



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<sup>۱</sup>، سید فرشاد اکتریان فر<sup>۱</sup>، سعید شجاعی<sup>۱,۲</sup>

<sup>۱</sup> پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز

<sup>۲</sup> گروه فوتونیک و فناوری پلاسما، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، ایمیل: [s.sepahban@ms.tabriz.ac.ir](mailto: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 فوتونیک و نانو الکترونیک 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 غیر قابل 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  $1.3 \times 10^{-12}$  تا  $1.1 \times 10^{-5}$  آمپر شده است و پیرو آن جریان ترمویونی 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 Shahgoli<sup>1</sup>, Seyed Farshad Akhtariyan Far<sup>1</sup>, Saeid Shojaei<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Research Institute for Applied Physics & Astronomy, University of Tabriz

<sup>2</sup>photonics and plasma technology department, Faculty of Physics, University of Tabriz,

Emails: [s.sepahban@ms.tabriz.ac.ir](mailto:s.sepahban@ms.tabriz.ac.ir), [farshad.akhtarian@gmail.com](mailto:farshad.akhtarian@gmail.com), [s\\_shojaei@tabrizu.ac.ir](mailto: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  $1.3 \times 10^{-12}$  to  $1.1 \times 10^{-5}$  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 می‌سازد.

## بحث و نتایج

اولین بار در مقاله [1] Tongay مدل سازی گرافن-نیم‌رسانا صورت گرفت که یک مدل ساده برای تغییرات جریان ترمویونی بیان کرد که نشان می‌داد که جریان اشباع معکوس در حضور بایاس ولتاژ افزایش می‌یابد. در دیود های فلز-نیم‌رسانا تراز فرمی فلز به هنگام اعمال بایاس به دلیل چگالی بالا حالت های فلز، ثابت می‌ماند. وقتی فلز با گرافن جایگزین می‌شود، تغییرات بار بین گرافن و نیم‌رسانا باعث جابجایی تراز فرمی گرافن می‌شود. اگر یک گرافن با تراز فرمی در نقطه دیراک در نظر بگیریم با یک نیم‌رسانای نوع n، در بایاس مستقیم پهنای ناحیه تهی کاهش و تراز فرمی به سمت پایین می‌رود و از آن جا که معمولاً بایاس کم اعمال می‌شود، این شیفت بسیار کم است. در بایاس معکوس، ناحیه ی تهی نیم‌رسانا افزایش می‌یابد و این سبب جابجایی تراز فرمی به بالا می‌شود. ما ابتدا با استفاده از قانون شاتکی مات (Schottky-Mott rule)، ارتفاع سد شاتکی را در حالت تعادل به دست می‌آوریم [6]:

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

که  $\Phi_M$  تابع کار گرافن (4.6 eV) و  $\chi_s$  الکترون خواهی دی‌سولفید تنگستن (4 eV) است، بنابراین ارتفاع سد شاتکی 0.6 eV به دست می‌آید. انرژی فرمی گرافن در حالت تعادل از معادله زیر تبعیت می‌کند [2]:

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

که  $v_f$  سرعت فرمی و  $n$  چگالی حاملین است و از معادله (3) قابل استخراج است:

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

که  $\varphi_i$  اختلاف توابع کار می‌باشد که در ساختار ما برابر با 0.2 eV است و  $N_D$  چگالی حالت‌های نیم‌رساناست. بنابراین انرژی فرمی گرافن بعد از پیوند بدون اعمال ولتاژ برابر با -0.09 eV است که علامت منفی نشان می‌دهد که گرافن به‌هنگام پیوند، با حفره آرایش شده است. بعد از پیوند، ارتفاع سد شاتکی ( $\Phi_{SBH}^0$ ) برابر 0.69 eV است. شکل (1) ساختار باندی گرافن-دی‌سولفید تنگستن بعد از پیوند را نشان می‌دهد.

## مقدمه

مواد دوبعدی دارای محدوده‌ی وسیعی از ویژگی‌های الکترونیکی هستند که می‌تواند از نیتريد برم (hBN)، نیم‌رساناهای دی‌چالکوجناید فلزات واسطه (TMDC) همانند دی‌سولفید مولیبدنوم ( $MoS_2$ )، دی‌سولفید تنگستن ( $WS_2$ ) تا گرافن شبه فلز را در برگیرد. تعداد زیادی از مواد دوبعدی همراه با ترکیبات هیبریدی آن‌ها، فرصت‌های جدیدی برای بررسی پدیده‌های نوری نوین به وجود می‌آورد. مواد دوبعدی می‌تواند شامل چندلایه، ساختارهای هیبریدی و یا فیلم‌های نازک لایه‌ای باشد که ضخامت آن‌ها از یک اتم تا چند ده نانومتر متغیر است [1]. گرافن نام یکی از آلوتروپ های کربن است و به‌عنوان یک شبه فلز شناخته می‌شود که هم خصوصیات نیم‌رسانا و هم یک فلز را می‌تواند داشته باشد. این ماده به علت داشتن خواص فوق‌العاده در رسانندگی الکتریکی و اپتیکی، چگالی بالا و تحرک پذیری حامل‌های بار و خواص مکانیکی به ماده‌ای منحصر به فرد تبدیل شده است [2]. گرافن به دلیل نازکی بسیار بالایی که دارد، نور را بیشتر از خود عبور می‌دهد. در واقع گرافن حدود ۹۷-۹۸ درصد نور را از خود عبور می‌دهد [3]. 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 می‌باشد. به‌همین منظور می‌توان از ترکیب گرافن با TMDC ها استفاده کرد که جذب نوری بالا دارند [4]. دی‌چالکوجناید فلزات واسطه دوبعدی دارای ویژگی‌های گسترده الکترونیکی، نوری، مکانیکی و حرارتی هستند که در سال‌های اخیر مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. 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 لایه‌ای با فرم X-M-X دارند [5]. به هنگام پیوند TMDC ها با گرافن (اگر تابع کار فلز بزرگتر از تابع کار نیم‌رسانا باشد)، سدی ایجاد می‌شود که به سد شاتکی معروف است، که این سد، سد انرژی پتانسیل برای الکترون‌هایی است که از فلز به نیم‌رسانا (نوع n) می‌آیند. سد شاتکی ویژگی یک‌سوسازی دارد و دارای جریان بالا و مقاومت کم دریک جهت و جریان قابل چشم‌پوشی 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 [6].

ما در این مقاله ساختار هیبریدی مبتنی بر گرافن و دی‌سولفید 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

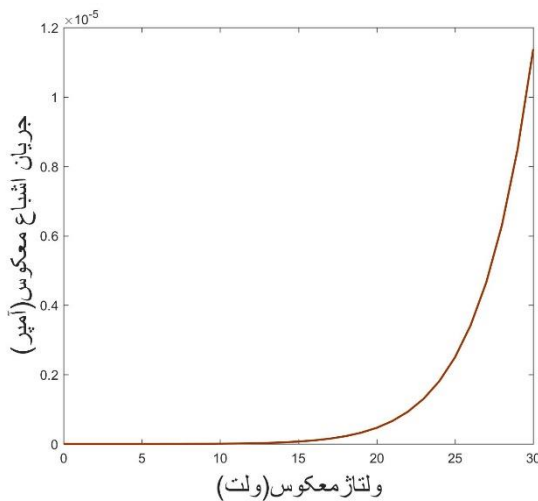
می تواند جریان ترمویونی را همان طور که در معادله (۶) بیان شده است، تحت تاثیر قرار دهد [۹].

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

که  $A_{2D}^*$  ثابت ریچاردسون و  $w$  پهنا 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.

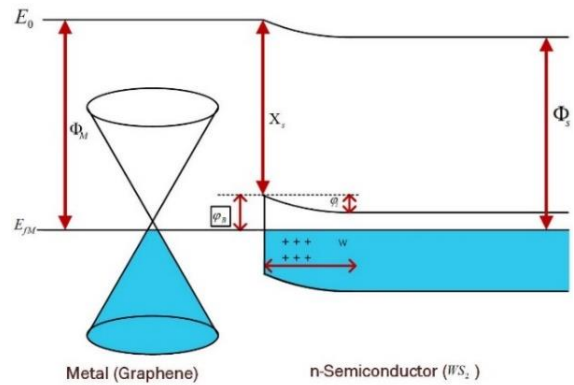
$$I = I_0 \left( e^{\frac{eV}{KT}} - 1 \right) \quad (6)$$

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.



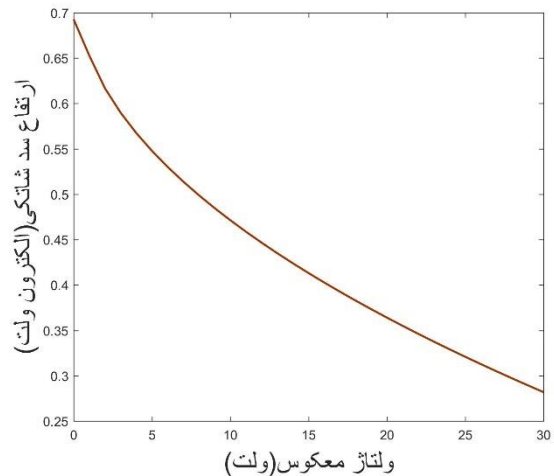
شکل (۱): ساختار باندی گرافن-دی سولفید تنگستن در حالت تعادل بعد از پیوند

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]:

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

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

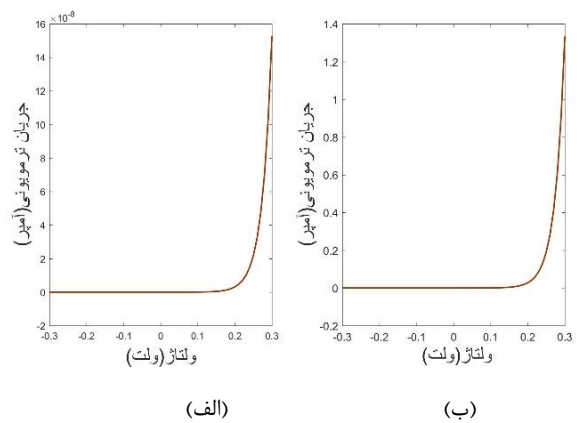
که  $a = \frac{h}{4\sqrt{\pi}} v_f \sqrt{\frac{\epsilon_s \epsilon_0 N_D}{2en}}$  است. ما با اعمال ولتاژ معکوس 30 ولت ارتفاع سد شاتکی را تا 0.28 eV کاهش دادیم. شکل (۲) تغییرات ارتفاع سد شاتکی با اعمال ولتاژ معکوس را نشان می دهد.



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. Karabiyyik, S. Das, W. Choi, and N. Pala, "Highly sensitive wide bandwidth photodetectors based on internal photoemission in CVD grown P-type MoS<sub>2</sub>/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 WS<sub>2</sub> photodetectors," Adv. Opt. Mater. Vol 10, pp. 1573-1581, 2016.



شکل (۴): نمودارهای 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 WS<sub>2</sub> with graphene electrodes," ACS Nano., Vol 10, pp. 7866-7873, 2016.