



بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۵-۱۶ بهمن ۱۳۹۸



مهندسی ارتفاع سد شاتکی در ساختار های هیبریدی گرافن-دی چالکوجناید فلزات واسطه دو بعدی

صبا سپه بان شاهگلی^۱، سید فرشاد اکتریان فر^۱، سعید شجاعی^{۱,۲}

^۱پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز

^۲گروه فوتونیک و فناوری پلاسما، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، ایمیل: s.sepahban@ms.tabriz.ac.ir

چکیده - مواد دوبعدی دی چالکوجناید فلزات واسطه، مواد جدید در حال ظهور هستند که خصوصیات آن ها سبب جذاب شدن آن ها برای کاربردهای نانو فوتونیکی و نانو الکترونیکی شده است. همین طور مواد دوبعدی مانند گرافن که شبه فلز است، اگر با نیم رساناهای دوبعدی ترکیب شود، ساختارهای هیبریدی و اندروالسی تشکیل می دهد که این افزاره ها دارای رفتارهای غیرقابل پیش بینی است. ما، در این مقاله به صورت نظری ساختار هیبریدی متشکل از گرافن و دی سولفید تنگستن را مدل بندی کرده ایم که پیوند این دو ایجاد سد شاتکی می کند. اعمال میدان خارجی ارتفاع سد شاتکی را از مقدار اولیه 0.69 به 0.28 الکترون ولت تغییر می دهد که سبب افزایش جریان اشباع معکوس از مقدار اولیه 1.3×10^{-12} تا 1.1×10^{-5} آمپر شده است و پیرو آن جریان ترمومویونی افزایش خواهد داشت که قابلیت بهره برداری از این ساختار ها در آشکارسازی برای افزایش پاسخ دهی نوری و بهره را ممکن می سازد. کلیدواژه- « دی چالکوجناید فلزات واسطه، ساختار هیبریدی، سد شاتکی، گرافن، مواد دوبعدی »

Engineering of Schottky Barrier Height in Graphene -Transition Metal Dichalcogenide-based Heterostructures

Saba Sepahban Shahgoli¹, Seyed Farshad Akhtariyan Far¹, Saeid Shojaei^{1,2}

¹Research Institute for Applied Physics & Astronomy, University of Tabriz

²photonics and plasma technology department, Faculty of Physics, University of Tabriz,

Emails: s.sepahban@ms.tabriz.ac.ir, farshad.akhtarian@gmail.com, s_shojaei@tabrizu.ac.ir

Abstract-Transition metal dichalcogenides are new generated materials which became attractive for nano photonic and nano electronic applications, because of their unique properties. Also 2D materials like graphene which is guasi metal, if combined with to 2D semiconductors, make vanderwaals heterostructures which have unpredictable behaviour. In our paper, we theoretically study heterostructure based on graphene and tungsten disulfide that their contact make schottky barrier height. We reduced SBH from 0.69 to 0.28 electron volt by applying external field that results in increasing reverse saturation current from 1.3×10^{-12} to 1.1×10^{-5} ampere. Therefore the enhancement of thermionic current, enables the capability of using these structures in detectors for increasing photoresponse and gain.

Keywords: Graphene, heterostructure, schottky barrier, transition metal dichalcogenide, two dimensional materials.

کردیم. محاسبات ما در راستای افزایش این جریان، استفاده از این ساختار در کاربرد هایی همچون آشکارسازی، برای جریان نوری بالاتر را ممکن می سازد.

بحث و نتایج

اولین بار در مقاله [v]Tongay مدل سازی گرافن-نیم رسانا صورت گرفت که یک مدل ساده برای تغییرات جریان ترمویونی بیان کرد که نشان می داد که جریان اشباع معکوس در حضور بایاس ولتاژ افزایش می یابد. در دیود های فلز-نیم رسانا تراز فرمی فلز به هنگام اعمال بایاس به دلیل چگالی بالا حالت های فلز، ثابت می ماند. وقتی فلز با گرافن جایگزین می شود، تغییرات بار بین گرافن و نیم رسانا باعث جابجایی تراز فرمی گرافن می شود. اگر یک گرافن با تراز فرمی در نقطه دیراک در نظر بگیریم با یک نیم رسانای نوع n، در بایاس مستقیم پهنای ناحیه تهی کاهش و تراز فرمی به سمت پایین می رود و از آن جا که معمولاً بایاس کم اعمال می شود، این شیفت بسیار کم است. در بایاس معکوس، ناحیه ی تهی نیم رسانا افزایش می یابد و این سبب جابجایی تراز فرمی به بالا می شود. ما ابتدا با استفاده از قانون شاتکی مات (Schottky-Mott rule)، ارتفاع سد شاتکی را در حالت تعادل به دست می آوریم [۶]:

$$\varphi_{SBH} = \Phi_M - \chi_s \quad (1)$$

که Φ_M تابع کار گرافن (4.6 eV) و χ_s الکترون خواهی دی سولفید تنگستن (4 eV) است، بنابراین ارتفاع سد شاتکی 0.6 eV به دست می آید. انرژی فرمی گرافن در حالت تعادل از معادله زیر تبعیت می کند [۲]:

$$E_{FM} = \pm \frac{h}{2\sqrt{\pi}} v_f \sqrt{n} \quad (2)$$

که v_f سرعت فرمی و n چگالی حاملین است و از معادله (۳) قابل استخراج است:

$$n = -\sqrt{2\varepsilon_0\varepsilon_s N_D} (\varphi_i - KT/e) / e \quad (3)$$

که φ_i اختلاف توابع کار می باشد که در ساختار ما برابر با 0.2 eV است و N_D چگالی حالت های نیم رساناست. بنابراین انرژی فرمی گرافن بعد از پیوند بدون اعمال ولتاژ برابر با -0.09 eV است که علامت منفی نشان می دهد که گرافن به هنگام پیوند، با حفره آلاش شده است. بعد از پیوند، ارتفاع سد شاتکی (φ_{SBH}^0) برابر 0.69 eV است. شکل (۱) ساختار باندی گرافن-دی سولفید تنگستن بعد از پیوند را نشان می دهد.

مقدمه

مواد دوبعدی دارای محدوده ی وسیعی از ویژگی های الکترونیکی هستند که می تواند از نیتريد برم (hBN)، نیم رساناهای دی چالکوجناید فلزات واسطه (TMDC) همانند دی سولفید مولیبدنیوم (MoS_2)، دی سولفید تنگستن (WS_2) تا گرافن شبه فلز را در برگیرد. تعداد زیادی از مواد دوبعدی همراه با ترکیبات هیبریدی آنها، فرصت های جدیدی برای بررسی پدیده های نوری نوین به وجود می آورد. مواد دوبعدی می تواند شامل چند لایه، ساختارهای هیبریدی و یا فیلم های نازک لایه ای باشد که ضخامت آنها از یک اتم تا چند ده نانومتر متغیر است [۱]. گرافن نام یکی از آلوتروپ های کربن است و به عنوان یک شبه فلز شناخته می شود که هم خصوصیات نیم رسانا و هم یک فلز را می تواند داشته باشد. این ماده به علت داشتن خواص فوق العاده در رسانندگی الکتریکی و اپتیکی، چگالی بالا و تحرک پذیری حامل های بار و خواص مکانیکی به ماده ای منحصر به فرد تبدیل شده است [۲]. گرافن به دلیل نازکی بسیار بالایی که دارد، نور را بیشتر از خود عبور می دهد. در واقع گرافن حدود ۹۷-۹۸ درصد نور را از خود عبور می دهد [۳]. بر خلاف ویژگی های دیگر گرافن، کم بودن جذب در این مواد و جریان تاریکی بالا، خصوصیت های نامطلوب این مواد برای کاربرد هایی چون آشکارسازی، ترانزیستور و دیود های نوری می باشد. به همین منظور می توان از ترکیب گرافن با TMDC ها استفاده کرد که جذب نوری بالا دارند [۴]. دی چالکوجناید فلزات واسطه دوبعدی دارای ویژگی های گسترده الکترونیکی، نوری، مکانیکی و حرارتی هستند که در سال های اخیر مورد مطالعه قرار گرفته اند. این مواد گروهی از مواد هستند که دارای فرمول MX_2 هستند. که M ، یک فلز واسطه از گروه ۴، ۵ یا گروه ۶ ($Mo, \dots$) است و X یک چالکوجناید ($S, \dots$) است. این مواد ساختارهای لایه ای با فرم X-M-X دارند [۵]. به هنگام پیوند TMDC ها با گرافن اگر تابع کار فلز بزرگتر از تابع کار نیم رسانا باشد، سدی ایجاد می شود که به سد شاتکی معروف است، که این سد، سد انرژی پتانسیل برای الکترون هایی است که از فلز به نیم رسانا (نوع n) می آیند. سد شاتکی ویژگی یک سوسازی دارد و دارای جریان بالا و مقاومت کم در یک جهت و جریان قابل چشم پوشی و مقاومت بالا در جهت مخالف هستند. پارامتر مورد بررسی در این سد ها، ارتفاع سد شاتکی (SBH) است و معمولاً جریان های غالب در سد های شاتکی، جریان ترمویونی است [۶].

ما در این مقاله ساختار هیبریدی مبتنی بر گرافن و دی سولفید تنگستن (WS_2) را مدل بندی کردیم و ارتفاع سد شاتکی ایجاد شده در فصل مشترک را با اعمال میدان خارجی کاهش دادیم که جریان ترمویونی بالاتری استخراج

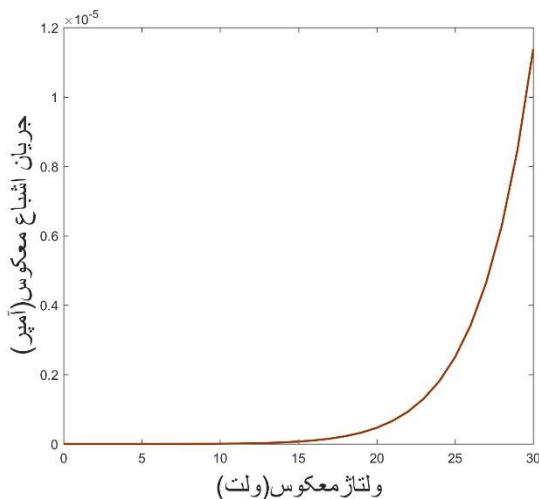
می تواند جریان ترمویونی را همان طور که در معادله (۶) بیان شده است، تحت تاثیر قرار دهد [۹].

$$I_0 = wA_{2D}^* T^2 e^{\frac{3}{2} \frac{-e\phi_{SBH}^0}{KT}} \quad (5)$$

که A_{2D}^* ثابت ریچاردسون و w پهنای پیوند و برابر با ۴ میکرومتر است که در سد های شاتکی ساختار های سه بعدی بین فلز و نیم رسانا، سطح مشترک پیوند برای محاسبه جریان مهم می باشد که در ساختار مورد بررسی ما به دلیل دو بعدی بودن ساختار فقط پهنا در مرز مشترک دو پیوند، در نظر گرفته می شود.

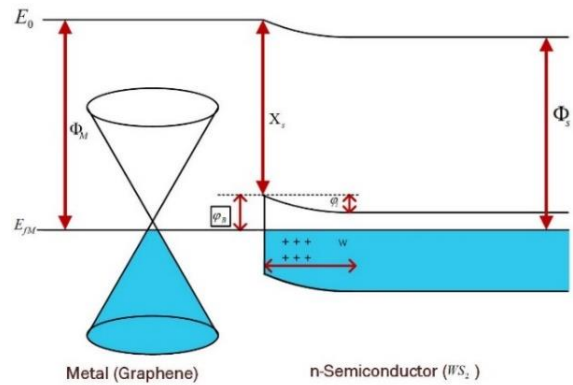
$$I = I_0 (e^{\frac{eV}{KT}} - 1) \quad (6)$$

تغییرات I_0 با اعمال ولتاژ معکوس با جاگذاری معادله (۴) در معادله (۵) به دست می آید که در شکل (۳) نشان داده شده است.



شکل (۳): تغییرات جریان اشباع معکوس (I_0) با ولتاژ معکوس اعمالی

حال جریان ترمویونی که به دلیل وجود سد شاتکی رفتار یکسوسازی دارد، برای دو حالت در شکل (۴) نشان داده شده است. حالت (الف) برای ارتفاع سد شاتکی اولیه و حالت (ب) برای ارتفاع سد شاتکی کاهش یافته، جریان را نشان می دهد که تا ۱,۳ آمپر افزایش پیدا کرده است.



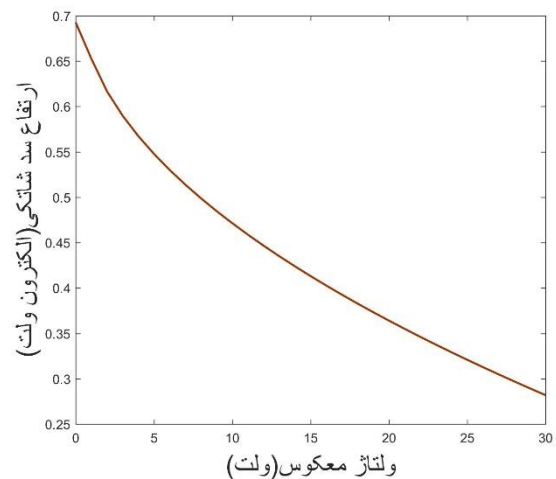
شکل (۱): ساختار باندی گرافن- دی سولفید تنگستن در حالت تعادل بعد از پیوند

حال با اعمال ولتاژ معکوس، تراز فرمی گرافن به بالا شیف می کند که تغییرات ارتفاع سد شاتکی نیز با توجه به معادله (۴) به تغییرات تراز فرمی وابسته خواهد بود [۸]:

$$\phi_{SBH}(V) = \phi_{SBH}^0 - \Delta E_{FM}(V) \quad (4)$$

$$= \phi_{SBH}^0 - a(\sqrt{(\phi_i - V - kT/e)} - \sqrt{\phi_i - kT/e})$$

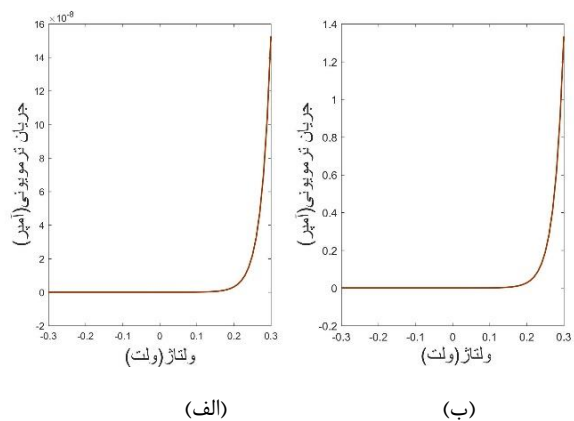
که $a = \frac{h}{4\sqrt{\pi}} v_f \sqrt{\frac{\epsilon_s \epsilon_0 N_D}{2en}}$ است. ما با اعمال ولتاژ معکوس 30 ولت ارتفاع سد شاتکی را تا 0.28 eV کاهش دادیم. شکل (۲) تغییرات ارتفاع سد شاتکی با اعمال ولتاژ معکوس را نشان می دهد.



شکل (۲): تغییرات ارتفاع سد شاتکی بر حسب ولتاژ معکوس

جریان غالب در سیستم های شاتکی جریان ترمویونی است. تغییرات ارتفاع سد شاتکی، سبب تغییرات جریان اشباع معکوس همانند معادله (۵) می شود که تحت عنوان I_0

- [4] P. K. Vabbina, N. Choudhary, A. Chowdhury, R. Sinha, M. Karabiyik, S. Das, W. Choi, and N. Pala, "Highly sensitive wide bandwidth photodetectors based on internal photoemission in CVD grown P-type MoS₂/graphene schottky junction," ACS Appl. Mater. Interfaces, Vol 7, pp. 15206-15213, 2015.
- [5] Q. H. Wang, K. Kalantarzadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, "Electronics and opto electronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides," Nat. Nanotechnol, Vol 7, pp. 699-712, 2012.
- [6] S. O. Kasap, *Principles of electronic materials and devices*, McGraw-Hill New York, pp. 435-440, 2006.
- [7] S. Tongay, M. Lemaitre, B. Gila, B. R. Appleton, and A. F. Hebard, "Rectification at graphene-semiconductor interfaces: zero-gap semiconductor based diodes," Phys. Rev. X, Vol 2, pp. 011002(1-10), 2012.
- [8] A. D. Bartolomeo, "Graphene schottky diodes: an experimental review of the rectifying graphene/semiconductors heterojunction," Phys. Rep., pp. 606 (1-58), 2016.
- [9] Y. Fan, X. Wang, H. Tan, Y. Rong, and J. H. Warner, "Photoinduced schottky barrier lowering in 2D monolayer WS₂ photodetectors," Adv. Opt. Mater. Vol 10, pp. 1573-1581, 2016.



شکل (۴): نمودار های جریان-ولتاژ: الف) ارتفاع سد شاتکی اولیه،
ب) ارتفاع سد شاتکی نهایی

نتیجه

ما ساختار هیبریدی گرافن-دی سولفید تنگستن مدل بندی کردیم و ارتفاع سد شاتکی را با اعمال ولتاژ معکوس و مهندسی تراز فرمی گرافن از مقدار اولیه 0.69 الکترون ولت به 0.28 الکترون ولت کاهش دادیم و با کاهش ارتفاع سد شاتکی، باز تزریق الکترون ها از گرافن به نیم رسانا صورت گرفت، در نتیجه جریان ترمویونی که جریان حاکم بر سیستم ما است افزایش یافت. در واقع با کاهش ارتفاع سد شاتکی، تنها جریان اشباع معکوس چند مرتبه افزایش می یابد. همین طور وقتی در معرض تابش نور در افزاره های نوری قرار می گیرد، به دلیل ارتفاع سد شاتکی کمتر باز تزریق الکترون ها از طریق جریان ترمویونی، جریان نوری افزایش می یابد. از این نوع ساختار هیبریدی می توان در دیود های نوری، ترانزیستور های نوری و آشکارساز ها استفاده کرد و از طریق مهندسی تراز فرمی گرافن و اعمال میدان خارجی مورد بهره برداری قرار داد.

منابع

- [1] F. Xia, H. Wang, D. Xiao, M. Dubey, and A. Ramasubramaniam, "Two-dimensional material nanophotonics," Nat. photonics, Vol. 8, pp. 899-907, 2014.
- [2] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene," Rev. Mod. Phys., Vol. 81, pp. 0034-6861(109-162), 2009.
- [3] H. Tan, Y. Fan, Y. Zhou, Q. Chen, W. Xu, and J. H. Warner, "Ultrathin 2D photodetectors utilizing chemical vapour deposition Grown WS₂ with graphene electrodes," ACS Nano, Vol 10, pp. 7866-7873, 2016.