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-دی‌چالکوجناید فلزات واسطه دو بعدی

صبا سپه بان شاهگلی[1]، سید فرشاد اختریان فر[1]، سعید شجاعی[1,2]

[1]پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز
[2]گروه فوتونیک و فناوری پلاسما، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، ایمیل:s.sepahban@ms.tabriz.ac.ir

چکیده – مواد دوبعدی دی‌چالکوجناید فلزات واسطه، مواد جدید در حال ظهور هستند که خصوصیات آن‌ها سبب جذاب شدن آن‌ها برای کاربردهای نانو فوتونیکی و نانو الکترونیکی شده است. همین‌طور مواد دوبعدی مانند گرافن که شبه فلز است، اگر با نیم‌رساناهای دوبعدی ترکیب شود، ساختارهای هیبریدی واندروالسی تشکیل می‌دهد که این افزاره‌ها دارای رفتارهای غیرقابل‌پیش‌بینی است. ما، در این مقاله به‌صورت نظری ساختار هیبریدی متشکل از گرافن و دی‌سولفید تنگستن را مدل بندی کرده‌ایم که پیوند این دو ایجاد سد شاتکی می‌کند. اعمال میدان خارجی ارتفاع سد شاتکی را از مقدار اولیه 0.69 به 0.28 الکترون‌ولت تغییر می‌دهد 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 ترمویونی افزایش خواهد داشت که قابلیت بهره‌برداری از این ساختار ها در آشکارسازی برای افزایش پاسخ‌دهی نوری و بهره را ممکن می‌سازد.

کلیدواژه- « دی چالکوجناید فلزات واسطه،ساختار هیبریدی، سد شاتکی، گرافن، مواد دوبعدی »

Engineering of Schottky Barrier Height in Graphene -Transition Metal Dichal**goce**nide-**based** Heterostructures

Saba Sepahban Shahgoli[1], Seyed Farshad Akhtariyan Far[1], Saeid Shojaei[1,2]

[1]Research Institute for Applied Physics & Astronomy, University of Tabriz
[2]photonics 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 dichalgocenides are new generated materials which became attractive for nano photonic and nano electronic applications, because of their unique properties. Also 2D materials like grapheme 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 dichalgocenide, two dimensional materials.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

مقدمه

مواد دوبعدی دارای محدوده‌ی وسیعی از ویژگی‌های الکترونیکی هستند که می‌تواند از نیترید برم(hBN)، نیم‌رساناهای دی‌چالکوجنایدفلزات واسطه(TMDC) همانند دی‌سولفید مولیبدنیوم (MoS2)، دی‌سولفید تنگستن (WS2) 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[۱] . گرافن نام یکی از آلوتروپ های کربن است و به‌عنوان یک‌شبه 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 تحرک‌پذیری حامل‌های بار و خواص مکانیکی به ماده‌ای منحصربه‌فرد تبدیل‌شده است[۲]. گرافن به دلیل نازکی بسیار بالایی که دارد، نور را بیشتر از خود عبور می‌دهد. درواقع گرافن حدود ۹۷-۹۸ درصد نور را از خود عبور می‌دهد[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 می‌باشد. به‌همین منظور می توان از ترکیب گرافن با TMDC ها استفاده کرد که جذب نوری بالا دارند[۴]. دی‌چالکوجناید فلزات واسطه دوبعدی دارای ویژگی‌های گسترده الکترونیکی، نوری، مکانیکی و حرارتی هستند که در سال‌های اخیر موردمطالعه قرارگرفته‌اند. این مواد گروهی از مواد هستند که دارای فرمول MX2 هستند. که M، یک فلز واسطه از گروه۴، ۵ یا گروه ۶(Mo،...) است و X یک چالکوجناید (S،...) است. این مواد ساختارهای لایه‌ای بافرم X-M-X دارند[۵]. 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 (نوعn) می‌آیند. سد شاتکی ویژگی یک‌سوسازی دارد و دارای جریان بالا و مقاومت کم دریک جهت و جریان قابل‌چشم‌پوشی و مقاومت‌بالا در جهت مخالف هستند.پارامتر موردبررسی در این سد ها، ارتفاع سد شاتکی (SBH) است و معمولا جریان های غالب در سد های شاتکی، جریان ترمویونی است[۶].

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 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 ونتایج

اولین بار در مقاله Tongay[۷] مدل سازی گرافن-نیم‌رسانا صورت گرفت که یک مدل ساده برای تغییرات جریان ترمویونی بیان کرد که نشان می‌داد که جریان‌اشباع معکوس در حضور بایاس ولتاژ افزایش می یابد. در دیود های فلز-نیم‌رسانا 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 نیم‌رسانا باعث جابجایی تراز فرمی گرافن می شود. 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 معمولا بایاس کم اعمال می شود، این شیفت بسیار کم است.

در بایاس معکوس، ناحیه ی تهی نیم‌رسانا افزایش می یابد واین 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]:

$$\varphi_{SBH} = \Phi_M - \chi_S \qquad (۱)$$

که Φ_M تابع کار گرافن (4.6 ev) و χ_S الکترون‌خواهی دی‌سولفید 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 می‌کند[۲]:

$$E_{fM} = \pm \frac{h}{2\sqrt{\pi}} v_f \sqrt{n} \qquad (۲)$$

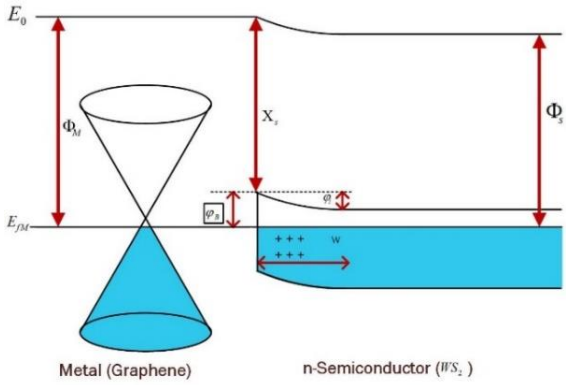
که v_f سرعت فرمی و n چگالی حاملین است واز معادله (۳) قابل استخراج است:

$$n = -\sqrt{2\varepsilon_0 \varepsilon_s N_D (\varphi_i - KT/e)/e} \qquad (۳)$$

که φ_i اختلاف توابع کار می‌باشدکه در ساختارما 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 می‌دهدکه گرافن به‌هنگام پیوند، با حفره آلایش شده است. بعد از پیوند، ارتفاع سد شاتکی (φ^0_{SBH}) برابر 0.69 ev است. شکل (۱) ساختار باندی گرافن-دی‌سولفید تنگستن بعد از پیوند را نشان می‌دهد.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]



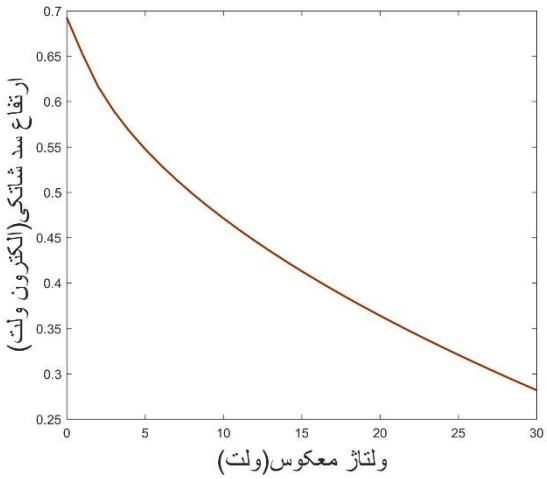
شکل(۱):ساختار باندی گرافن- دی‌سولفید تنگستن درحالت تعادل بعد از پیوند

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

$$\varphi_{SBH}(v) = \varphi^0_{SBH} - \Delta E_{fM}(v) \qquad (۴)$$

$$= \varphi^0_{SBH} - a(\sqrt{(\varphi_i - V - kT/e)} - \sqrt{\varphi_i - KT/e})$$

که $a = \frac{h}{4\sqrt{\pi}} v_f \sqrt{\frac{\varepsilon_s \varepsilon_0 N_D}{2en}}$ 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 می‌دهد.



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

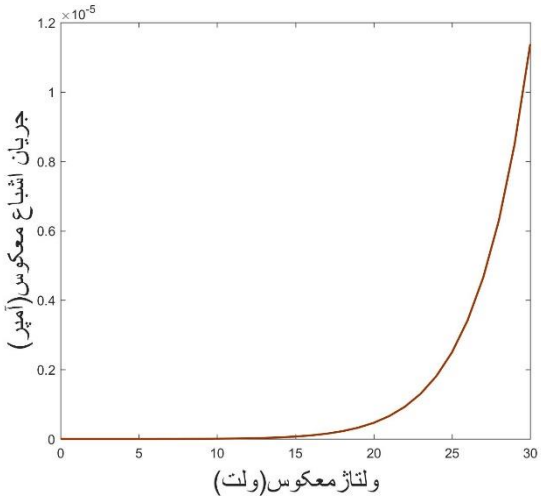
جریان غالب در سیستم های شاتکی جریان ترمویونی است. تغییرات ارتفاع سد شاتکی، سبب تغییرات جریان اشباع معکوس همانند معادله ی (۵) می شود که تحت عنوان I_0 می تواند جریان ترمویونی را همان طور که در معادله (۶) بیان شده است، تحت تاثیر قرار دهد[۹].

$$I_0 = wA^*_{2D}T^{\frac{3}{2}}e^{\frac{-e\varphi^0_{SBH}}{KT}} \qquad (۵)$$

که A^*_{2D} ثابت ریچاردسون و w پهنای پیوند و برابر با ۴ میکرومتر ا ست 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.

$$I = I_0(e^{\frac{eV}{KT}} - 1) \qquad (۶)$$

تغییرات I_0 با اعمال ولتاژمعکوس با جاگذاری معادله(۴) در معادله (۵) به دست می‌آید که در شکل(۳) نشان داده شده است.

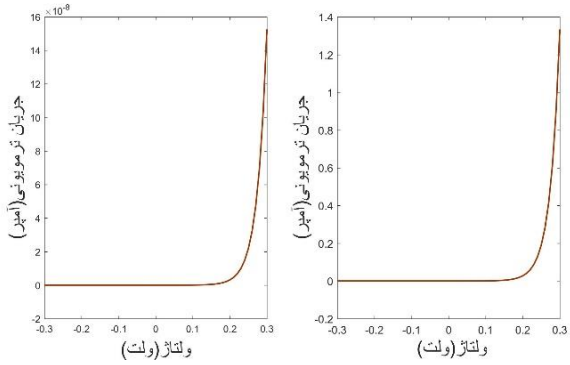


شکل(۳):تغییرات جریان اشباع معکوس(I_0) با ولتاژمعکوس اعمالی

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 می‌دهد که تا ۱,۳ آمپر افزایش پیدا کرده است.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]



(الف) (ب)

شکل(۴):نمودار های جریان-ولتاژ: الف) ارتفاع سد شاتکی اولیه، ب) ارتفا ع 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 الکترون‌ولت به 0.28 الکترون‌ولت کاهش دادیم و با کاهش ارتفاع سد شاتکی، باز تزریق الکترون ها از گرافن به نیم‌رسانا 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 بازتزریق 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_2 with graphene electrodes," ACS Nano.,Vol 10, pp. 7866-7873, 2016.

[4] P. K. Vabbina, N. Choudhary, A. Chowdhury, R. Sinha, M. Karabiyik, S. Das, W. Choi, and N. Pala, "Highly sensitive wide bandwidth photodtectors based on internal photoemission in CVD grown P-type MoS_2/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_2 photodetectors," Adv. Opt. Mater. Vol 10, pp. 1573-1581, 2016.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]