体, 其热输运性质具有显著的层数和方向依赖性。层内 Mo—S 键合较强, 层间仅靠范德华力结合, 导致热导率呈现强各向异性。Jiang 等[63] 测试了 80~300 K 范围内块体 2H–MoS_2 的面内与面外热导率: 80 K 时分别约为 300, 6 $W•m^{-1}•K^{-1}$, 300 K 时分别约为 80, 5 $W•m^{-1}•K^{-1}$。

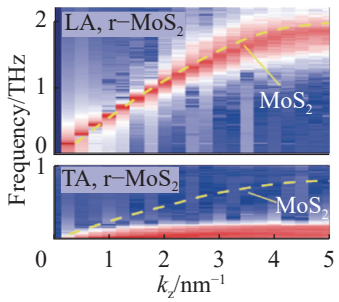
这种各向异性还具有显著可调谐性。Zhu 等[64] 通过在块体 2H–MoS_2 层间插入 Li 原子诱导混序结构, 进一步增强了热导率的各向异性。Kim 等[45] 利用层间随机旋转的 MoS_2 设计, 使面外声子显著软化且散射增强, 面外热导率 (κ) 急剧降至 57 $mW•m^{-1}•K^{-1}$ (图 9), 面内长程有序保持, 室温下各向异性比值接近 900, 为热管理应用提供了新可能。



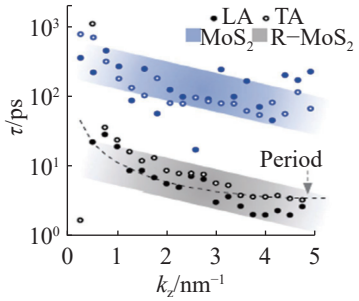
(a) 结构示意图



(b) 热导率



(c) 声子色散



(d) 弛豫时间

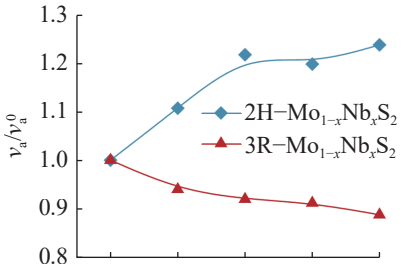
图9 随机层间旋转堆垛对热导率、声子色散和弛豫时间的影响[45]

Fig. 9 Effects of random interlayer rotational stacking on thermal conductivity, phonon dispersion, and relaxation time[45]

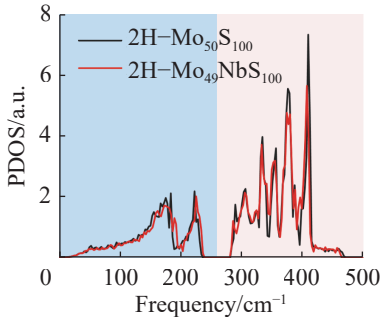
5.2 层间耦合增强与热导率上升

层间耦合增强直接导致声学支声子硬化与热导率升高。9% 面外压缩应变下，多层 MoS_2 面外热导率从约 3.5 $W•m^{-1}•K^{-1}$ 升至约 25.0 $W•m^{-1}•K^{-1}$，提升约 6 倍。第一性原理计算与相干声子光谱实验揭示，该巨变源于层间相互作用增强引发的声子色散重构及面外声子寿命延长，使各向异性热导率趋于各向同性，实现从二维到三维热耗散模式的转变[65]。分子动力学模拟显示，10% 面外均匀压缩应变可使面外热导率提升近 5 倍，且随层间耦合强度线性增长；而 5% 拉伸应变则使其下降超 68%，源于压缩/拉伸应变对层间耦合的增强/削弱作用。

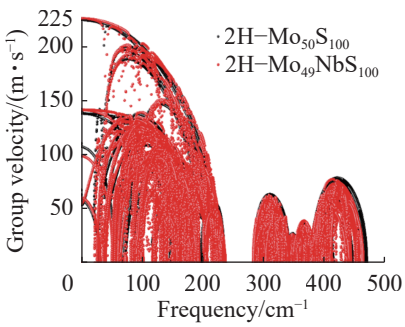
Nb 掺杂对 2H–MoS_2 热导率的反常提升，体现了化学手段增强层间耦合的类似效应[17]。Nb 掺杂后，层间 Nb—S 键增强，力常数增大，声学支声子硬化，面外平均声速从本征的 1 661 m/s 增至 1 839 m/s，如图 10(a) 所示。Callaway 模型定量分析表明，晶格硬化对热导率的提升效应超过了点缺陷散射引起的降低效应，最终导致热导率反常增加。第一性原理声子谱计算确认，硬化主要集中于热传导的主要载体——低频声学支声子，而高频光学支声子的软化对总热导率贡献有限，如图 10(b) 与 (c) 所示。



(a) 2H相和3R相的归一化声速



(b) 2H相的声子态密度



(c) 2H相的声子群速度

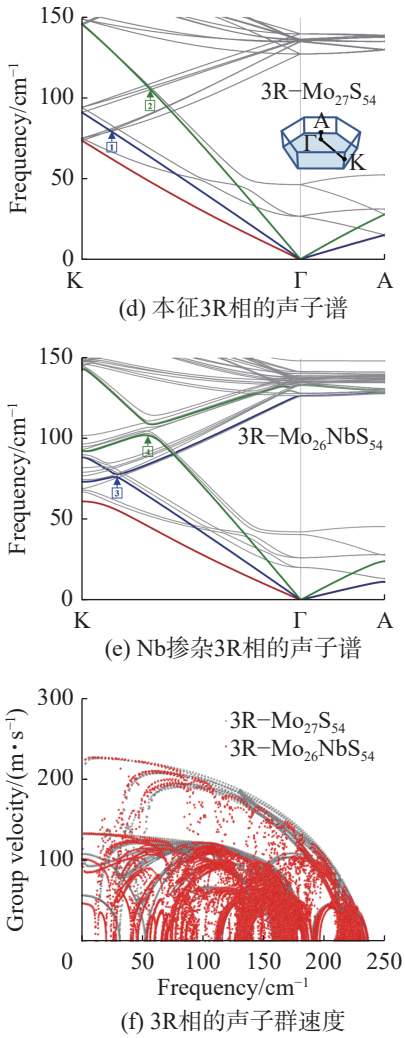


图10　Nb 掺杂对 MoS_2 声子谱的影响[17−18]

Fig. 10　Effects of Nb doping on the phonon spectra of MoS_2[17−18]

5.3　层间耦合差异化与热导率下降

层间耦合呈现非均匀变化可引发复杂的声子重构, 导致热导率下降, 说明其与热输运之间并非简单的单调正相关关系。扭转角对声子色散和热导率的非单调调控是典型的例证。第一性原理计算表明, 双层 MoS_2 热导率随层间扭转角呈 W 形变化, 在 15°附近达到最小值[66]。声子分析揭示, 扭转角对 ZA 声子支影响显著, 且对 LA 和 TA 声子支群速度和声子寿命的调制是热导率变化的主因。扭转角为 60°时热导率为 93.57 W•m^{-1}•K^{-1}, 9.43°时降至 9.09 W•m^{-1}•K^{-1}, 降幅约 90%[67]。该显著差异源于扭转角改变莫尔超晶格中 AA 与 AB 等局域堆垛构型的面积分数, 使层间耦合强度呈周期性非均匀空间分布, 声子因感受到非均匀的力常数环境而等效于引入额外散射通道。

非均匀应变提供了差异化层间耦合调制的另一途径, 可在层状 MoS_2 中产生应变梯度依赖的莫尔超晶格, 通过调控应变非均匀程度实现对面外热导率的精细控制[65]。其核心在于不同区域层间耦合强度的空间差异, 使声子感受到非均匀恢复力分布而增强声子散射。扭转角对声子传输的界面调制进一步体现了层间耦合非均匀性的影响。非平衡分子动力学模拟显示, 层间扭转主要削弱低频区 (0~15 THz) 声子的界面传热能力, 且随扭转角增大而加剧。然而, 在扭转的 MoS_2/WS_2 异质结中, 扭转反而可显著促进声子跨界面传输。扭转角重构界面非平衡声子温度分布, 使高频光学声子通过频率下转换激发对侧声学声子, 打开更多跨界面传热通道。这表明层间耦合对热输运的影响方向取决于材料组合与声子模式匹配条件。

Nb 掺杂对 3R−MoS_2 热导率的降低, 是化学手段实现差异化层间耦合调制的又一例证[18]。3R 相中, 层间增强与减弱作用共存, 使原本交叉的 LA/TA 声学支与光学支声子发生避免交叉, 声学支声子群速度显著降低, 面内平均声速从 2 810 m/s 降至 2 641 m/s (图 10(d)~(f))。这一现象与 2H 相中声子硬化的行为完全相反, 表明层间耦合状态的非均匀程度是决定热输运性质的关键因素。

5.4　层间耦合与热电性能优化

层间耦合对热电性能的影响, 本质上是对电输运与热输运的协同调控。理想热电材料要求需同时满足高电导率、高 Seebeck 系数与低热导率, 而层间耦合能同时作用于电子与声子, 为打破物性间的制约提供了独特调控维度。

置换掺杂通过改变层间键合, 同步调制载流子与声子。Nb 掺杂 2H−MoS_2 中, Nb^{4+}替代 Mo^{4+}后在价带顶引入受主态, 产生空穴载流子。尽管掺杂引入点缺陷散射, 但层间 Nb—S 键增强使层间耦合显著上升, 波函数重叠增加, 载流子层间相干性增强, 非弹性散射减少, 动量弛豫时间延长[17]。因此, 载流子迁移率超过单抛物线模型预测, 掺杂质量分数超过 1.5% 时迁移率随掺杂增加反而上升。最终, Nb 掺杂 2H−MoS_2 的 ZT 值在 900 K 达 0.16, 较未掺杂样品提升约 26 倍。3R−MoS_2 中, Nb 掺杂导致价带顶发生能带收敛, 实现多能谷参与的空穴传输, 有效质量大幅提高; 结合声子避免交叉与软化现象, ZT 值在 900 K 达 0.09, 较未掺杂样品提升约 80 倍。

扭转角与应变调控同样展现热电协同优化的潜力。扭转角通过周期性层间耦合势可诱导电子态局域化, 调制能谷简并度与有效质量, 影响 Seebeck 系数和态密度; 同时, 其对热导率的降低效应已被证实,

二者结合成为协同优化热电性能的独特维度[67]。应变调控方面，面外压缩应变虽提升面外热导率，但可通过改变能带结构优化电输运；而非均匀应变则借助莫尔超晶格破坏层间声子耦合，为在不牺牲电输运的前提下降低热导率提供了新思路。

层间耦合作为独立于掺杂浓度与温度等传统变量的新自由度，未来可在以下方向探索：利用特定扭转角协同优化能带结构与声子输运；将非均匀应变与扭转角多维联用以增强声子散射；利用层间耦合空间非均匀分布增强声子散射，同时保持载流子输运通道的连通性。尽管 MoS_2 基热电材料性能仍处快速发展阶段，层间耦合调控这一新兴维度已为突破性能瓶颈提供了独特视角和广阔设计空间。

6 结论与展望

6.1 结论

层间耦合是二维 MoS_2 区别于传统块体半导体的关键结构自由度，对其电子态和声子态具有决定性影响。本文系统综述了 MoS_2 层间耦合的物理机制、表征方法、调控策略及其对电热输运性质的调控效应，主要结论如下：

1) 层间耦合对 MoS_2 能带结构的调制具有显著的能谷选择性。K 谷电子态面内局域性强，对层间耦合不敏感；而 Q 谷和 Γ 谷电子态沿 c 轴延伸显著，响应敏感。该差异已由单层向多层转变中的直接–间接带隙演变所证实。然而，层间耦合强度与带隙大小之间的定量关系仍需系统研究。

2) 低频拉曼剪切模和呼吸模的频率由层间力常数直接决定，可定量反映层间耦合强度；SHG 可有效区分 2H 和 3R 堆垛对称性；XPS 结合能位移能够反映层间化学键状态变化。但层间力常数与宏观输运性质之间的定量关联仍难以建立。

3) 扭转角、插层、压力、电场、置换掺杂和多场耦合等手段已被证实可有效改变层间耦合状态，各策略的物理途径基本明确。然而，不同调控手段的协同效应尚未被深入探索。

4) 层间耦合为热电性能优化提供了独立于掺杂浓度与温度的新调控维度。Nb 掺杂在 2H 与 3R 相中的差异效应验证了该思路的可行性。然而，MoS_2 基热电材料的整体性能仍远低于传统热电材料，实现电输运优化与热输运抑制的协同路径尚需进一步探索。

6.2 展望

尽管 MoS_2 层间耦合工程已取得显著进展，但从机制理解到实际应用仍面临若干关键挑战：

1) 建立层间耦合的定量图谱。结合原位实验表征与第一性原理计算，系统测定不同堆垛构型和层间距下的层间力常数，建立以层间距离和扭转角为变量的输运性能数据库。

2) 探索多场协同的非线性效应。系统研究多物理场协同条件下的层间耦合演化规律，探索单一手段无法实现的非线性协同效应，以期发现新物态与新性能。

3) 实现热电性能的协同优化。利用特定扭转角同时实现能带优化与声子散射增强，结合非均匀应变与掺杂的多维调控，打破电导率与热导率之间的耦合关系。

4) 发展扭转角的大面积精确控制技术。扭转角工程走向实际应用的前提，是大面积范围内扭转角的精确控制与堆垛均一性的保障。未来需发展基于衬底对称性工程的定向生长技术，实现扭转角精度优于±1°的大面积样品制备。

5) 拓展器件应用方向。柔性热电器件方面，MoS_2 的柔韧性结合层间耦合可调性，可通过弯折诱导层间距变化实时调制热电性能，实现自适应热管理。低功耗谷电子器件方面，3R−MoS_2 的堆垛对称性破缺与层间耦合的电场可调性为谷自由度操控提供了新途径，有望构建非易失性谷电子逻辑器件。

参考文献：

[1] AKINWANDE D, HUYGHEBAERT C, WANG C H, et al. Graphene and two-dimensional materials for silicon technology[J]. Nature, 2019, 573(7775):507−518.

[2] XU X, GUO T, KIM H, et al. Growth of 2D materials at the wafer scale[J]. Advanced Materials, 2022, 34(14):2018258.

[3] WILSON J A, YOFFE A D. The transition metal dichalcogenides discussion and interpretation of the observed optical, electrical and structural properties[J]. Advances in Physics, 1969, 18(73):193−335.

[4] RADISAVLJEVIC B, WHITWICK M B, KIS A. Integrated circuits and logic operations based on single-layer MoS_2[J]. ACS Nano, 2011, 5(12):9934−9938.

[5] XIA Y, CHEN X, WEI J, et al. 12-inch growth of uniform MoS_2 monolayer for integrated circuit manufacture[J]. Nature Materials, 2023, 22:1324−1331.

[6] FU J H, MIN J, CHANG C K, et al. Oriented lateral growth of two-dimensional materials on c-plane sapphire[J]. Nature Nanotechnology, 2023, 18:1289−1294.

[7] LI L, WANG Q, WU F, et al. Epitaxy of wafer-scale single-crystal MoS_2 monolayer via buffer layer control[J]. Nature Communications, 2024, 15:1825.

[8] JIANG J, XU L, DU L, et al. Yttrium-doping-induced

metallization of molybdenum disulfide for ohmic contacts in two-dimensional transistors[J]. Nature Electronics, 2024, 7:545−556.

[9] SUN Y, WANG Y, WANG E, et al. Determining the interlayer shearing in twisted bilayer MoS_2 by nanoindentation[J]. Nature Communications, 2022, 13:3898.

[10] LIU K, ZHANG L, CAO T, et al. Evolution of interlayer coupling in twisted molybdenum disulfide bilayers[J]. Nature Communications, 2014, 5:4966.

[11] MENG X, PANDEY T, JEONG J, et al. Thermal conductivity enhancement in MoS_2 under extreme strain[J]. Physical Review Letters, 2019, 12(15):155901.

[12] ZHANG X, ZHU T, HUANG J, et al. Electric field tuning of interlayer coupling in noncentrosymmetric 3R−MoS_2 with an electric double layer interface[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2020, 12(41):46900−46907.

[13] REGAN E C, WANG D, JIN C, et al. Mott and generalized Wigner crystal states in WSe_2/WS_2 moire superlattices[J]. Nature, 2020, 579(7799):359−363.

[14] PADHI B, CHITRA R, PHILLIPS P W. Generalized Wigner crystallization in moiré materials[J]. Physical Review B, 2021, 103(12):235131.

[15] HUANG S, LIANG L, LING X, et al. Low-frequency interlayer Raman modes to probe interface of twisted bilayer MoS_2[J]. Nano Letters, 2016, 16(2):1435−1444.

[16] LIN M L, TAN Q H, WU J B, et al. Moiré phonons in twisted bilayer MoS_2[J]. ACS Nano, 2018, 12(8):8770−8780.

[17] YANG Z, LIU K, CHEN S, et al. Tailoring interlayer interaction for enhancing thermoelectric properties of two-dimensional 2H–$Mo_{1-x}Nb_xS_2$ compounds[J]. ACS Applied Energy Materials, 2025, 8(4):2378−2388.

[18] YANG Z, LIU K, CHEN S, et al. Phonon softening and significant thermal conductivity drop induced by tailoring interlayer interactions in Nb-doped rhombohedral MoS_2[J]. Materials Today Physics, 2025, 54:101722.

[19] DUAN H, LI G, TAN H, et al. Sulfur-vacancy-tunable interlayer magnetic coupling in centimeter-scale MoS_2 bilayer[J]. Nano Research, 2021, 15(2):881−888.

[20] KARKEE R, GUERRERO E, STRUBBE D A. Enhanced interlayer interactions in Ni-doped MoS_2, and structural and electronic signatures of doping site[J]. Physical Review Materials, 2021, 5(7):074006.

[21] SEKINE T, JULIEN C, SAMARAS I, et al. Vibrational modifications on lithium intercalation in MoS_2[J]. Materials Science and Engineering: B, 1989, 3(1):153−158.

[22] SHEREMETYEVA N, NIEDZIELSKI D, TRISTANT D, et al. Low-frequency Raman signature of Ag-intercalated few-layer MoS_2[J]. 2D Materials, 2021, 8(2):025031.

[23] WANG Q H, KALANTAR−ZADEH K, KIS A, et al. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides[J]. Nature Nanotechnology, 2012, 7:699−712.

[24] STRACHAN J, MASTERS A F, MASCHMEYER T. 3R−MoS_2 in review: history, status, and outlook[J]. ACS Applied Energy Materials, 2021, 4(8):7405−7418.

[25] SHI J, YU P, LIU F, et al. 3R−MoS_2 with broken inversion symmetry: a promising ultrathin nonlinear optical device[J]. Advanced Materials, 2017, 29(30):1701486.

[26] PARK J, YEU I W, HAN G, et al. Ferroelectric switching in bilayer 3R−MoS_2 via interlayer shear mode driven by nonlinear phononics[J]. Scientific Reports, 2019, 9(1): 14919.

[27] WU M, LI J. Sliding ferroelectricity in 2D van der Waals materials: related physics and future opportunities[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2021, 118(50):e2115703118.

[28] MARMOLEJO−TEJADA J M, ROLL J E, et al. Slippery paraelectric transition-metal dichalcogenide bilayers[J]. Nano Letters, 2022, 22(19):7984−7991.

[29] WANG X, YASUDA K, ZHANG Y, et al. Interfacial ferroelectricity in rhombohedral-stacked bilayer transition metal dichalcogenides[J]. Nature Nanotechnology, 2022, 17:367−371.

[30] TANG P, BAUER G E W. Sliding phase transition in ferroelectric van der waals bilayers[J]. Physical Review Letters, 2023, 130(17):176801.

[31] WONG S L, LIU H, CHI D. Recent progress in chemical vapor deposition growth of two-dimensional transition metal dichalcogenides[J]. Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials, 2016, 62(3):9−28.

[32] SPLENDIANI A, SUN L, ZHANG Y, et al. Emerging photoluminescence in monolayer MoS_2[J]. Nano Letters, 2010, 10(4):1271−1275.

[33] SUZUKI R, SAKANO M, ZHANG Y J, et al. Valley-dependent spin polarization in bulk MoS_2 with broken inversion symmetry[J]. Nature Nanotechnology, 2014, 9:611−617.

[34] TORNATZKY H, GILLEN R, UCHIYAMA H, et al. Phonon dispersion in MoS_2[J]. Physical Review B, 2019, 99(14):144309.

[35] LI H, ZHANG Q, YAP C C R, et al. From bulk to monolayer MoS_2: evolution of Raman scattering[J]. Advanced Functional Materials, 2012, 22(7):1385−1390.

[36] VAN BAREN J, YE G, YAN J A, et al. Stacking-dependent interlayer phonons in 3R and 2H MoS_2[J]. 2D Materials, 2019, 6(2):025022.

[37] LIU L, LI T, MA L, et al. Uniform nucleation and epitaxy of bilayer molybdenum disulfide on sapphire[J]. Nature, 2022, 605(7908):69−75.

[38] PLECHINGER G, MOOSHAMMER F, CASTELLANOS−GOMEZ A, et al. Optical spectroscopy of interlayer coupling in artificially stacked MoS_2 layers[J]. 2D Materials, 2015, 2(3):034016.

[39] DONG Y, YANG M M, YOSHII M, et al. Giant bulk piezophotovoltaic effect in 3R−MoS_2[J]. Nature

Nanotechnology, 2023, 18:36−41.
[40] GUO X, LIAO J, YANG D, et al. Tunable in-plane anisotropy of quasiparticles in twisted MoS_2/CrOCl heterostructures[J]. Applied Physics Letters, 2024, 124(24): 241602.
[41] MENNEL L, FURCHI M M, WACHTER S, et al. Optical imaging of strain in two-dimensional crystals[J]. Nature Communications, 2018, 9:516.
[42] JUO J Y, KERN K, JUNG S J. Investigation of interface interactions between monolayer MoS_2 and metals: Implications on strain and surface roughness[J]. Langmuir, 2024, 40(2):1277−1285.
[43] XING S A, ZHAO G, MAO B, et al. The same band alignment of two hybrid 2D/3D vertical heterojunctions formed by combining monolayer MoS_2 with semi-polar (11−22) GAN and c-plane (0001) GAN[J]. Applied Surface Science, 2022, 599:153965.
[44] QUAN J, LINHART L, LIN M L, et al. Phonon renormalization in reconstructed MoS_2 moiré superlattices[J]. Nature Materials, 2021, 20:1100−1105.
[45] KIM S E, MUJID F, RAI A, et al. Extremely anisotropic van der Waals thermal conductors[J]. Nature, 2021, 597(7878):660−665.
[46] NG H K, ABUTAHA A, VOIRY D, et al. Effects of structural phase transition on thermoelectric performance in lithium-intercalated molybdenum disulfide (Li_xMoS_2)[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2019, 11(13):12184−12189.
[47] WANG L, XU Z, WANG W, et al. Atomic mechanism of dynamic electrochemical lithiation processes of MoS_2 nanosheets[J]. Journal of the American Chemical Society, 2014, 136(18):6693−6697.
[48] CHENG Y, NIE A, ZHANG Q, et al. Origin of the phase transition in lithiated molybdenum disulfide[J]. ACS Nano, 2014, 8(11):11447−11453.
[49] DOU X, DING K, JIANG D, et al. Probing spin−orbit coupling and interlayer coupling in atomically thin molybdenum disulfide using hydrostatic pressure[J]. ACS Nano, 2016, 10(1):1619−1624.
[50] LI Q, SUI L, NIU G, et al. Pressure manipulation of interlayer interactions and ultrafast carrier dynamics in few-layer MoS_2[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2020, 124(20):11183−11192.
[51] CI P, CHEN Y, KANG J, et al. Quantifying van der waals interactions in layered transition metal dichalcogenides from pressure-enhanced valence band splitting[J]. Nano Letters, 2017, 17(8):4982−4988.
[52] CHI Z H, ZHAO X M, ZHANG H, et al. Pressure-induced metallization of molybdenum disulfide[J]. Physical Review Letters, 2014, 113(3):036802.
[53] CHENG X, LI Y, SHANG J, et al. Thickness-dependent phase transition and optical behavior of MoS_2 films under high pressure[J]. Nano Research, 2018, 11(2):855−863.
[54] DANDU M, GUPTA G, DASIKA P, et al. Electrically tunable localized versus delocalized intralayer moire excitons and trions in a twisted MoS_2 bilayer[J]. ACS Nano, 2022, 16(6):8983−8992.
[55] YANG Z, LIU K, LUO H, et al. Exceptional thermal switching performance in 2D MoS_2 due to hexagonal to rhombohedral phase transition and polarization switch[J]. Advanced Materials, 2026, 38(13):e72234.
[56] KARNI O, BARRE E, LAU S C, et al. Infrared interlayer exciton emission in MoS_2/WSe_2 heterostructures[J]. Physical Review Letters, 2019, 123(24):247402.
[57] ZHENG B, MA C, LI D, et al. Band alignment engineering in two-dimensional lateral heterostructures[J]. Journal of the American Chemical Society, 2018, 140(36):11193−11197.
[58] KHA T, MOODY G, WU F, et al. Evidence for moire excitons in van der Waals heterostructures[J]. Nature, 2019, 567(7746):71−75.
[59] VAN DER ZANDE A M, KUNSTRNANN J, CHERNIKOV A, et al. Tailoring the electronic structure in bilayer molybdenum disulfide via interlayer twist[J]. Nano Letters, 2014, 14(7):3869−3875.
[60] XIAN L, CLAASSEN M, KIESE D, et al. Realization of nearly dispersionless bands with strong orbital anisotropy from destructive interference in twisted bilayer MoS_2[J]. Nature Communications, 2021, 12:5644.
[61] WANG X, XU J, HWANG E, et al. Strain-driven interfacial engineering in metal-MoS_2 contacts[J]. Applied Physics Letters, 2025, 127(12):123104.
[62] ZHOU S, YANG L, LIU G, et al. Effects of biaxial strain and external electric field on the electronic properties of MoS_2/WSe_2 Heterostructure: A first-principles study[J]. Chemical Physics Letters, 2026, 898:142978.
[63] JIANG P, QIAN X, GU X, et al. Probing anisotropic thermal conductivity of transition metal dichalcogenides MX_2 (M=Mo, W and X=S, Se) using time - domain thermoreflectance[J]. Advanced Materials, 2017, 29(36): 1701068.
[64] ZHU G, LIU J, ZHENG Q, et al. Tuning thermal conductivity in molybdenum disulfide by electrochemical intercalation[J]. Nature Communications, 2016, 7:13211.
[65] JIANG W, LIANG T, XU J, et al. Strain-engineered anisotropic thermal transport in layered MoS_2 structures[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2025, 17(23):34833−34844.
[66] NIE X, XUE J, ZHAO L, et al. Tuning lattice thermal conductivity of bilayer and trilayer molybdenum disulfide thermoelectric materials through twist angles[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2022, 194:123005.
[67] MANDAL S, MAITY I, DAS A, et al. Tunable lattice thermal conductivity of twisted bilayer MoS_2[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2022, 24(22):13860−13868.

责任编辑:何莉