بیست و هفتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و سیزدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه سیستان و بلوچستان،
زاهدان، ایران.
۱۴-۱۶ بهمن ۱۳۹۹

کد مقاله : ۱-۲۵۳۱-۱۰-A

انباشت بخار فیزیکی نانوساختارهای مولیبدن دی سولفید در فشارهای متفاوت با نرم افزارکامسول

آرزو زارعی[۱]، مسعود علی محمدی[۲]

[۱]دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای، دانشگاه صنعتی شاهرود، سمنان، ایران

[۲]گروه فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران

چکیده –شبیه سازی نانوساختارهای MoS_2 با روش انباشت تبخیر فیزیکی و با استفاده از نرم افزار کامسول انجام شده است. هندسه دو بعدی با تقارن محوری برای بهینه سازی زمان شبیه سازی ترسیم گردید. در این شبیه سازی، با تغییر فشار، ضخامت لایه های MoS_2 اندازه گیری شد و مقدار بهینه فشارگاز آرگون در دمای ثابت برای به وجود آمدن تک لایه های MoS_2 به دست آمد. نرخ لایه نشانی بر روی زیرلایه و دیواره اتاقک خلاء به دست آمد. همچنین در فشار بهینه شار مولکولی نانوذرات MoS_2 بر روی زیرلایه نیز محاسبه شد. این لایه ها در ساخت ابزارهای مرتبط به حوزه نانوالکترونیک و اپتوالکترونیک کاربرد بسیاری دارند.

کلید واژه- انباشت بخار فیزیکی، تک لایه های MoS_2، نانوساختارهای MoS_2، نرم افزار کامسول

Physical Vapor Deposition of MoS_2 Nano Structures in the Different Pressuresby COMSOL Multiphysics

Arezou Zarei[1](A.zareie@gmail.com), Masoud Alimohamadi[2a]

Department of Physics and Nuclear power, Shahrood University of Technology, Semnan, Iran

Department of Physics, Farhangian University, Tehran, Iran

Abstract- Vapor deposition method was used for the simulation of MoS_2 nano structures by COMSOL Multiphysics. Optimum simulation time has been achieved by a two-dimensional axisymmetric geometry. In this work, the thickness of MoS_2 thin films was measured in the different pressures, and the optimum Arpressure for monolayer MoS_2 in the constant temperature has been determined. Growth rate has been obtained on the chamber walls and on the substrate. Also, Incident molecular flux for the optimum pressurehave been computed on the substrate. These thin films have enormous potentials in the next generation of nanoelectronic and optoelectronic devices.

Keywords: Physical vapor deposition (PVD), monolayer MoS_2, MoS_2 nanostructures, COMSOL software

[a]M.alimohamadi@cfu.ac.ir

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترس باشد.

مقدمه

مولیبدن دی‌سولفید (MoS_2) از دسته فلزات دی‌کالکوژناید (TMD) می‌باشد که در سال‌های اخیر همانند مواد دوبعدی گرافن‌گونه توجه بسیاری از دانشمندان و محققان را به خود جلب کرده است[۱-۲]. مولیبدن دی‌سولفید تک‌لای هشامل یک ساختار شش گوشی می‌باشد که هر صفحه از اتم های مولیبدن منظم در ساختار شش گوشی توسط دو صفحه منظم شش گوشی اتم گوگرد احاطه شده است. ماده حجیم مولیبدن دی سولفید از چندین مولیبدن دی‌سولفید تک لایه تشکیل می‌شود. این تک لایه ها در ماده حجیم توسط نیروهای وان در والس ضعیف در کنار یکدیگر قرار می‌گیرند. ماده حجیم مولیبدن دی سولفید گاف انرژی غیر مسقیمی در حدود eV ۱.۲۹ دارد، درحالیکه یک تک لایه از MoS_2 دارای یک گاف انرژی مستقیم در حدود eV ۱.۸است [۳].

یک لایه از MoS_2 از نظر اتمی دارای ضخامت تقریبی ۷Å است[۴]. روش‌های معمول برای لایه نشانی تک‌لایه‌ها وچندلایه‌های MoS_2، انباشت بخار شیمیایی(CVD)، و انباشت بخار فیزیکی (PVD) هستند [۵و۶]. یکی از مزیت-های PVD، سادگی و در دسترس بودن آن است درحالیکه دارای معایبی چون عدم یکنواختی لایه‌ی لایه نشانی شدهو عدم وجود استوکیومتری می‌باشد[۵]. این ماده به علت خواص منحصر به فردی که از خود نشان می‌دهد، کاربرد بسیاری در اپتوالکترونیک و نانوالکترونیک دارد[۴].

موراتور و همکارانش، لایه‌های بسیار نازک MoS_2 را به روش انباشت تبخیر فیزیکی بر روی دو نوع زیرلایه، لایه نشانی کردند و پس از انجام آنالیزهای مختلف متوجه شدند سه تا چهار لایهMoS_2 بر روی زیرلایه نشانده شده است[۷].

در این پژوهش، شبیه سازی لایه نشانی به روش تبخیر حرارتی روی زیرلایه‌ی سیلیکون انجام شد. به دلیل اهمیت مواد دوبعدی در ساختارهای الکترونیکی از منبع MoS_2 استفاده گردید و در فشارهای مختلف، ضخامت‌های متفاوتی از این لایه‌ها روی زیرلایه نشست. این شبیه سازی با نرم افزار کامسول ورژن ۵.۵ انجام شده است.

تعاریف اولیه

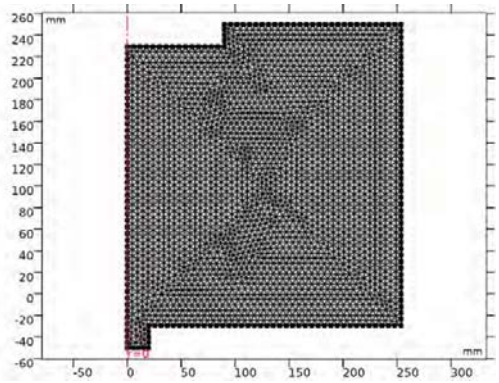
پارامترهای مورد نظر که در این شبیه‌سازی استفاده شده اند در جدول ۱ آورده شده است. فشارهای مورد استفاده در شبیه‌سازی سیستم لایه‌نشانی به ترتیب با نام های P_1 و P_2در جدول آمده است.

جدول۱. مقادیر اولیه وارد شده در شبیه سازی همراه با واحدهای مربوطه.

توصیف	واحد	مقدار	کمیت
دمای محیط	K	۲۹۳.۱۵	T_{amb}
دمای اعمالی به بوته	K	۱۵۰۰	T_{evap}
فشار	Pa	۵۰	P_1
فشار	Pa	۴×۱۰^{-۳}	P_2
وزن مولکولی MoS_2	g/mol	۱۶۰.۰۷	M_0
چگالی MoS_2	g/cm^3	۵.۰۶	rho_0

هندسه، فیزیک مساله و مش‌بندی

در این شبیه سازی هندسه‌ی دو بعدی با تقارن محوری استفاده شده است. این هندسه یک اتاقک خلاء استوانه‌ای را نشان می‌دهد که محل قرارگیری زیرلایه و بوته در آن مشخص شده است. همان طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود،مقیاس شبیه‌سازی میلی‌متردر نظر گرفته شده که این امر باعث کاهش زمان محاسبات می‌گردد. کل زمان محاسبه دو دقیقه و سه ثانیه



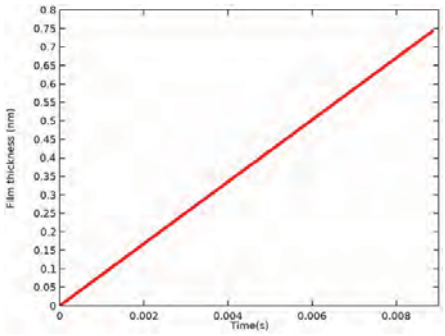
شکل ۱: مش بندی هندسه در یک اتاقک خلاء استوانه ای. محل قرارگیری بوته در r=0mm و z=-50 mm است درحالیکه زیرلایه در مختصات r=0 mm و z=230 mm واقع شده است.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترس باشد.

می‌باشد.در این هندسه تنها از یک بوته استفاده شده است و زیرلایه دقیقا روبروی بوته قرار دارد. برای فیزیک مساله از مدل شاره‌ای و اینترفیس *RarefieldFlow* استفاده شده است. مش‌بندی در شکل ۱ آورده شده است. این مش‌بندی شامل ۵۱۶۹ مثلث آزاد است که کیفیت کوچکترین عنصر آن ۰.۶۹ می‌باشد. همچنین برای دور هندسه، مش لبه به کار رفته است.

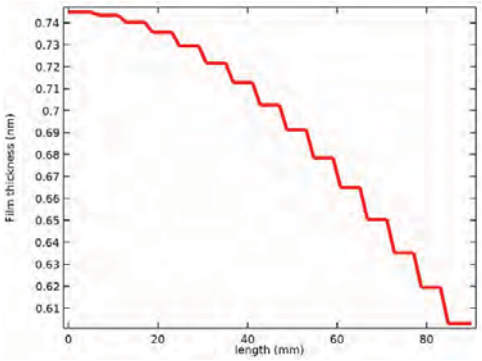
بحث و نتیجه گیری

در این شبیه‌سازی، علاوه بر لایه نشانی بر روی زیرلایه، میزان MoS_2 تبخیر شده بر روی سطح اتاقک خلاء نیز اندازه‌گیری شد. اتاقک خلاء با گاز آرگون پرشده است. گاز مورد نظر یک گاز ایده آل درنظر گرفته شده است که در دما و حجم ثابت، با تغییر فشار شاهد تغییر در میزان مول لایه نشانی شده خواهیم بود.



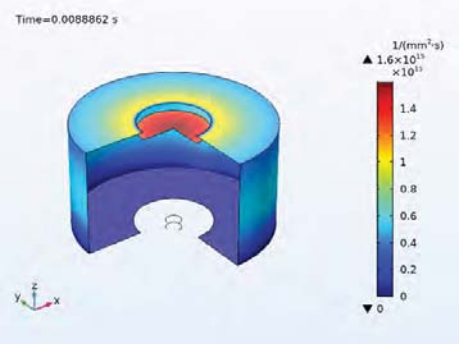
شکل ۲: ضخامت لایه MoS_2 روی زیرلایه و بر حسب زمان.

با اعمال فشار P_1 ، ضخامت لایه MoS_2بر حسب زمان اندازه‌گیری شد. شکل۲، ضخامت لایه MoS_2 بر روی زیرلایه Si را نشان می‌دهد که نمایانگر تشکیل یک لایه MoS_2 در زمان کمتر از ۰.۰۱ ثانیه می‌باشد. عدم یکنواختی لایه بر روی زیرلایه Si نیز در شکل ۳ نمایش داده شده است.



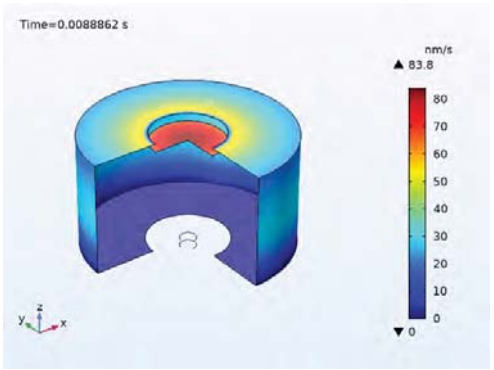
شکل ۳: ضخامت لایه MoS_2 روی زیرلایه با شعاع ۹۰ میلی متر

در مرکز زیرلایه ، لایه MoS_2 دارای ضخامت بیشتری نسبت به لبه‌های زیرلایه می باشد.شکل ۴ نمایانگر شار فرودی MoS_2 بر روی سطوح چمبر و زیرلایه Si می‌باشد. همان طور که مشخص است این شار روی زیرلایه دارای مقدار بیشینه $1.6\times10^{15}\ /mm^2.s$ می‌باشد. سپس بیشترین شار به ترتیب متعلق به درب چمبر و دیواره‌ها می‌باشد.



شکل ۴: شار مولیMoS_2 فرودی بر روی سطوح اتاقک خلاء و زیر لایه.

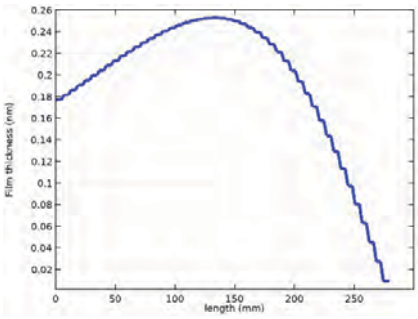
نرخ لایه‌نشانی MoS_2 بر روی سطوح اتاقک خلاء و زیرلایه که یکی از پارامترهای مهم در لایه‌نشانی است نیز در شکل ۵ گزارش شده است.نرخ لایه‌نشانی بر روی مرکز زیرلایه nm/s ۸۴ می‌باشد.



شکل ۵: نرخ لایه نشانی MoS_2 بر روی سطوح اتاقک خلاء و زیر لایه.

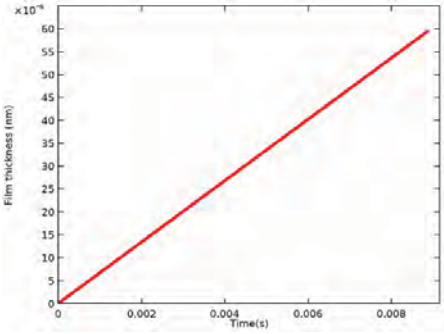
ضخامت لایه MoS_2 بر روی دیواره ها نیز به طور جداگانه اندازه گیری و نتایج آن در شکل ۶ نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، ضخامت این لایه در وسط دیواره مقداری بیشینه و تقریبا برابر با $0.257nm$ است.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترس باشد.



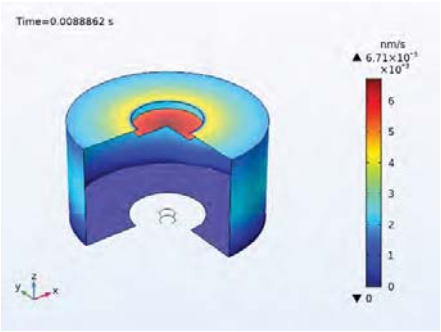
شکل ۶: ضخامت لایه MoS_2 بر روی سطوح دیواره های جانبی اتاقک خلاء.

در فشار P_2، ضخامت لایه و نرخ لایه‌نشانی اندازه‌گیری شد(شکل ۷و ۸).



شکل ۷: ضخامتMoS_2بر روی زیرلایه بر حسب زمان در فشار P_2.

همان طور که انتظار داشتیم در فشارهای پایین تر ضخامت لایه کمتر است.این به این معناست که اگر بخواهیم یک لایه MoS_2 با فشار P_2 داشته باشیم، می‌بایست لایه نشانی را تا زمان یک دقیقه و ۴۴ ثانیه ادامه دهیم. شکل ۸ نرخ لایه‌نشانی پایین‌تری را نسبت به شکل ۵ نشان می‌دهد که دور از انتظار نیست.



شکل ۸: نرخ لایه نشانی MoS_2 بر روی سطوح اتاقک خلاء و زیر لایه در فشار P_2.

نتیجه گیری

در این مطالعه، شبیه سازی انباشت تبخیر فیزیکی (PVD) برای لایه نشانی لایه های MoS_2 به کمک نرم افزار کامسول انجام شده است. با تغییر فشار در اتاقک خلاء، تغییراتی در ضخامت لایه MoS_2 به وجود آمد. این تغییرات نشان می‌دهد که چه بازه زمانی برای لایه‌نشانی تک‌لایه‌ی MoS_2 نیاز می-باشد. با یافتن فشار بهینه برای هندسه رسم شده، تک‌لایه‌های MoS_2 لایه‌نشانی شدند. همچنین میزان لایه‌یMoS_2 که بر دیواره اتاقک خلاء نیز رسوب کرده بود تعیین گردید. نرخ لایه-نشانی و شارمولکولی فرودی بر زیرلایه برای فشار بهینه تعیین شد. مطالعات بعدی برای کاربرد این لایه‌ها در علم اپتوالکترونیک ادامه خواهد داشت.

مرجع‌ها

[1] K. F.Mak, Ch. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, *"Atomically Thin MoS_2: A new direct-gap semiconductor"*, Phys. Rev. Lett., Vol. 105, pp. 136805, 2010.

[2] D. L. Tiwari, K. Sivasankaran, *"Few-Layer MoS2: A Promising Layered Semiconductor"*,ACS Nano, Vol. 8, 4074–4099, 2014.

[3] S. Bertolazzi,Charge-transport properties of monolayer MoS_2 at the interface with dielectric materials, p. 1-6,ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE, 2015.

[4] L. -p. Feng, H.-q. Sun, A. Li, J. Su, Y. Zhang, Z.-t. Liu, "Influence of Mo-vacancy concentration on the structural, electronic and optical properties of monolayer MoS2: A first-principles study", Materials chemistry and physics, Vol. 209, pp. 146-151, 2018.

[5] S.Sivarajan, R.Padmanabhan, *"Characterization of thermally evaporated MoS2 thin film coatings"*, Materials Today: Proceedings, Vol. 3, pp. 2532–2536, 2016.

[6] M. Liu, J. Shi, Y. Li, X. Zhou, D. Ma, Y. Qi, Y. Zhang,Zh. Liu, *"Temperature-Triggered Sulfur Vacancy Evolution in Monolayer MoS2/Graphene Heterostructures"*, Small, Vol. 13, pp. 1602967, 2017.

[7] C. Muratore, J. J. Hu, B. Wang, M. A. Haque, J. E. Bultman, M. L. Jespersen, P. J. Shamberger, M. E. McConney, R. D. Naguy, and A. A. Voevodin, "*Continuous ultra-thin MoS2 films grown by low-temperature physical vapor deposition*", APPLIED PHYSICS LETTERS, Vol. 104, pp. 261604, 2014.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترس باشد.