

# 纳米技术 拉曼光谱法测量二硫化钼薄片的层数

# 目 次

前言 .....	3
引言 .....	4
1 范围 .....	5
2 规范性引用文件 .....	5
3 术语和定义 .....	5
4 样品准备 .....	8
5 基于剪切模和呼吸模的峰位测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法 (A 法) .....	9
6 基于 $E_{2g}^1$ 模和 $A_{1g}$ 模的峰位差测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法 (B 法) .....	11
7 基于 $SiO_2/Si$ 衬底的硅拉曼模峰高测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法 (C 法) .....	13
8 测试报告 .....	15
附录 A (资料性) 拉曼光谱法测量二硫化钼薄片层数的各种方法概要一览表 .....	17
附录 B (资料性) 典型拉曼峰的光谱参数示意图 .....	18
附录 C (资料性) 基于剪切模和呼吸模的峰位测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法 (A 法) 的表征实例 .....	19
附录 D (资料性) 基于 $E_{2g}^1$ 模和 $A_{1g}$ 模的峰位差测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法 (B 法) 的表征实例 .....	21
附录 E (资料性) 基于 $SiO_2/Si$ 衬底的硅拉曼模峰高测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法 (C 法) 的表征实例 .....	23
附录 F (资料性) 基于 $SiO_2/Si$ 衬底的硅拉曼模峰高测量 $MoS_2$ 薄片层数的拉曼光谱法 (C 法) 的 $I_{2D}(Si)/I_0(Si)$ 理论计算结果(532nm 激光) .....	25
附录 G (资料性) 测试报告范例 .....	26
参考文献 .....	27

# 纳米技术 拉曼光谱法测量二硫化钼薄片的层数

警示：本文件涉及使用激光器，其产生的激光对眼睛可能产生不可逆的损伤。使用激光器时应佩戴对应的激光防护眼镜，严禁用眼睛直视激光，避免激光经光学元件反射进入人眼。操作人员应接受过相关安全培训。

## 1 范围

本文件规定了使用拉曼光谱法测量二硫化钼薄片的层数的方法。

本文件适用于利用机械剥离法制备的、横向尺寸不小于 2  $\mu\text{m}$  的 2H 堆垛的二硫化钼薄片的层数测量。化学气相沉积（CVD: chemical vapor deposition）法制备的 2H 堆垛的二硫化钼薄片可参照本方法执行。

注 1：测量二硫化钼薄片的层数时，可单独或者综合几种方法联合测量并相互验证。

注 2：第 5 章给出了基于剪切模和呼吸模的峰位测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法（A 法）。第 6 章给出了基于  $E_{2g}^1$  模和  $A_{1g}$  模的峰位差测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法（B 法）。第 7 章给出了基于  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  衬底的硅拉曼模峰高测量二硫化钼薄片层数的拉曼光谱法（C 法）。附录 A 给出了拉曼光谱法测量二硫化钼薄片层数的各种方法概要一览表。

## 2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 30544.13 纳米科技 术语 第 13 部分：石墨烯及相关二维材料

GB/T 31225 椭圆偏振仪测量硅表面上二氧化硅薄层厚度的方法

GB/T 33252 纳米技术 激光共聚焦显微拉曼光谱仪性能测试

GB/T 40069 纳米技术 石墨烯相关二维材料的层数测量 拉曼光谱法

JJF 1544 拉曼光谱仪校准规范

## 3 术语和定义

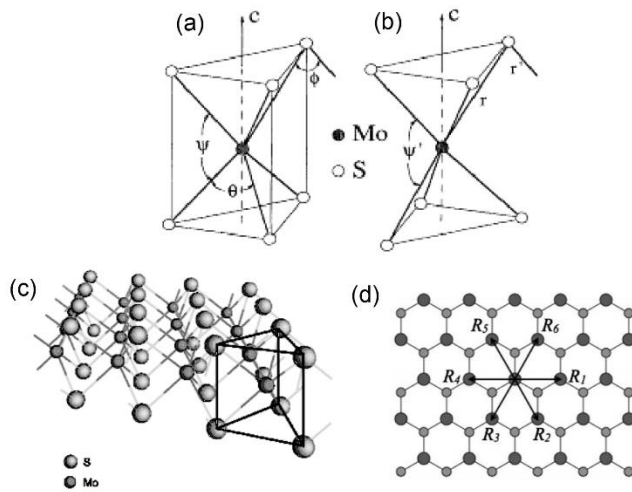
GB/T 30544.13、GB/T 33252、GB/T 40069界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1 二硫化钼相关术语

#### 3.1.1

**单层二硫化钼 monolayer molybdenum disulfide; 1L-MoS<sub>2</sub>**

一种具有类石墨烯层状结构的二维晶体材料，属于过渡族金属二硫化物。每一层 MoS<sub>2</sub> 是由两层 S 原子与一层 Mo 原子堆叠形成的三明治状的层状结构相对堆叠而成的。S 原子层和 Mo 原子层均按平面六角阵列方式铺排，每一个 Mo 原子周围分布着 6 个 S 原子，每一个 S 原子周围分布着 3 个 Mo 原子，它们之间通过较强的共价键结合，每一层 MoS<sub>2</sub> 厚度约为 0.65 nm。根据上下 S 原子层的相对取向不同，1L-MoS<sub>2</sub> 按配位方式为两类，2H 相呈三棱柱配位，1T 相呈八面体式配位，如图 1 所示。



(a) 2H 型 MoS<sub>2</sub> 原子结构示意图 (b) 1T 型 MoS<sub>2</sub> 原子结构示意图  
 (c) 单层 2H-MoS<sub>2</sub> 的三维原子示意图 (d) 单层 2H-MoS<sub>2</sub> 的原子结构俯视示意图

图 1 单层二硫化钼 (1L-MoS<sub>2</sub>) 结构示意图

### 3. 1. 2

#### 多层二硫化钼 multilayer molybdenum disulfide; ML-MoS<sub>2</sub>

多层 MoS<sub>2</sub> 是由单层 MoS<sub>2</sub> 按某种方式堆垛而成，其层内原子以共价键相结合，层间通过弱的范德瓦耳斯力相互结合。根据层间堆垛方式和 MoS<sub>2</sub> 的配位方式的不同，有三种晶体结构：2H-MoS<sub>2</sub>、3R-MoS<sub>2</sub> 和 1T-MoS<sub>2</sub>，如图 2 所示。2H-MoS<sub>2</sub> 是最稳定存在的一种形态，3R-MoS<sub>2</sub> 和 1T-MoS<sub>2</sub> 是亚稳定态。

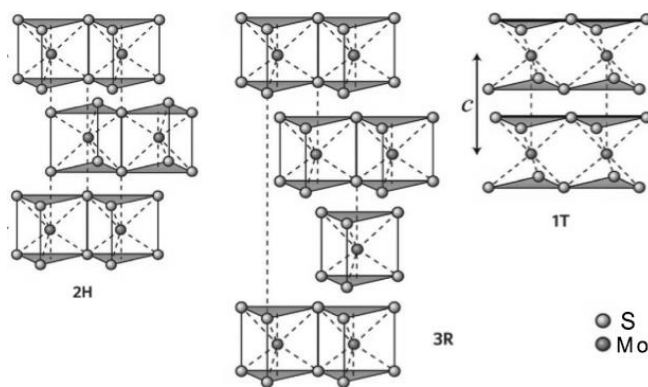


图 2 不同堆垛方式的多层二硫化钼 2H-MoS<sub>2</sub>、3R-MoS<sub>2</sub> 和 1T-MoS<sub>2</sub> 原子结构示意图

### 3. 1. 3

#### 2H 堆垛 2H stacking

相邻二硫化钼层中上层的 Mo 原子和 S 原子分别与下层的 S 原子和 Mo 原子对齐的堆叠方式。具有 2H 堆垛的 ML-MoS<sub>2</sub> 具有六角对称性，两个(S-Mo-S)三棱柱结构为一个重复单元。

注：2H 堆垛是多层 MoS<sub>2</sub> 最为常见的堆垛方式。

#### 3.1.4

##### **层数 number of layers**

〈二维材料〉 构成二维材料的层的数目。

[来源: GB/T 40069—2021, 3.1.3]

#### 3.2 拉曼光谱相关术语

##### 3.2.1

##### **拉曼光谱 Raman spectrum**

当物质受到单色辐射能照射时, 由于非弹性散射产生的已调制频移的光谱。

注1: 非弹性散射指受到介质的旋转激发、振动激发或声子激发。

注2: 调制频移指单色辐射光子的能量损失或者增益。

[来源: GB/T 33252-2016,2.1]

##### 3.2.2

##### **拉曼峰 Raman peak; Raman mode; Raman band**

拉曼光谱中具有特定形状的谱峰。

注1: 每种散射介质都有其特定的拉曼峰。

注2: 包括峰位、峰高、峰面积、峰宽和线型等光谱特征, 参见附录 B 的图 B.1。

[来源: GB/T 40069-2021,3.2.2]

##### 3.2.3

##### **峰高 peak height; peak maximum**

拉曼峰的最高点与基线之间的垂直距离。

[来源: GB/T 40069-2021,3.2.3]

##### 3.2.4

##### **峰面积 peak area**

##### **峰强 peak intensity**

拉曼峰与基线包围的面积。

[来源: GB/T 40069-2021,3.2.4]

##### 3.2.5

##### **峰位 peak position**

入射单色光与拉曼峰最高点位置之间的波数差值。

注: 也称为拉曼频移, 单位为波数( $\text{cm}^{-1}$ )。

[来源: GB/T 40069-2021,3.2.5]

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/055223202310011040>