

Vilniaus universiteto
Fizikos fakulteto
Fotonikos ir Nanotechnologijų institutas

Domantas Česnys

DVIMAČIŲ SLUOKSNIŲ HETEROSANDURŲ ELEKTRINIŲ
CHARAKTERISTIKŲ TYRIMAI IR TAIKYMAS MOLIBDENO DISULFIDO
AUGINIMO SĄLYGOMS TIKSLINGAI KEISTI

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Fotonikos ir nanotechnologijų fizikos studijų programa

Studentas

Domantas Česnys

Darbo vadovas

Dr(hp). Arūnas Šetkus

FTMC Skyriaus vadovas

Dr(hp). Arūnas Šetkus

Vilnius 2022

Turinys

Įvadas.....	3
1. Teorinė dalis	4
1.1. 2D medžiagų apžvalga	4
1.2. Pereinamųjų metalų dichalkogenidai	5
1.3. 2D medžiagų formavimo metodai	7
1.4. Van der Valso heterosandūros.....	9
1.5. Sandūrų charakterizavimo metodai	9
1.6. Van der Valso heterosandūrų formavimo problemos.....	10
2. Tyrimo metodika.....	11
2.1. Bandinių paruošimo metodika.....	11
2.2. I-V ir C-V charakteristikų matavimo metodai	12
2.3. Charakteringų sandūros parametrų skaičiavimo metodai	12
2.4. Paviršiaus charakteristikos	14
2.5. Ramano spektroskopija	14
3. Eksperimentiniai rezultatai	15
3.1. Išmatuotos MoS ₂ /p-Si sandūros I-V charakteristikos	15
3.2. Išmatuotos MoS ₂ /p-Si sandūros C-V charakteristikos	19
3.3. MoS ₂ /p-Si struktūros AFM topografija.....	26
3.4. MoS ₂ /p-Si struktūros Ramano spektrai	27
3.5. Rezultatų aptarimas	28

Pagrindiniai rezultatai ir išvados	32
Literatūros sąrašas	33

Ivadas

Heterosandūros iš pereinamųjų metalų disulfidų (TMD), grafeno bei plonųjų oksidų sluoksnių pasižymi unikaliomis savybėmis, tinkančiomis kombinuoti fotovoltinį efektą su savybių atsaku kitiems išorės fiziniams poveikiams (šviesa, dujos, slėgis ir t.t.). Tačiau tokių heterosandūrų veikimas nėra gerai suprantamas, naudojant žinomus modelius, aprašančius plačiai tyrinėtus darinius kristalinėse medžiagose.

Tiriant elektrines (I-V ir C-V) ir optines savybes, o taip pat sandarą bei morfologiją, yra gaunami charakteringieji parametrai, tinkami ne tik veikimo modeliui sukurti, bet ir pasiūlyti metodą bei kriterijus technologinėms sąlygoms tikslingai keisti taip, kad būtų suformuota prognozuojamų parametru heterosandūra.

Šiame darbe buvo auginami dvimatės medžiagos savybėmis pasižyminčio MoS₂ sluoksnių dariniai, naudojant originalią FTMC sukurtą metodiką. Darbe buvo siekiama pritaikyti I-V, C-V, AFM mikroskopijos ir Ramano spektroskopijos metodikas tokiems dariniams charakterizuoti bei atskleisti technologinių procesų sąlygų įtaką parametrų.

Darbo tikslas: Vertikalios heterosandūros tarp kristalinio silicio ir dvimačio molibdeno disulfido formavimo sąlygų įtakos elektrinėms charakteristikoms, bandinių topografijai ir Ramano spektrams tyrimai.

Darbo užduotys:

1. Ištirti p-Si/Mo ir p-Si/MoS₂ heterosandūrų charakteristikas I-V ir C-V:
 - išmatuoti charakteristikas ir jų priklausomybes nuo bandinių sierinimo temperatūros bei srauto,
 - pritaikyti modelinį aprašymą; pagrįsti galimybes gauti charakteringiems sandūros parametrams,
 - palyginti charakteringus sandūros parametrus suskaičiuotus iš I-V ir C-V charakteristikų bei paviršiaus charakteristikų ir Ramano spektrų,
 - remiantis gautais rezultatais, pasiūlyti principus, tinkančius sierinimo sąlygom tikslingam keitimui taip, jog būtų galima suformuoti iš anksto parenkamų charakteristikų sandūrą p-Si/MoS₂.

1. Teorinė dalis

1.1. 2D medžiagų apžvalga

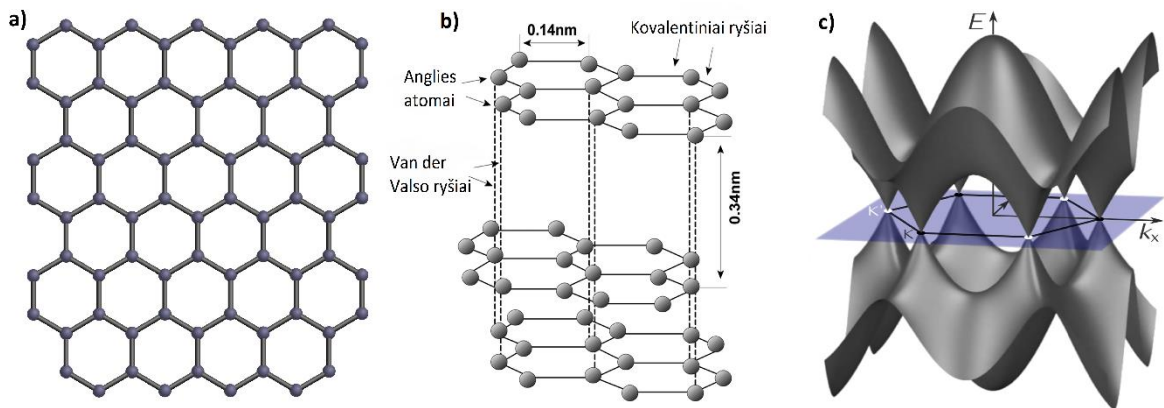
Žvelgiant iš naujos kartos elektroninių prietaisų technologijų perspektyvos, draustinės juostos tarpas ir krūvininkų judris yra du labiausiai traukiantys dėmesį medžiagų parametrai, kuriuos bandoma tikslingai valdyti naujai atrandamose medžiagose lankstesnėmis priemonėmis, lyginant su tradiciniais puslaidininkiais. Taip vadinamos dvimatės medžiagos pasižymi tuo, kad sluoksnio storis yra palyginamas su atominės plokštumos storiu arba yra tos pačios eilės, kuomet kitos dvi lakšto dimensijos yra daug kartų didesnės. Dėl to tokios medžiagos struktūra primena labai ploną popieriaus lapą.

Per pastaruosius dvidešimt metų dvimatės (2D) nanomedžiagos, itin domino mokslininkus savo elektrinėmis, cheminėmis bei fizinėmis savybėmis, kurios dažniausiai stipriai skiriasi nuo tūrinių trimačių (3D), dažniausiai kristalo struktūra pasižyminčių, medžiagų savybių. 2D-medžiagų elektrinių savybių unikalumą lemia elektronų apribojimas dvejomis dimensijomis bei galimybė kloti lakštą ant lakšto taip keičiant 2D medžiagos darinio storį. Keičiant šių medžiagos atominių plokštumų skaičių, galima ženkliai keisti viso darinio savybes, kaip įrodyta, pvz., [1], [2]. 2D medžiagų darniai pasižymi itin didele elektrine talpa dėl didelio paviršiaus ploto bei mažo atstumo tarp sluoksnių, kas yra labai patrauklu superkondensatorių gaminiame.

Įprastai medžiagos, tokios kaip grafitas turi labai stiprius kovalentinius ryšius tarp atomų vienoje plokštumoje, o šios plokštumos yra sujungtos silpnais Van der Valso (*Van der Waals*) ryšiais (*1 pav. b*), todėl panaudojus jėgą, Van der Valso ryšiai greitai nutrūksta ir gali atrodyti, kad grafitas nėra patvari medžiaga. Taigi panaikinus silpnus Van der Valso ryšius medžiagoje lieka tik stiprūs kovalentiniai ryšiai ir 2D medžiaga pasidaro itin patvari ir lanksti. [2]

Kone seniausiai žinoma ir labiausiai ištyrinėta 2D medžiaga yra grafenas. 2004 metais Andre Geim ir Konstantin Novoselov pateikė savo mokslinį tyrimą, kuriame aprašo grafeno gavybos iš grafito metodą, naudojant tik lipnią juostą ir 2010 metais už šį darbą gavo fizikos Nobelio premiją [3]. Grafenas, tai vieno atomo storio grafito sluoksnis, kurio atomai, susijungę kovalentiniais ryšiais, suformuoja heksagoninės struktūros plokštumą (*1 pav. a*). Dėl heksagoninės struktūros ir stiprių kovalentinių ryšių grafeno sluoksnis yra lanksti ir ypač mechaniškai tvirta medžiaga, kurios lūžio jėga siekia 42 N m^{-1} , o Jungo modulis – 10 TPa [4]. Grafeno valentinė ir laidumo juostos susitinka taip vadinamuose Dirako taškuose (*Dirac*

points), dėl šios priežasties grafenas yra nulinio draustinės juostos tarpo puslaidininkis (1 pav. c). Kita unikali grafeno savybė yra ta, jog elektronai grafene gali nukeliauti kelis mikrometrus neišsklaidomi, todėl grafene teoriškai galima pasiekti itin didelius krūvininkų judrius, siekiančius $10\,000\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$ kambario temperatūroje, ir, dėl to, suformuoti prietaisus su puikiu elektriniu laidumu [5] [6].



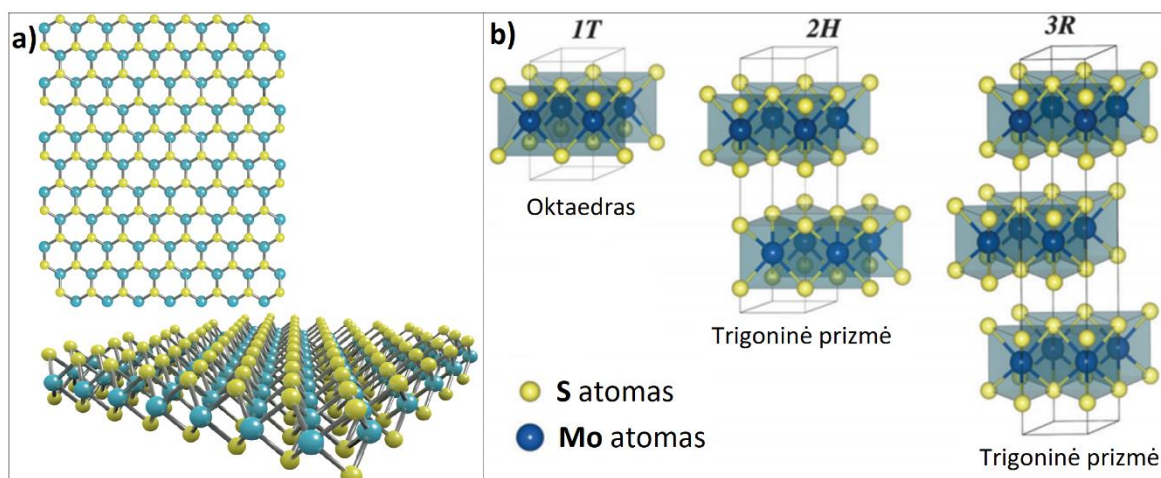
1 pav. Heksagoninė grafeno struktūra (a). Anglies atomus plokštumoje jungiantys kovalentiniai ryšiai ir plokštumas jungiantys Van der Valso ryšiai grafite (b). Grafeno elektroninė juostinė struktūra (c).

1.2. Pereinamųjų metalų dichalkogenidai

Pereinamųjų metalų dichalkogenidai (TMD arba TMDC) yra sluoksniuotos puslaidininkinės medžiagos, traukiančios mokslinio pasaulio dėmesį. Šios medžiagos yra sudarytos iš dviejų elementų ir jų bendra cheminė formulė yra MX_2 , kur M yra pereinamasis metalas (Mo, W, Ti ir t. t.), o X reiškia vieną iš chalkogenidų (S, Se, Te). TMD struktūra kaip ir grafito yra sudaryta iš plokštumų, kurie tarpusavyje jungiasi Van der Valso ryšiais, o atomai plokštumose yra sujungti kovalentiniais ryšiais. Vienas TMD sluoksnis turi tris atominius sluoksnius, kuriuose pereinamojo metalo M atominis sluoksnis yra išsprautas tarp dviejų chalkogenidų X atominių sluoksnių (2 pav. a) [7].

Dichalkogenidai turi savybę formuoti skirtingus kristalinius politipus arba giminingas struktūras, kurių susidarymas priklauso nuo kristalų auginimo mechanizmo. Dažniausiai pasitaikančios kristalinių politipų formos yra trigoninė prizmė bei oktaedras (2 pav. b). Šios formos apibūdina pereinamųjų metalų atomų koordinaciją kristalinėje struktūroje. Molibdeno disulfidas (MoS_2) gali kristalizuotis į tris skirtingas kristalines struktūras: 1T, 2H ir 3R. Skaičius reiškia kiek MoS_2 sluoksnių yra kristalo vienetinėje celėje, o raidės nusako

simetrijos tipą (T – tetragoninė, H – heksagoninė ir R – romboedrinė). Iš šių struktūrų termodinamiškai stabiliausia ir labiausiai paplitusi yra 2H struktūra [1] [5].



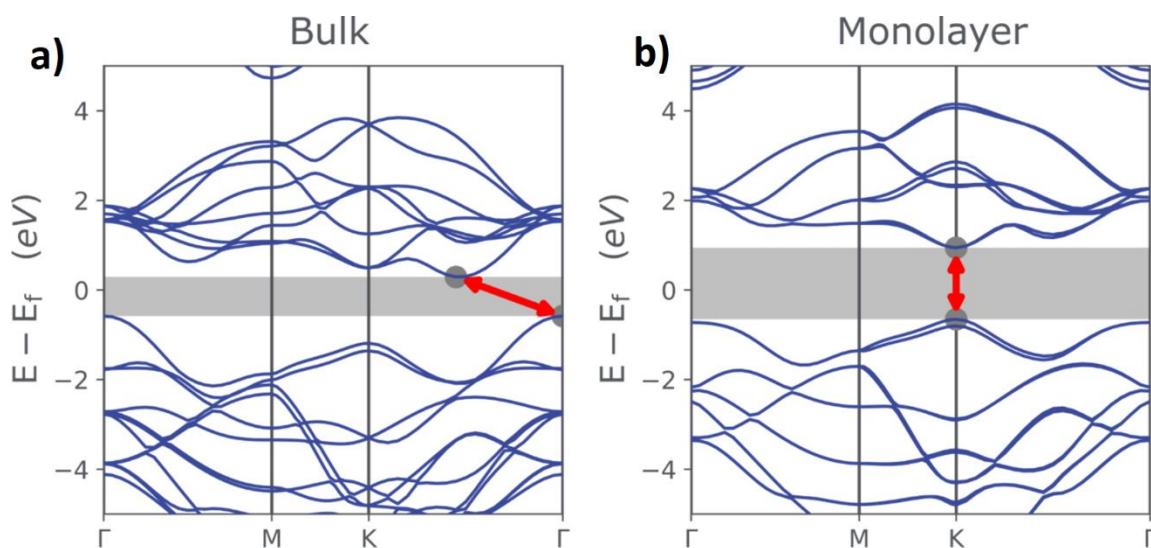
2 pav. MoS₂ vieno sluoksnio struktūra (a) ir trys galimi MoS₂ kristaliniai politipai (b) [8].

Tūrinis kristalas MoS₂ yra netiesiatarpė n tipo puslaidininkinė medžiaga, kurios draustinių energijų tarpas yra apie 1,2 eV (3 pav. a). Atskirų molibdeno disulfido sluoksnių elektrinės savybės kardinaliai skiriasi lyginant su 3D MoS₂. Pašalinus tarp sluoksnių sąveiką ir padarius MoS₂ vienos molekulės storio sluoksnį, elektronai yra apriboti vienoje nanometriniame storio plokštumoje. Dėl to, šiai 2D-tipo medžiagai yra būdingas tiesioginis draustinės juostos tarpas, kurio energija yra maždaug 1,8 eV – 1,9 eV (3 pav. b), o krūvininkų judris siekia kelis šimtus cm² V⁻¹ s⁻¹, kas yra daugiau nei pakankama šią medžiagą taikyti elektronikos prietaisuose [9], [10], [11], [12].

Kaip ir grafenas taip ir molibdeno disulfido monosluoksnis turi panašias savybes: abi šios medžiagos pasižymi geromis katalitinėmis savybėmis bei talpinėmis savybėmis dėl didelio paviršiaus ploto. Be to, yra mechaniškai stipresnės už tos pačios cheminės struktūros 3D medžiagas (atskiro MoS₂ sluoksnio Jungo modulis yra apie 270 GPa, o 3D medžiagai – apie 240 GPa) [13].

Kadangi grafeno panaudojimą puslaidininkiams elektronikoje ir optoelektronikoje riboja tai, jog ši medžiaga yra nulinio draustinės juostos tarpo medžiaga [14], [15], todėl pereinamųjų metalų dichalkogenidai traukia vis didesnę dėmesį šiems panaudojimams dėl jų lengvai pritaikomo draustinės juostos tarpo. Daug dėmesio yra skiriama šių medžiagų taikyme gaminant lauko tranzistorius [16]–[19], logines grandines [20]–[23], heterosandūras [24]–[27], fotodetektorius [28]–[30], atminties saugojimo įrenginius [31]–[33], įvairius lanksčius prietaisus [34], [35] bei detektorius [36], [37]. Naujausi darbai su

MoS₂ ir kitais, 2D medžiagomis paremtais optoelektronikos ir foto detektoriniais prietaisais apima ir heterosandūras, pagamintas iš vertikaliai sujungtų molibdeno disulfido ir volframo diselendino (WSe₂) sluoksnių. Toks struktūrinis junginys pasižymi fotodiodinėmis savybėmis [38]. Darbuose yra tiriama ir cheminio legiravimo metodu pagamintos homostruktūros iš MoS₂ optoelektroninės savybės [39]. Elektromagnetinių bangų diapazone nuo ultravioletinės srities iki infraraudonosios srities tiriama ir fototranzistoriai, pagaminti iš MoS₂, kurie pasižymi dideliu krūvininkų judriu [40]. Taip pat, jau daug metų yra analizuojami fotodetektoriai, sudaryti iš molibdeno disulfido ir kitos įprastos puslaidininkinės medžiagos, pavyzdžiui, p tipo silicio (p-Si) arba galio nitrido (GaN) [41]–[43].



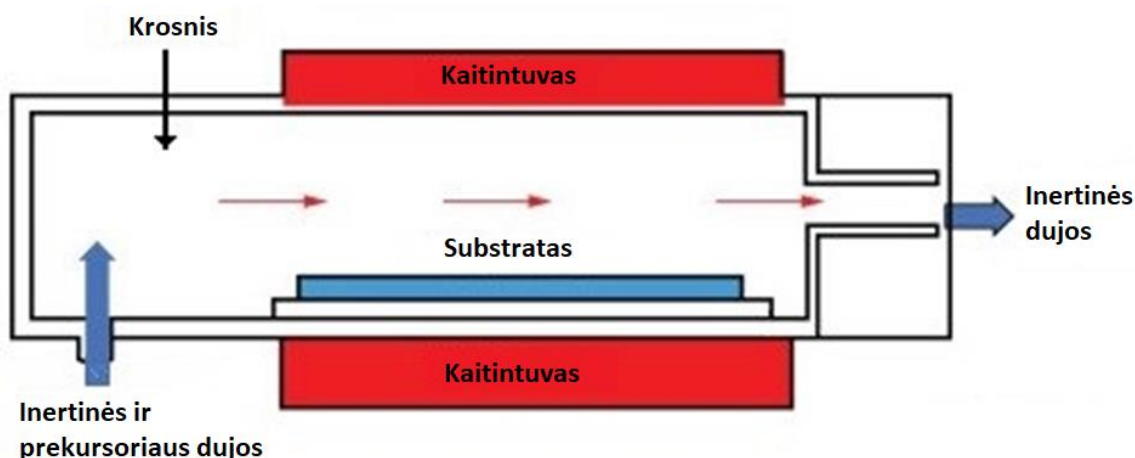
3 pav. Trimatės medžiagos (a) ir atskiro sluoksnio (b) MoS₂ juostinė struktūra [44].

1.3. 2D medžiagų formavimo metodai

Visos 2D medžiagų savybės priklauso nuo šių medžiagų dydžio ir pagaminimo kokybės. Kokybės derinimas su pagaminimo greičiu bei mastu yra vienas iš svarbiausių, šių medžiagų integravimo į naujos kartos technologijas, tikslų. Šiuo metu plačiausiai naudojami kelios 2D-medžiagų formavimo technologijos: (i) mechaninis kristalų skaidymas lakštais, (ii) cheminis kristalų skaidymas lakštais, (iii) auginimas iš cheminių garų fazės ir (iv) junginio sintetinimas naudojant prekursorių. Juos dar galima suskirstyti į du metodus: *bottom-up* metodas ir *top-down* metodas. Pirmasis metodas apibūdina gaminimo būdus, kai yra paimami pavieniai atomai ir jie yra formuojami vienas ant kito, kol gaunama norimo dydžio 2D struktūra, o antrasis metodas nusako gaminimo būdus, kuomet yra imama 3D

medžiaga ir sluoksnis po sluoksnio viena iš dimensijų yra mažinama iki norimos nanometrų eilės.

Vienas iš populiariausių 2D medžiagų *bottom-up* gaminimo būdų yra CVD (*chemical vapor deposition*) metodas. Šis būdas jau seniai buvo pripažintas plonų plėvelių auginime ir per pastaruosius dešimt metų jis buvo pritaikytas ir 2D medžiagų auginimui. CVD metodu iš anksto parinkti substratai yra padedami į krosnį ir tuomet prekursoriaus dujos yra sumaišomos su inertinėmis dujomis ir praleidžiamos pro krosnį su substratu. Inertinės dujos atlieka prekursoriaus dujų nešimą per krosnį, kurioje prie aukštos temperatūros prekursorius sureaguoja su substratu, o inertinės dujos išėina iš krosnies su niekuo nesureagavusios ir tokiu būdu yra gaunama norima 2D struktūra (4 pav.). Lyginant su kitais *bottom-up* metodais, tokiais kaip cheminės sintezės metodu, CVD būdas auginti 2D struktūras yra brangesnis ir sudėtingesnis, tačiau šis metodas yra itin tikslus ir lengvai pritaikomas didesnių 2D darinių gamybai [45], [46].



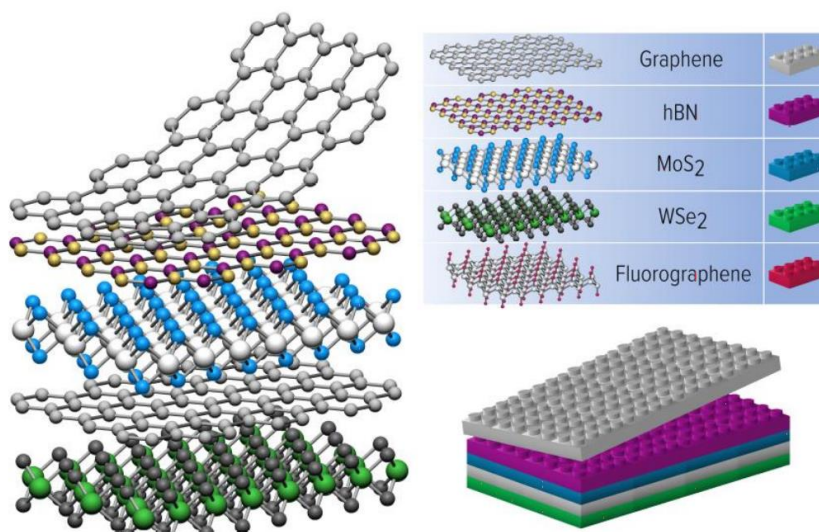
4 pav. CVD metodo schema.

Populiariausi *top-down* metodai yra mechaninė bei skystos fazės eksfoliacija. Mechaninė eksfoliacija, tai paprasčiausias Andre Geim ir Konstantin Novoselov metodas, kuom lipni juosta yra užklijuojama ant 3D medžiagos, tokios kaip grafito ir išlėto nulupama, nutraukiant silpnus Van der Valso ryšius struktūroje. Tokiu būdu yra gaunami grafeno sluoksniai ant lipnios juostos. Skystos fazės eksfoliacija yra iš esmės labai panašus metodas, skirtumas tas, jog 3D medžiaga yra patalpinama į skystą fazę ir tuomet ultragarso arba jonų pagalba monosluoksniai yra atskiriami vienas nuo kito. *Top-down* metodai yra pigesni ir šiais metodais pagamintos 2D medžiagos yra kokybiškesnės nei medžiagos pagamintos

bottom-down metodais, nes nesusidaro defektai monosluoksniuose, tačiau pagrindinis trūkumas yra tas, kad ne visada yra gaunami pavieniai sluoksniai ir taip pat gali būti sunku kontroliuoti sluoksnių dydį [3], [5], [47].

1.4. Van der Valso heterosandūros

2D medžiagos gali būti suformuojamos į Van der Valso heterosandūras, kuriose monosluoksnių plokštumos yra tarpusavyje sukabintos Van der Valso ryšiais. Tokia struktūra apibrėžia dirbtinai sukurtą medžiagą, sudėtą iš skirtingų medžiagų sluoksnių pagal pasirinktą seką (5 pav.). Kadangi daug 2D kristalų yra žinoma, tai galimybių sudaryti skirtingas heterostruktūras iš skirtingų 2D medžiagų yra neapsakomai daug. Šios Van der Valso sandūros pasižymi savybėmis, kuriomis pasižymi ir medžiagos iš kurių ta struktūra yra pagaminta. Dėl savo panaudojimo įvairovės bei galimybės suformuoti specifinius įrenginius VdV struktūros yra labai patrauklios kitos kartos technologijose [48], [49].



5 pav. Van der Valso heterostruktūros pavyzdys [48].

1.5. Sandūrų charakterizavimo metodai

Kartu su sparčia nanotechnologijų plėtra, yra vystomi ir būtini šių medžiagų charakterizavimo būdai, kurie leidžia tirti medžiagos dydį, storį kristalinę struktūrą, defektus bei elektrines savybes. Gebėjimas tirti ir įvertinti šias savybes atveria galimybę iš

technologinės pusės suprasti medžiagos funkcijas jos pritaikyme bei auginimo mechanizmo ypatumus.

Pagrindinės šiuo metu naudojamos heterosandūrų struktūros charakterizavimo metodikos yra optinė mikroskopija, skenuojanti elektroninė mikroskopija, pralaidumo elektroninė mikroskopija, skenuojančio zondo mikroskopija bei Ramano spektroskopija. Atskirai kiekviena iš šių technikų turi savo panaudojimo ribas, tačiau apjungiant įvairias metodikas, šias ribas galima apeiti ir sukurti universalų heterosandūrų tyrimo metodą [5], [50].

Voltamperinių bei voltfaradinių charakteristikų matavimai yra fundamentalios heterosandūrų elektrinio charakterizavimo metodikos siekiant suprasti heterosandūrų veikimo principą. I-V ir C-V matavimai leidžia tiek kokybiškai, tiek kiekybiškai aprašyti heterostruktūros parametrus, tokius kaip krūvininkų judrius, krūvininkų tankį, bandinio bei kontaktų varžas, kas leidžia suprasti tiriamojo bandinio struktūros trūkumus [51].

1.6. Van der Valso heterosandūrų formavimo problemos

Nors 2D medžiagų formavimas į Van der Valso heterosandūras ir šių sandūrų panaudojimas technologijose, tokiose kaip tunelinuose lauko tranzistoriuose, naujos kartos fotodetektoriuose ar plazmoniniuose įrenginiuose skamba labai patraukliai, tačiau kol kas yra susiduriama su neišvengiamomis problemomis realizuojant tokius tikslus. Viena iš problemų yra fizikinių žinių trūkumas apie tokiuose įrenginiuose vykstantį krūvio pernašos mechanizmą. Taip pat šis trūkumas apriboja ir tokių įrenginių kompiuterinių modeliavimų atlikimą, kas būtų labai naudinga kuriant naujo tipo įrenginius [52].

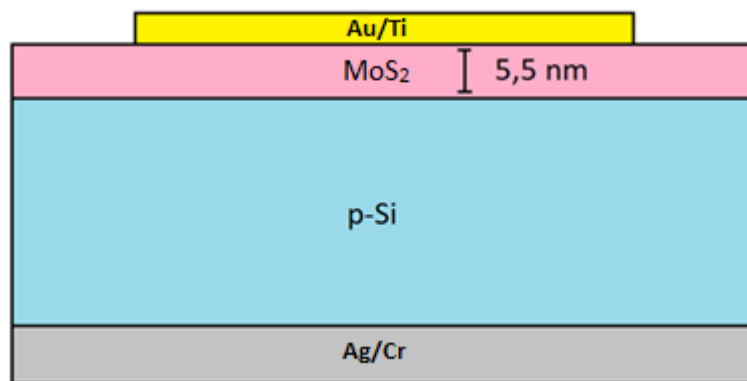
Kita svarbi problema yra ta, jog priklausomai nuo heterosandūros pagaminimo metodo yra sunku suformuoti kontaktus ant vidinių sandūros sluoksnių. Ši problema gali būti sprendžiama būtent heterosandūrų formavimo metodų tobulinimu, tokių kaip Van der Valso heterosandūrų epitaksija ir CVD [1], [9].

2. Tyrimo metodika

2.1. Bandinių paruošimo metodika

Visi bandiniai buvo pagaminti magnetroninio dulkinimo metodu ant p-tipo silicio padėklo užgarinant 5,5 nm molibdeno sluoksnį, šio proceso metu magnetroninis procesas vyko nuolatinės įtampos režimu DC ir 25 °C temperatūroje, tuomet gauta struktūra buvo bombarduojama jonų patrankos tam, kad atomai geriau sukibtų ant substrato. Toks procesas buvo kartojamas 5 kartus. Prieš užgarinant viršutinius ir apatinius elektrodus visi bandiniai buvo įdėti į krosnį ir 10 minučių CVD metodu buvo leidžiamas sieros ir argono dujų mišinys, tokiu būdu formuojamas MoS₂ sluoksnis ant substrato. Bandinių **A**, **B** ir **C** atveju krosnies temperatūra siekė 500 °C ir dujų mišinio srautas buvo atitinkamai 50 l/h, 100 l/h ir 150 l/h. **D**, **E** ir **F** bandiniai buvo sudėti į krosnį, kurioje temperatūra siekė 600 °C ir dujų mišinio srautas taip pat buvo pasirinktas 50 l/h, 100 l/h ir 150 l/h atitinkamai. Apatinis visų bandinių elektrodas buvo sudarytas iš chromo ir sidabro, atitinkamai užgarinant 20 nm ir 200 nm storio sluoksnius, o viršutiniai elektrodai buvo sudaryti iš titano ir aukso, atitinkamai per kaukę formuojant 6 nm ir 184 nm sluoksnius atskirų kvadratų forma. Visi kontaktai buvo garinami magnetroniniu dulkinimu. Užgarinus kontaktus bandiniai taip pat buvo atkaitinami argono atmosferoje greitai keliant temperatūrą iki 500 °C, po to aušinami iki 50 °C. Šis metodas buvo reikalingas norint įkepinti elektrodus tokiu būdu sumažinant bandinių varžą. Bandinių vertikali struktūra yra pavaizduota 6 paveiksle.

Būtina atkreipti dėmesį į tai, jog heterosandūros su molibdeno disulfidu charakteristikos priklauso ne tik nuo paties disulfido sudėties bei struktūros, bet ir nuo disulfido sluoksnio sąveikos su padėklo paviršiumi. Todėl ryšio tarp bandinio savybių ir technologinių sąlygų tyrimui buvo panaudota sulfidavimo metodikos savitumu paremta idėja. Kadangi heterosandūra formuojama viename procese su metalinio molibdeno sulfidavimu, kuri pradžioje užgarinamas ant švaraus Si paviršiaus, tai ir nukrypimai nuo tipinių Šotki sandūros charakteristikų yra laukiami tuo ženklesni, kuo silpniau metalinės molibdeno savybės lems darinio parametrus. Šie parametrai galiausiai bus nulemti dominuojančios MoS₂ savybėmis, kai metalinis prekursorius bus susierintas visame storyje. Todėl idėjos realizavimui buvo panaudoti elektrinių charakteristikų metodai.



6 pav. Bandinių vertikali struktūra.

2.2. I-V ir C-V charakteristikų matavimo metodai

Bandinių voltamperinės ir voltfaradinės charakteristikos buvo matuojamos „Cascade Microtech“ įmonės, zondinės stoties „Summit 11000“ aplinkoje kartu naudojant „Keithley 4200-SCS“ elektrinių parametrų charakterizavimo analizatorių. Vienas iš matavimo zondų buvo nuleidžiamas ant bandinių elektrodų, o kitoje bandinių pusėje esantis Cr/Ag kontaktas buvo prijungiamas prie kito zondo. Bandinių I-V matavimuose pasirinktas įtampų intervalas buvo nuo -2 V iki 2 V, matuojant su 0,05 V įtampos žingsniu. Bandinių C-V charakteristikos buvo matuojamos įtampos intervale nuo -1 V iki 2 V, kas 0,05 V, pasirenkant skirtingą dažnį nuo (0,05 MHz, 0,1 MHz, 0,2 MHz, 0,4 MHz, 0,6 MHz, 0,8 MHz, 1 MHz), Visi aukščiau aprašyti matavimai buvo atlikti naudojant dvigubo skenavimo režimą, kuris pamatavęs charakteristikas nuo maksimalios neigiamos iki maksimalios teigiamos įtampos vertės, padaro ir atgalinį matavimą nuo tos pačios teigiamos iki tos pačios neigiamos įtampos vertės.

2.3. Charakteringų sandūros parametrų skaičiavimo metodai

Išmatuotos bandinių I-V charakteristikos buvo tiriamos naudojantis idealaus diodo (1) (2) lygtimis, kurios atitinka termioninės emisijos teoriją:

$$I = A^*ST^2 e^{\left(\frac{-\Phi_{0Bn}}{k_B T}\right)} \left(e^{\left(\frac{q(U-R_S I)}{nk_B T}\right)} - 1 \right) \quad (1)$$

$$I_S = A^*ST^2 e^{\left(\frac{-\Phi_{0Bn}}{k_B T}\right)} \quad (2)$$

kur I_s yra soties srovė, Φ_{0Bn} – Šotkio barjero aukštis esant 0 V įtampai, A^* - modifikuota Richardsonso konstanta lygi $32 \text{ A cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$ p-tipo siliciui, S yra diodo plotas, T - temperatūra,

k_B – Boltzmano konstanta, n – diodo idealumo faktorius R_s – nuosekli bandinio varža ir U – įtampa prijungta tiesiogine kryptimi. Šiame darbe buvo naudojamas Cheungo (*Cheung*) metodas, kuris leidžia iš I-V charakteristikų suskaičiuoti nuoseklią bandinio varžą, idealumo faktorių bei Šotkio barjero aukštį [53]. Cheungo funkcijos yra aprašomos taip:

$$\frac{dU}{d \ln I} = IR_s + \frac{nk_B T}{q} \quad (3)$$

$$H(I) = V - \frac{nk_B T}{q} \ln \left(\frac{I}{A^* S T^2} \right) \quad (4)$$

Ir

$$H(I) = IR_s + n\Phi_{0Bn} \quad (5)$$

Tuomet nusibraižius $\frac{dU}{d \ln I}$ priklausomybę nuo I yra gaunama tiesė, iš kurios suskaičiuojami idealumo faktorius n ir nuosekli bandinio varža R_s atitinkamai iš tiesės y ašies kirtimo taško ir iš polinkio kampo verčių. Gauta idealumo faktoriaus vertė yra įsistatoma į (4) lygtį ir braižoma $H(I)$ priklausomybė nuo srovės stiprio I . Ši priklausomybė taip pat yra tiesinė, kurios polinkio kampas duoda R_s vertę, kurią galima palyginti su pirmąja verte dėl metodo nuoseklumo, o iš tiesės y ašies kirtimo taško vertės yra apskaičiuojamas Šotkio barjero aukštis [53]. Taip pat, pasinaudojus bandinio laidumu užtvarine kryptimi, iš I-V charakteristikos galima rasti bandinio šunto varžą R_p .

Iš išmatuotų C-V charakteristikų buvo suskaičiuotas Šotkio barjero aukštis pagal (6) ir (7) ir (8) formules. Pagal (6) išraišką yra suskaičiuojamas donorų legiravimo koncentracija N_D . (8) formulė aprašo sąryšį tarp diodo elektrinės talpos ir užtvarine kryptimi prijungtos įtampos.

$$N_D = \frac{2}{q\epsilon_s N S^2} \quad (6)$$

$$\Phi_{Bn} = \frac{q\Phi_{Bi} + k_B T \ln \left(\frac{N_c}{N_D} \right)}{q} \quad (7)$$

$$C = \sqrt{\frac{S^2 \epsilon q N_D}{(V_{bi} - V_r)}} \rightarrow \frac{1}{C^2} = \frac{(\Phi_{bi} - V_r)}{S^2 \epsilon q N_D} \quad (8)$$

Taigi pasivertus C-V charakteristikas į C^{-2} -V charakteristikas, iš tiesinės dalies x ašies kirtimo buvo surastas vidinis susidaręs potencialas Φ_{Bi} , o iš tiesės polinkio – donorų

legiravimo koncentracija N_D . Tuomet pagal (7) buvo apskaičiuotas Šotkio barjero aukštis esant plokščių juostų puslaidininkio modeliui [54], [55], [56], [57].

Taip pat naudojant aukščiau aprašytus parametrus buvo apskaičiuotas ir susidariusios nuskurdintos srities plotis W p-Si dalyje. Kadangi susidariusio molibdeno disulfido sluoksnis ir taip yra labai plonas, todėl jo pusėje nuskurdintos srities plotis nebuvo skaičiuojamas. Nuskurdintos srities plotis buvo skaičiuojamas naudojant jau sukurtą, visiems prieinamą programą internete [58].

2.4. Paviršiaus charakteristikos

Molibdeno disulfido sluoksnių viršutiniai paviršiai buvo tiriami skenuojančio zondo mikroskopu „Veeco Dimension 3100“. Paviršiaus nuskaitymai buvo parinkti atsitiktiniuose taškuose, tačiau pakankamai toli nuo Au/Ti kontaktų, kad šių metalų įtakos paviršiaus vaizdams būtų galima nepaisyti. Matavimai buvo atlikti pasirinkus mikroskopo zondo baksnojimo funkciją (*tapping mode*), tiriamas bandinio paviršiaus plotas buvo parinktas $2 \times 2 \mu\text{m}$ ir vaizdų raiška siekė 512×512 pikselių. Bandinių paviršių nuotraukos buvo analizuojamos bei paviršių aprašantys parametrai buvo skaičiuojami naudojant „Gwyddion“ programą [59]. Parametras RMS šiurkštumas (*root mean square roughness*) yra paviršiaus nelygumų verčių kvadratinis vidurkis. Asimetrijos koeficientas (*skewness*), tai parametras nusakantis paviršiaus viršūnių ir duobių visumą. Teigiama šio parametro vertė reiškia, jog paviršius turi aukštas viršūnes ir užpildytas duobes, o neigiama vertė – galias duobes ir viršūnių trūkumą. Kurtosis parametras nusako viršūnių ir duobių smailumą. Kuomet šis parametras yra mažesnės vertės nei 3, tai paviršius turi bukas viršūnes ir duobes, o kuomet parametras viršija 3 vertę, tai paviršius apibūdinamas kaip sudarytas iš smailių viršūnių ir duobių.

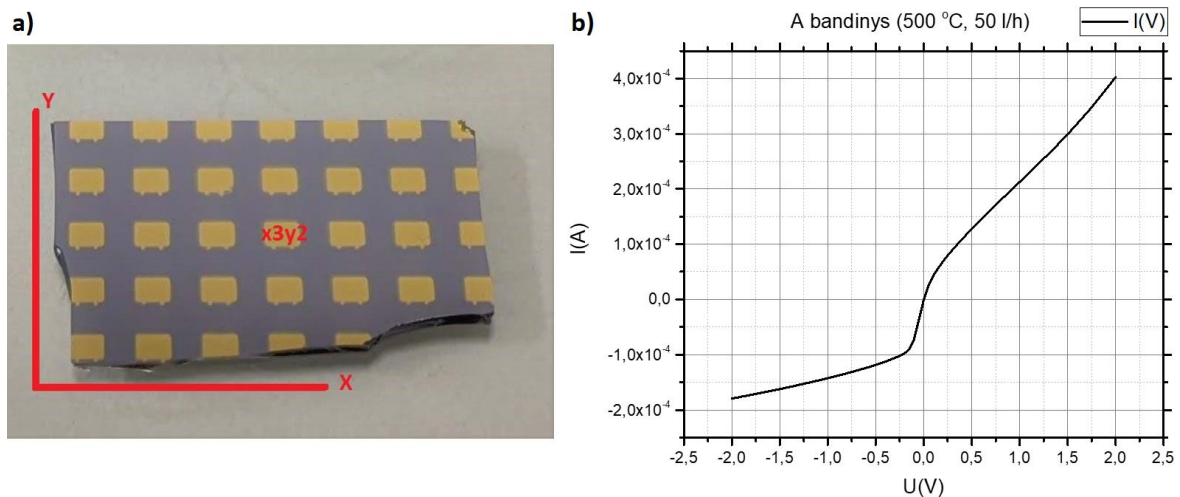
2.5. Ramano spektroskopija

Visiems bandiniams buvo išmatuoti Ramano spektrai, norint įsitikint, jog gautos struktūros atitinka p-Si/MoS₂ sandūrą bei norint nustatyti molibdeno disulfido sluoksnio storį. Spektrai buvo gauti naudojant konfokalinį Ramano spektrometrą - „Renishaw InVia“. Bandiniai buvo žadinami 532 nm bangos ilgio lazerio spinduliu, 5 % galia, 180 sekundžių. Lazerio spindulys buvo fokusuojamas į maždaug $1 \mu\text{m}$ plotą tarp Au/Ti elektrodų. Matavimai buvo atlikti kambario temperatūroje, laboratorijos atmosferoje.

3. Eksperimentiniai rezultatai

3.1. Išmatuotos MoS₂/p-Si sandūros I-V charakteristikos

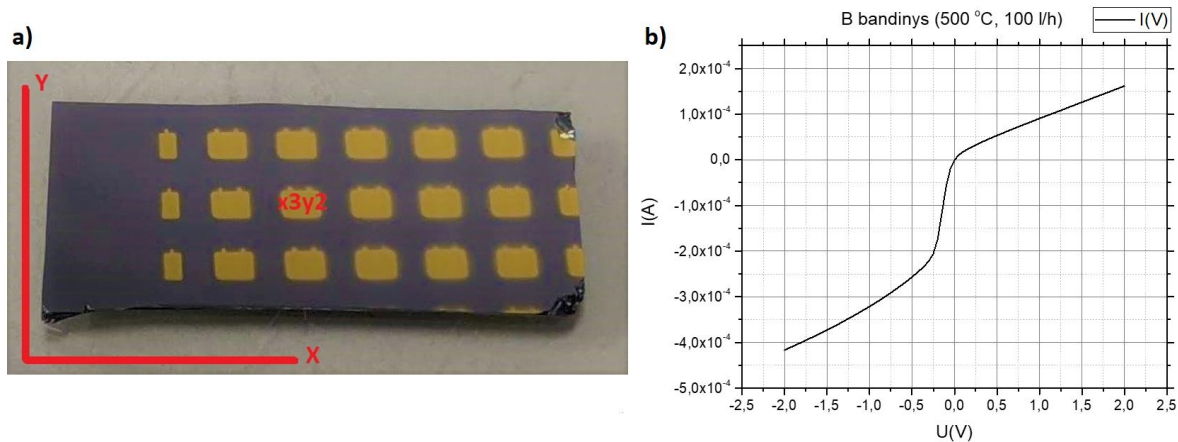
Šiame darbe buvo pagaminti 6 bandiniai (A, B, C, D, E ir F) naudojant plonųjų sluoksnių auginimą magnetroninio dulkinimo metodu. Bandiniai buvo sierinami, norint pagaminti p-Si/MoS₂ heterostruktūrą, kuri atitiktų p-n sandūrą. Sierinimo laikas buvo parinktas pastovus kiekvienam bandiniui, tačiau atskiriems bandiniams buvo keičiama sierinimo temperatūra ir sieros bei argono dujų srautas kameroje. Dėl šios priežasties skirtingus bandinius pasiekdavo skirtingos energijos sieros atomai. Bandinių voltamperinės charakteristikos buvo matuojamos beveik iškart po bandinių pagaminimo tam, kad būtų galima išvengti struktūros senėjimo. Žemiau pateikiamos bandinių nuotraukos ir išmatuotos voltamperinės charakteristikos.



7 pav. A bandinio vaizdas (a) ir išmatuota I-V charakteristika (b).

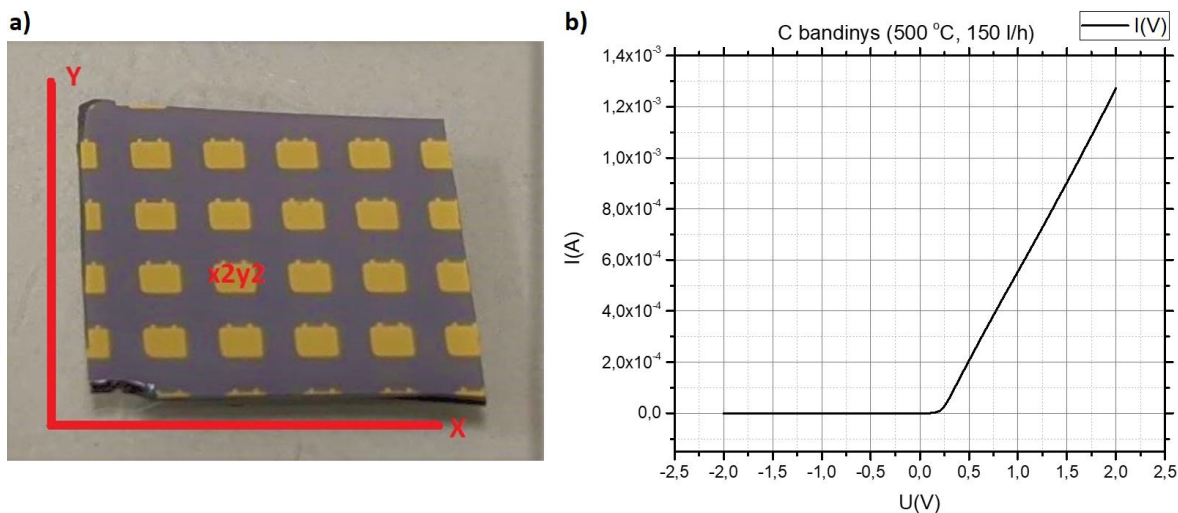
Paveikslėlyje 7a yra pateikta A bandinio nuotrauka, kur yra matomi aukso elektrodai, suformuoti kvadratų pavidalu. Siekiant identifikavimo vienareikšmiškumo, šio ir visų kitų bandinių kontaktai buvo sužymėti, skirstant kontaktines aikšteles pagal koordinatę X-Y koordinatinių sistemoje. I-V matavimai buvo atlikti ant **x3y2** kontakto. Iš detalios voltamperinės charakteristikos (7 pav. b) analizės buvo gautos kiekybinės parametrų vertės, kuriomis buvo aprašytos Šotkio diodo, susiformavusio technologinio proceso metu, savybės. Iš gautos charakteristikos pagal anksčiau minėtus metodus (žr. skyrelį 2.3. *Charakteringų sandūros parametrų skaičiavimo metodai*) buvo suskaičiuoti diodo

parametrai: Šotkio barjero aukštis $\Phi_{0Bn} = 0,446$ eV, idealumo faktorius $n = 4,336$, lygiagreti bei nuosekli varžos $R_p = 14271,841 \Omega$, $R_s = 4839,616 \Omega$.



8 pav. **B** bandinio vaizdas (a) ir išmatuota I-V charakteristika (b).

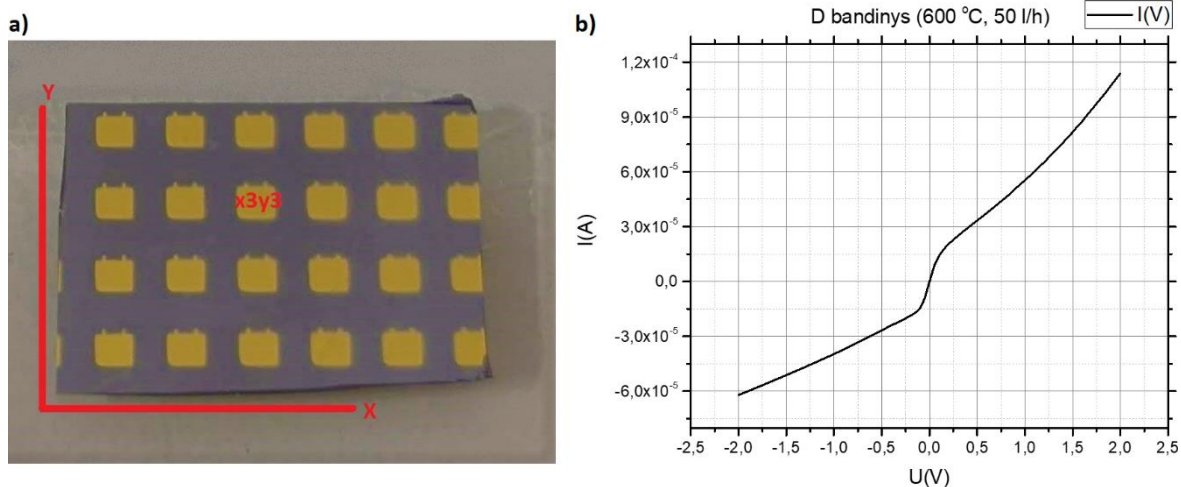
B bandinio (8 pav. a), sierinto 100l/h dujų srautu 500 °C krosnyje, I-V matavimai buvo atlikti ant **x3y2** kontakto, ši charakteristika yra pavaizduota 8b paveiksle ir iš šios voltamperinės charakteristikos suskaičiuoti Šotkio diodo parametrai - $\Phi_{0Bn} = 0,562$ eV, $n = -3,615$, $R_p = 5761,21 \Omega$, $R_s = 14650,15 \Omega$.



9 pav. **C** bandinio vaizdas (a) ir išmatuota I-V charakteristika (b).

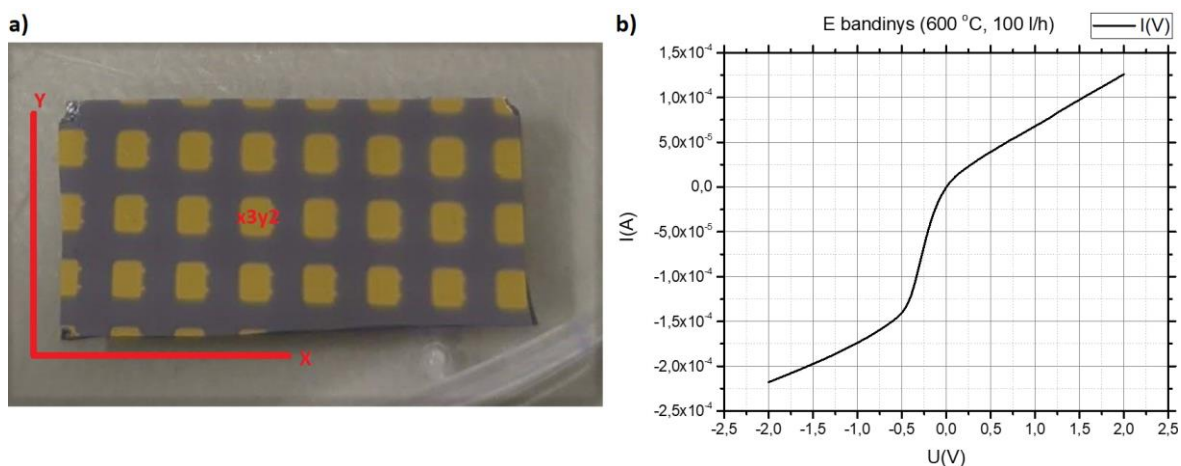
C bandinio (9 pav. a) aukso kontaktas ant kurio buvo nuleistas vienas iš matavimo zondu šioje koordinacių sistemoje atitiko **x2y2** koordinatę. Iš **C** bandinio išmatuotos I-V

charakteristikos buvo apskaičiuoti Šotkio diodo parametrai: $\Phi_{0Bn} = 0,79 \text{ eV}$, $n = 1,221$, $R_p = 34499,417 \text{ k}\Omega$, $R_s = 1334,15 \Omega$.



10 pav. **D** bandinio vaizdas (a) ir išmatuota I-V charakteristika (b).

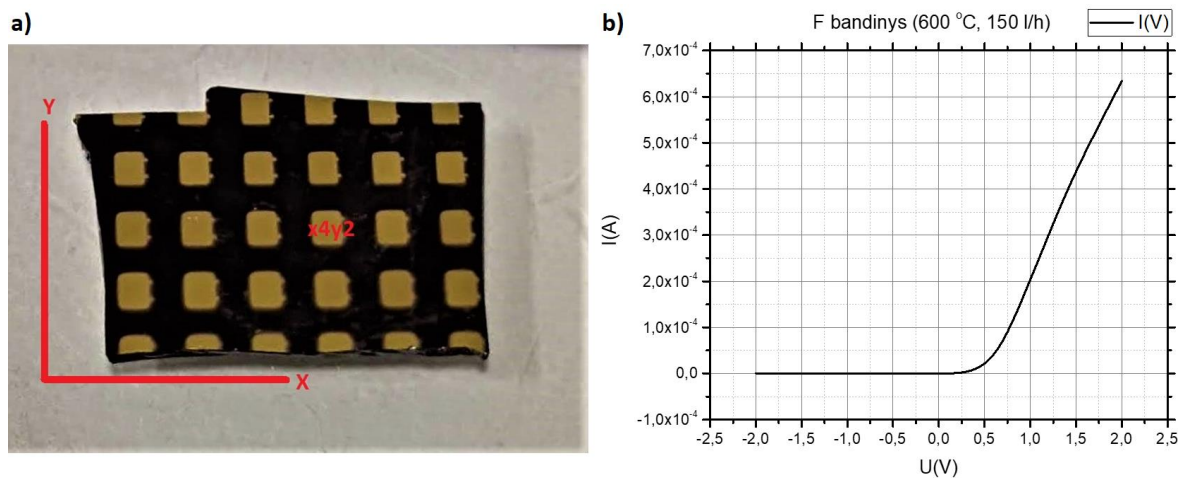
Ketvirtojo bandinio **D** (10 pav. a), sierinto 50 h/l dujų srautu 600 °C krosnyje, voltamperinių charakteristikų matavimai buvo atlikti ant **x3y3** kontakto. Iš šio bandinio išmatuotos I-V charakteristikos apskaičiuoti Šotkio diodo parametrai: $\Phi_{0Bn} = 0,505 \text{ eV}$, $n = 11,289$, $R_p = 39721,291 \Omega$, $R_s = 13750,73 \Omega$.



11 pav. **E** bandinio vaizdas (a) ir išmatuota I-V charakteristika (b).

E bandinio, sierinto tos pačios temperatūros krosnyje 100 h/l dujų srautu, nuotrauka yra pateikta 11a paveiksle. Jame taip pat pažymėtas ir kontaktas ant kurio buvo matuojama voltamperinė charakteristika pavaizduota 11b paveiksle. Iš šios charakteristikos,

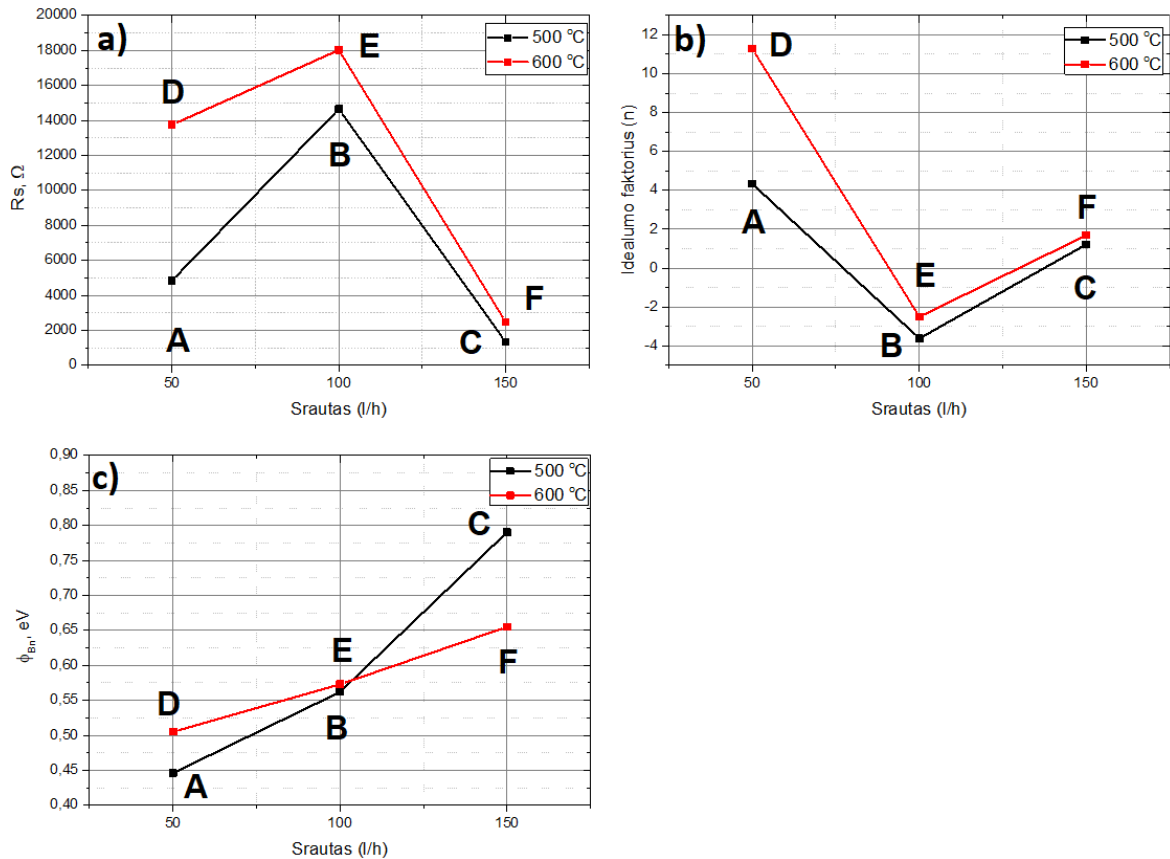
pasinaudojus Šotkio diodo modeliu, buvo apskaičiuoti atitinkami parametrai: $\Phi_{0Bn} = 0,573$ eV, $n = -2,506$, $R_p = 9257,571 \Omega$ ir $R_s = 18031,92 \Omega$.



12 pav. **F** bandinio vaizdas (a) ir išmatuota I-V charakteristika (b).

Paskutinis bandinys **F**, kuris buvo sierinamas 600 °C krosnyje 150 h/l sieros/argono dujų srautu, yra pavaizduotas 12a paveiksle. Iš šio bandinio išmatuotos I-V charakteristikos ant **x4y2** kontakto (12 pav. b) taip pat buvo apskaičiuoti Šotkio diodo parametrai, kurie atitinka $\Phi_{0Bn} = 0,655$ eV, $n = 1,687$, $R_p = 99901,716 \text{ k}\Omega$ bei $R_s = 2457,703 \Omega$ vertes.

Išmatavus voltamperines charakteristikas ir apskaičiavus sandūrų charakteringuosius parametrus, buvo nubrėžtos šių parametų priklausomybės nuo bandinių sierinimo srauto, esant skirtingoms sierinimo temperatūroms (13 pav. a, b ir c).

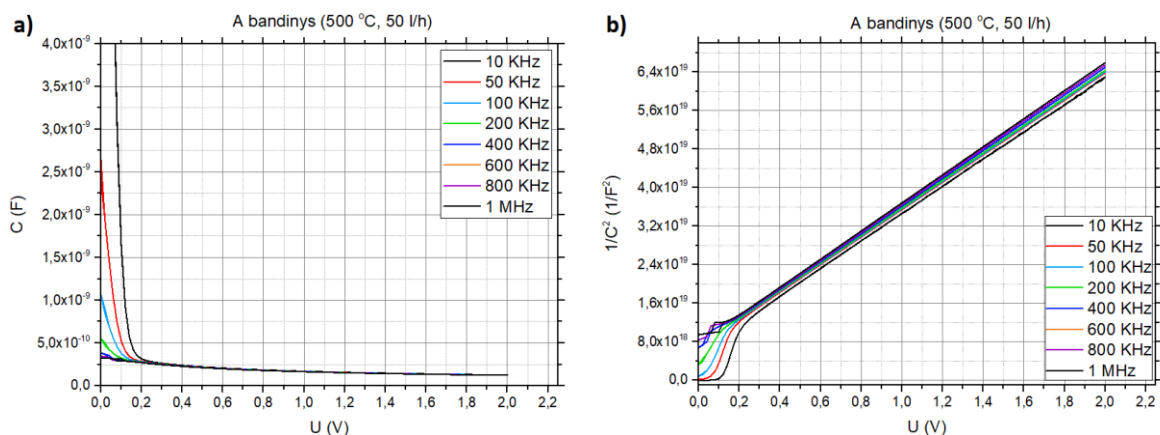


13 pav. Nuoseklios varžos (a), idealumo faktoriaus (b) ir Šotkio barjero (c) priklausomybės nuo bandinių sierinimo dujų srauto esant skirtingai sierinimo temperatūrai.

3.2. Išmatuotos MoS₂/p-Si sandūros C-V charakteristikos

Pagaminti bandiniai buvo eksperimentiškai tiriami, matuojant ir analizuojant voltfaradines charakteristikas (C-V). Analizuojant duomenis, buvo skaičiuojamas Šotkio barjero aukštis Φ_{0Bn} . C-V matavimai buvo atlikti dažnių diapazone nuo 0,01 Mhz iki 1 Mhz, nes iš ankstesnių tyrimų atlikus matavimus prie žemesnių bei aukštesnių dažnių C-V charakteristikose buvo galima matyti padidėjusį signalo triukšmą.

Voltfaradinės charakteristikos buvo gaunamos pasirenkant paralelios RC elektrinės grandinės modelį. Pastarosios charakteristikos yra iliustruotos toliau pateiktuose paveikslėliuose, kuriuose vaizduojami elektrinės talpos priklausomybės nuo įtampos grafikai. Taip pat šalia yra pateiktos ir C^{-2} -V charakteristikos, būtent iš kurių galima suskaičiuoti Šotkio barjero aukštį, prieš tai suradus vidinį susidariusį (*built-in*) potencialą ir donorų legiravimo koncentraciją (žr. skyrelį 2.3. *Charakteringų sandūros parametru skaičiavimo metodai*).



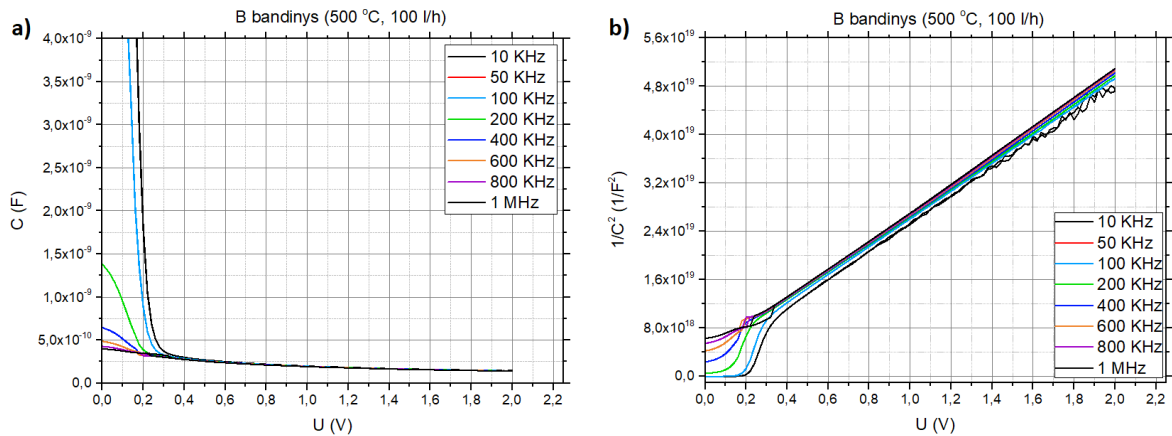
14 pav. A bandinio C-V (a) ir C^{-2} -V (b) charakteristikos.

1 lentelė. A bandinio Šotkio diodo parametrai prie skirtingų dažnių.

Dažnis, MHz	Φ_{bi} , eV	N_D , cm^{-3}	Φ_{0Bn} , eV
0,01	0,224	2.28×10^{16}	0,393
0,05	0,248	2.27×10^{16}	0,417
0,1	0,252	2.27×10^{16}	0,421
0,2	0,255	2.26×10^{16}	0,424
0,4	0,256	2.24×10^{16}	0,426
0,6	0,258	2.22×10^{16}	0,428
0,8	0,261	2.21×10^{16}	0,431
1	0,264	2.21×10^{16}	0,434

Kaip galima matyti iš 14 pav. C-V charakteristikų, išmatuota elektrinė talpa priklauso prie grandinės prijungtos įtampos ir beveik nepriklauso dažnio. Prijungus išorinę postūmio įtampą sandūrai užtvarine kryptimi (teigiama įtampa prijungta prie p-Si), matuojamos klasikinės C-V charakteristikos, nepriklausančios nuo kintamo dažnio įtampos.

Iš lygiagretaus jungimo RC grandinės modelio voltfaradinių charakteristikų galima matyti, jog elektrinė talpa labai nežymiai mažėja didinant dažnį. Iš A bandinio C^{-2} -V charakteristikos tiesinės dalies polinkio buvo suskaičiuota donorų legiravimo koncentracija N_D , o vieta kur ši tiesinė dalis kerta X ašį ($C = 0$), duoda vidinio susidariusio potencialo vertę Φ_{bi} , iš kurio buvo suskaičiuotas Šotkio barjero aukštis Φ_{0Bn} . Aukščiau pateiktoje lentelėje (1 lentelė) yra surašytos šių parametų vertės A bandiniui esant skirtingiems dažniams. Taip pat buvo suskaičiuotas ir nuskurdintos srities plotis silicyje, esant aukštesniems dažniams ($f > 0,4$ MHz) ir 0 V įtampai: $W = 94.5$ nm

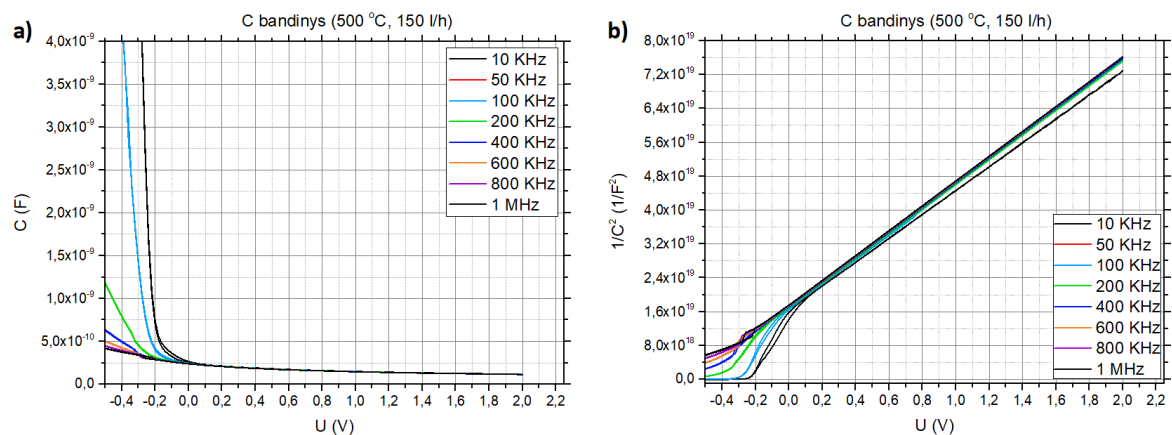


15 pav. **B** bandinio C - V (a) ir C^{-2} - V (b) charakteristikos.

B bandinio atveju buvo taip pat išmatuotos voltfaradinės charakteristikos (15 pav.), iš kurių buvo ištraukti Šotkio diodo parametrai, pateikti 2 lentelėje. Šiuo atveju susidaręs vidinis potencialas ir Šotkio barjero aukštis yra beveik du kartus mažesnės vertės nei **A** bandinio atveju, o ir nuskurdintos sritys plotis silicyje yra $W = 54.9$ nm.

2 lentelė. **B** bandinio Šotkio diodo parametrai prie skirtingų dažnių

Dažnis, MHz	Φ_{bi} , eV	N_D , cm^{-3}	Φ_{0Bn} , eV
0,01	0,11	2.82×10^{16}	0,274
0,05	0,128	2.79×10^{16}	0,292
0,1	0,141	2.79×10^{16}	0,305
0,2	0,138	2.78×10^{16}	0,302
0,4	0,132	2.74×10^{16}	0,296
0,6	0,128	2.72×10^{16}	0,293
0,8	0,129	2.70×10^{16}	0,294
1	0,133	2.70×10^{16}	0,298

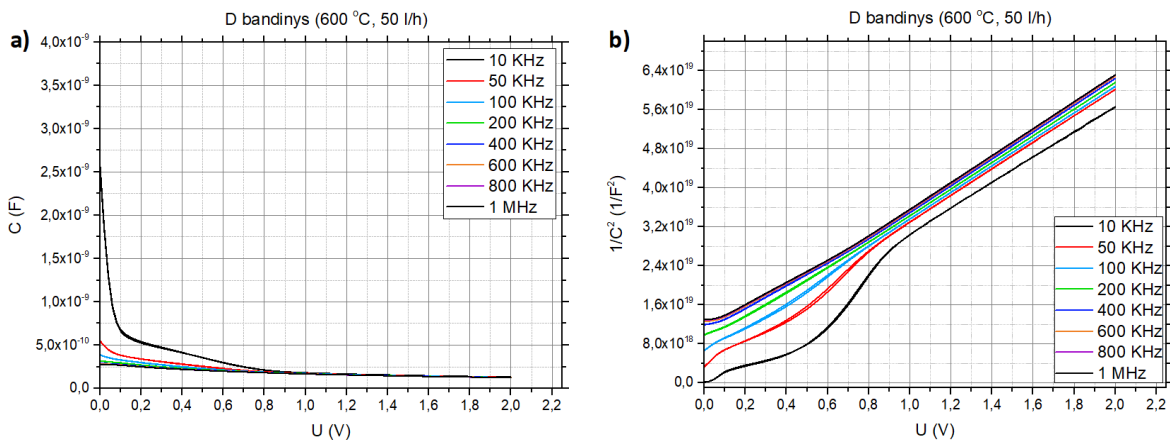


16 pav. **C** bandinio C - V (a) ir C^{-2} - V (b) charakteristikos.

3 lentelė. C bandinio Šotkio diodo parametrai prie skirtingų dažnių

Dažnis, MHz	Φ_{bi} , eV	N_D , cm^{-3}	Φ_{0Bn} , eV
0,01	0,58	2.28×10^{16}	0,749
0,05	0,563	2.19×10^{16}	0,733
0,1	0,581	2.22×10^{16}	0,751
0,2	0,583	2.21×10^{16}	0,753
0,4	0,589	2.20×10^{16}	0,759
0,6	0,595	2.20×10^{16}	0,765
0,8	0,598	2.20×10^{16}	0,768
1	0,601	2.20×10^{16}	0,771

16 paveiksle yra pateiktos išmatuotos C bandinio, sierinto 500 °C krosnyje 150l/h dujų srautu, C-V (a) bei C^{-2} -V (b) charakteristikos iš kurių surasti Šotkio diodo parametrai pateikiami 3 lentelėje. Suskaičiuotų parametų vertės yra didesnės nei A ir B bandinių atveju. Nuskurdintos srities silicyje plotis - $W = 213$ nm.

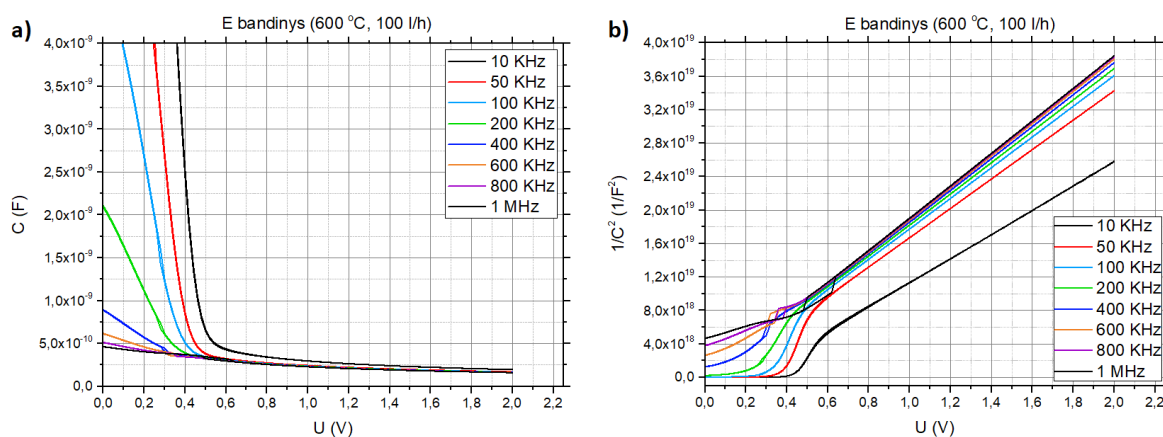


17 pav. D bandinio C-V (a) ir C^{-2} -V (b) charakteristikos.

4 lentelė. D bandinio Šotkio diodo parametrai prie skirtingų dažnių

Dažnis, MHz	Φ_{bi} , eV	N_D , cm^{-3}	Φ_{0Bn} , eV
0,01	0,067	2.32×10^{16}	0,236
0,05	0,189	2.34×10^{16}	0,357
0,1	0,231	2.36×10^{16}	0,399
0,2	0,254	2.36×10^{16}	0,422
0,4	0,272	2.35×10^{16}	0,44
0,6	0,281	2.34×10^{16}	0,449
0,8	0,287	2.34×10^{16}	0,455
1	0,293	2.34×10^{16}	0,461

Iš **D** bandinio, kuris buvo sierintas 600 °C temperatūroje, naudojant 50 l/h sieros/argono dujų srautą, voltfaradinių charakteristikų (17 pav.) suskaičiuoti Šotkio diodo parametrai pateikiami 4 lentelėje. Kaip galima matyti iš C-V charakteristikų, išmatuota talpa priklauso nuo matavimo dažnio. Tokia priklausomybė ypač matosi esant žemesniems matavimo dažniams ($f < 0,4$ MHz). Apskaičiuoti charakteringieji parametrai taip pat rodo šią priklausomybę. Šių parametų dydžiai yra artimai panašūs į **A** bandinio parametų dydžius. Apskaičiuotas silicijoje nuskurdintos srities plotis $W = 107$ nm.

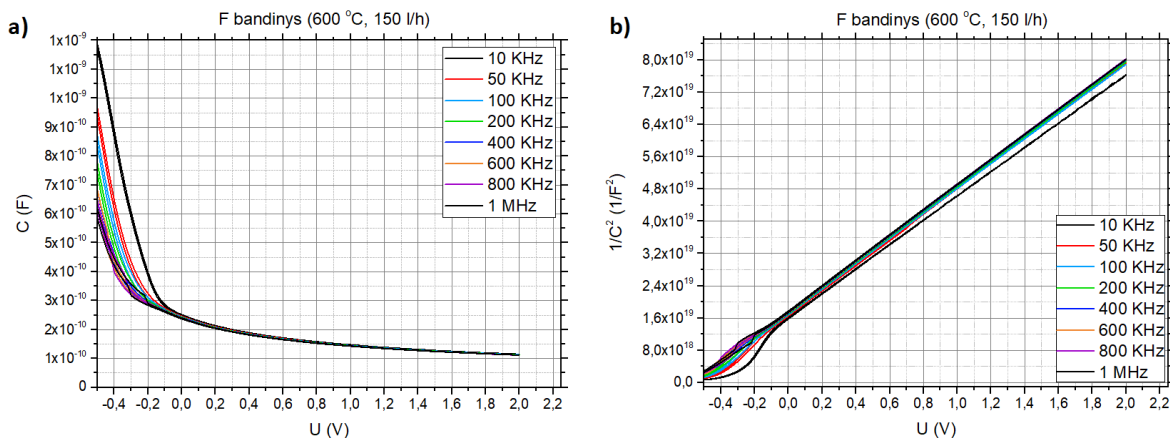


18 pav. **E** bandinio C-V (a) ir C^{-2} -V (b) charakteristikos.

5 lentelė. **E** bandinio Šotkio diodo parametrai prie skirtingų dažnių

Dažnis, MHz	Φ_{bi} , eV	N_D , cm^{-3}	Φ_{0Bn} , eV
0,01	-0,22	$4,45 \times 10^{16}$	-0,068
0,05	-0,05	$3,66 \times 10^{16}$	0,107
0,1	-0,029	$3,52 \times 10^{16}$	0,129
0,2	-0,026	$3,45 \times 10^{16}$	0,133
0,4	-0,025	$3,38 \times 10^{16}$	0,134
0,6	-0,024	$3,35 \times 10^{16}$	0,135
0,8	-0,023	$3,33 \times 10^{16}$	0,137
1	-0,02	$3,32 \times 10^{16}$	0,14

Penktojo bandinio **E** C-V bei C^{-2} -V charakteristikos yra pateiktos atitinkamai 18a ir 18b paveiksluose. Suskaičiuoti aktualūs parametrai pateikti 5 lentelėje. Galima matyti, jog ir šio bandinio atveju, elektrinė talpa priklauso nuo matavimo dažnio, esant žemiems dažniams ($f < 0,4$ MHz). Apskaičiuotos charakteringųjų parametų vertės yra mažiausios lyginant su visų kitų bandinių parametrais ir šios vertės yra panašiausios į **B** bandinio parametų vertes. Taip pat nuskurdintos srities silicijoje plotis $W = 29,5$ nm.



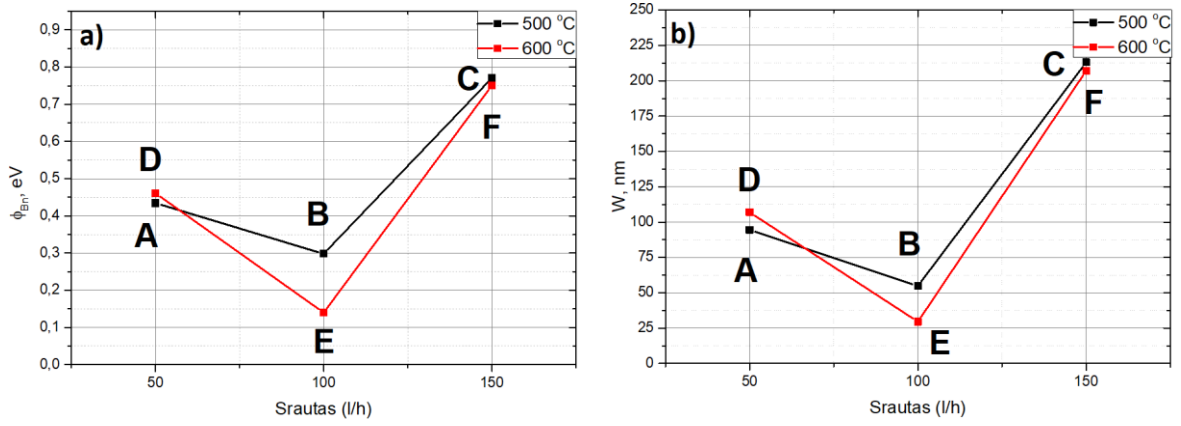
19 pav. **F** bandinio C - V (a) ir C^{-2} - V (b) charakteristikos.

6 lentelė. **F** bandinio Šotkio diodo parametrai prie skirtingų dažnių

Dažnis, MHz	Φ_{bi} , eV	N_D , cm^{-3}	Φ_{0Bn} , eV
0,01	0,542	$2,15 \times 10^{16}$	0,713
0,05	0,541	$2,06 \times 10^{16}$	0,713
0,1	0,563	$2,09 \times 10^{16}$	0,734
0,2	0,567	$2,07 \times 10^{16}$	0,738
0,4	0,571	$2,07 \times 10^{16}$	0,743
0,6	0,574	$2,07 \times 10^{16}$	0,746
0,8	0,576	$2,07 \times 10^{16}$	0,748
1	0,579	$2,07 \times 10^{16}$	0,751

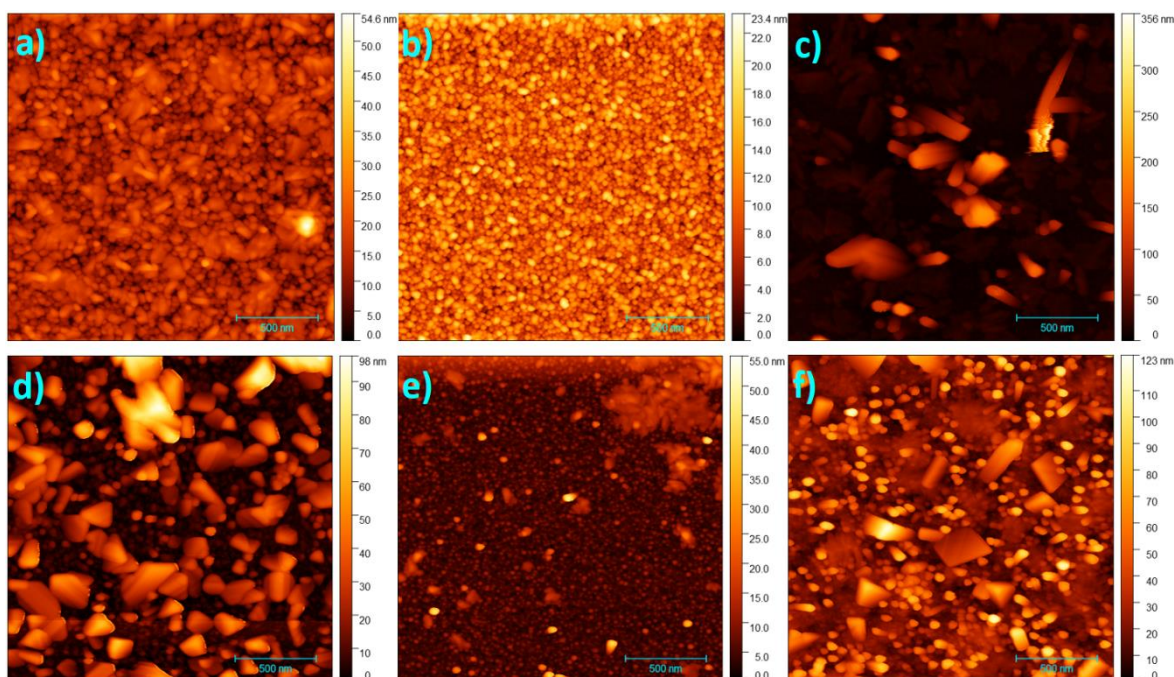
Paskutiniajam **F** bandiniui buvo taip pat atlikta elektrinės talpos priklausomybės nuo įtampos analizė. Šio bandinio voltfaradinės charakteristikos pateikiamos 19 paveiksle, o ištraukti atitinkami parametrai – 6 lentelėje. Nors **D** ir **E** bandinių C - V charakteristikos priklausė nuo matavimo dažnio, tačiau **F** bandinio atveju šios charakteristikos priklausomybė nuo dažnio yra nepastebima. Apskaičiuotas nuskurdintos srities plotas – $W = 207$ nm.

Atlikus voltfaradinių charakteristikų matavimus visiems bandiniams ir apskaičiavus Šotkio diodo parametrus, buvo nubrėžtos šių parametų, tiksliau N_D ir Φ_{0Bn} priklausomybės nuo bandinių sierinimo dujų srauto esant skirtingai sierinimo temperatūrai (20 pav.). Buvo atvaizduotos būtent šios priklausomybės, nes susidariusio vidinio potencialo vertės kito tolygiau kartu su Šotkio barjero aukščiu ir todėl galima apžvelgti šiuos du parametrus kartu.



20 pav. Šotkio barjero (a) ir nuskurdintos srities silicyje pločio (b) priklausomybės nuo bandinių sierinimo dujų srauto esant skirtingai sierinimo temperatūrai.

3.3. MoS₂/p-Si struktūros AFM topografija



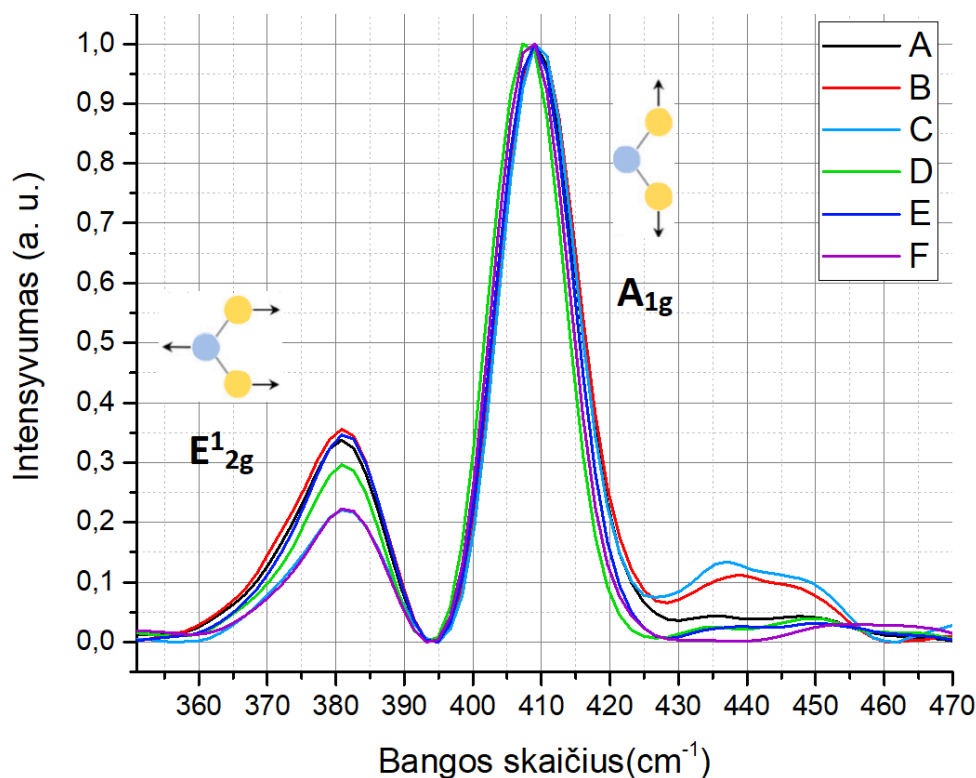
21 pav. A, B, C, D, E ir F bandinių viršutinio paviršiaus (*n*-MoS₂) vaizdai atitinkamai (a), (b), (c), (d), (e) ir (f).

Iš aukščiau pateiktų topografinių *n*-MoS₂ vaizdų (21 pav.) galima matyti, kad iš visų šešių bandinių, **A**, **B** ir **E** bandinių paviršiai buvo lygiausi. Aukščiausia **B** bandinio paviršiaus viršūnė siekė vos 23,4 nm, o bandinių **A** ir **E** viršūnės siekė atitinkamai 54,6 nm ir 55 nm. Didžiausius nelygumus paviršiuje turėjo bandiniai **C**, **D** ir **F**. Šių bandinių atveju aukščiausios viršūnės buvo atitinkamai 350 nm, 98 nm ir 123 nm. Taip pat remiantis šiomis topografijos nuotraukomis buvo apskaičiuoti paviršiaus lygumą apibūdinantys parametrai: RMS šiurkštumas (*root mean square roughness*), asimetrijos koeficientas (*skewness*) ir kurtosis. Šių parametru vertės yra pateikiamos 7 lentelėje.

7 lentelė. Bandinių paviršiaus lygumą apibūdinantys parametrai

Bandinys	RMS	Skewness	Kurtosis
A	4,55	0,73	7,52
B	2,99	0,44	3,08
C	31,12	3,69	19,7
D	16,64	1,51	5,51
E	4,47	2,62	14,05
F	17,82	1,52	5,34

3.4. MoS₂/p-Si struktūros Ramano spektrai



22 pav. . A, B, C, D, E ir F bandinių Ramano spektrai.

Ekspimentiniai bandinių Ramano spektro matavimai (22 pav.) buvo atlikti plačiame bangos skaičių intervale nuo 50 cm⁻¹ iki 1800 cm⁻¹. Taip pat šalia buvo išmatuotas ir silicio miltelių Ramano spektras tam, kad galėtume matyt kokios spektrinės juostos priklauso silicio molekulių virpesiams, o kokios molibdeno disulfido molekulių virpesiams ir nagrinėti tik pastarąsias. 22 paveiksle yra pateikti išmatuoti ir sunormuoti bandinių Ramano spektrai, kuriuose intensyvumo juostos atitinka molibdeno disulfido molekulinis virpesius. Iškirptame regione nuo 250 cm⁻¹ iki 350 cm⁻¹ bei nuo 470 cm⁻¹ buvo stebimos minėtos silicio molekulei būdingos spektrinės intensyvumo juostos [60]. Pateiktame spektre galima matyti dvi išskirtines spektrines juostas. Juosta E¹_{2g}, esanti ties 380,9 cm⁻¹, atitinka deformacinius plokštuminius virpesius tarp Mo ir S atomų, o juosta A_{1g}, esanti ties 409,1 cm⁻¹, atitinka deformacinius neplokštuminius virpesius tarp tų pačių atomų [61]. Atstumas tarp šių dviejų fononų vibracinių modų bei jų intensyvumo santykis yra susijęs su MoS₂ sluoksnių skaičiumi [62], [63]. Kaip galima matyti iš spektrų paveikslo, atstumas tarp šių intensyvumo viršūnių visiems bandiniams yra toks pat (28,2 cm⁻¹), tačiau intensyvumo santykis (E¹_{2g}/A_{1g}) skiriasi. C ir F bandinių atveju šis santykis yra lygus atitinkamai 0,221 ir 0,223. B ir E atveju santykiai lygūs 0,356 ir 0,346, o A ir C atveju – 0,337 ir 0,297.

3.5. Rezultatų aptarimas

Šio darbo tikslas buvo ištirti heterosandūrų, pagamintų iš p-Si/Mo, voltamperines ir voltfaradines charakteristikas jas aprašyti standartiniu Šotki diodo modeliu ir patikrinti galimybę naudoti nuokrypius nuo modelio metalinio prekursoriaus sulfidinimui bei darinio su heterosandūra formavimosi etapų testavimui. Remiantis modeliu, gauti eksperimentines priklausomybes aprašančio modelio parametrų vertes bei ištirti jų priklausomybę nuo dviejų, eksperimento metu keičiamų, technologinių bandinio gaminimo sąlygų – sierinimo temperatūros ir sierinimo dujų srauto.

Remiantis šiuo darbu, galima teigti, jog Šotki sandūros modelis priimtina tinka aprašyti sandūrą, kurioje metalinis molibdeno sluoksnis bent dalinai yra susierinamas iki molibdeno disulfido. Formuojant p-Si/MoS₂ p-n struktūrą, bandinių sierinimo temperatūra ir sierinimo dujų srautas yra proporcingi molekulių, pasiekiančių bandinį, energijai ir kiekiui. Ant silicio suformuotam plonesniam Mo sluoksniui yra reikalinga mažiau ir mažesnės energijos sieros atomų, norint pilnai suformuoti MoS₂, o storesniam Mo sluoksniui - daugiau ir didesnės energijos sieros atomų. Taip pat yra žinoma, kad pilnai susierinto bandinio molibdeno ir sieros atomų skaičius atitinka santykį 1:2. Iš ankstesnių skyriuje atliktų darbų žinoma, jog tokio puslaidininkio MoS₂ sluoksnio elektrinė laidumą lemia donoriniai sieros vakansijų defektai, šio puslaidininkio draustinių energijų tarpas yra maždaug 1,4 eV, o barjero aukštis atitinka maždaug 0,8 eV [64], [65]. Kitu atveju, kai bandinys nėra pilnai susierintas, tai Mo:S santykis bus mažesnis už 1:2. Taigi tokiuose tarpiniuose etapuose buvo tikimasi tiek nestechiometrinio junginio MoS₂, tiek ir metaliniu laidumu pasižyminčios 1T-MoS₂ fazės. Čia Šotki sandūros modelis leidžia stebėti parametrų nukrypimus nuo standartinių verčių. Net ir tiriant p-n sandūrą, Šotki barjero aukštis aprašo barjero aukštį tarp p tipo silicio laidumo juostos ir fermi lygmens, esant 0 V įtampai, o idealumo faktoriaus vertės yra universalios ir tinka aprašyti sandūros neatitikimą nuo idealaus diodo modelio.

Analizuojant į bandinių voltamperines charakteristikas akivaizdžiai galima matyti šių charakteristikų ryšį su sierinimo dujų srautu, prie skirtingos sierinimo temperatūros. I-V charakteristikų forma tarp bandinių **A** ir **D**, **B** ir **E**, **C** ir **F** yra panaši ir tai būtent asocijuojasi su šių bandinių sierinimo dujų srautu, atitinkamai 50 l/h 100 l/h ir 150 l/h. Bandinių **B** ir **E** voltamperinėse charakteristikose stebimas staigus srovės, tekančios iš viršutinio elektrodo į apatinį, kilimas, nežymiai padidinus įtampą užtvarine kryptimi. Šios charakteristikos nėra panašios į tipines diodo I-V charakteristikas. Remiantis apskaičiuotomis šunto varžos,

nuoseklios varžos, idealumo faktoriaus ir barjero aukščio vertėmis galima matyti, jog šunto varža yra kelis kartus mažesnė už nuosekliąją, dešimtis kiloomų siekiančią varžą, idealumo faktoriaus vertė yra neigiamo ženklo, o barjero aukštis yra maždaug ~250 - 300 eV mažesnės vertės už aukščiau minėtą, p-Si/MoS₂ sandūrai būdingą vertę ($\Phi_{Bn} = 0,8$ eV). Iš esmės neigiamo diodo idealumo faktoriaus negali būti, todėl remiantis šia bei šunto ir nuoseklios varžų vertėmis galima daryti išvadą, kad bandiniai **B** ir **E** nė kiek neatitinka standartinio diodo modelio. Tą patvirtina ir iš voltfaradinių charakteristikų apskaičiuotas barjero aukštis (**B** atveju: $\Phi_{Bn} = 0,298$ eV, **E** atveju: $\Phi_{Bn} = 0,14$ eV) ir nuskurdintos srities silicyje plotis (**B** atveju: $W = 54,9$ nm, **E** atveju: $W = 29,5$ nm). Šie parametrai buvo skaičiuojami prie esant aukštesniems matavimo dažniams, nes būtent prie šių dažnių parametru vertės beveik nekito. Išmatuotų C-V ir I-V metodais barjero aukščių skirtumą dažniausiai lemia skirtingai dominuojantys procesai, kurie nėra vienodai jautrūs darinio bei medžiagos savybėms, tokioms kaip barjero nehomogeniškumas, tarp sluoksnių krūvio pasiskirstymas, netolygus sandūros pasiskirstymas bei nuotėkio srovės [66], [67]. Iš C-V charakteristikų skaičiuojamas barjero aukštis yra žymiai jautresnis matavimui, nei aukštis skaičiuojamas iš I-V charakteristikų, todėl pirminiu atveju gaunama vertė yra patikimesnė. Pagal pakankamai žemas šių parametru vertes abiem bandiniams galima būtų teigti, kad esant mažoms įtampos vertėms bandiniuose yra stebimas elektronų tuneliavimas per susidariusį barjerą iš aukso į p tipo silicį. Tai paaiškina ir srovės kilimą esant žemai neigiamai įtampai. Tuneliavimas šiuose bandiniuose vyksta, nes ne visi Mo sluoksniai buvo susierinti ir dėl to susiformavo tik labai plonas MoS₂ sluoksnis. Taip pat dėl plono MoS₂ sluoksnio ir silicyje nuskurdintos srities plotis yra žymiai plonesnis. Šios dvi priežastys ir lemia elektronų tuneliavimą per barjerą.

A ir **D** bandinių voltamperinės charakteristikos yra dalinai panašios į jau aptartų bandinių charakteristikas, tačiau labiau primena tipines diodo charakteristikas. Yra pastebima, jog srovės kilimas, kylant neigiamai įtampai yra kur kas mažesnis, o barjero aukščio (**A** atveju: $\Phi_{Bn} = 0,434$ eV, **D** atveju: $\Phi_{Bn} = 0,461$ eV) bei nuskurdintos srities silicyje pločio (**A** atveju: $W = 93,5$ nm, **D** atveju: $W = 107$ nm) vertės, apskaičiuotos iš C-V charakteristikų rodo, jog tuneliavimo tikimybė per tokio storio barjerą sumažėja, todėl ir tuneliavimo srovės dydis atitinkamai sumažėja. Galima teigti, kad daugiau Mo sluoksnių buvo susierinta šių bandinių atveju, todėl ir barjero aukštis bei plotis yra atitinkamai didesnės vertės. Tą parodo ir iš I-V charakteristikų suskaičiuoti aktualūs parametrai: **A** ir **D** bandinių šunto varža šį kartą yra beveik tris kartus žemesnės vertės nei nuosekloji varža, nors šios varžos vis tiek siekia dideles vertes. Idealumo faktoriaus vertės yra atitinkamai ($n = 4,336$ ir

$n = 11,289$), tai pasako, kad nors faktoriaus vertės yra gana didelės, sandūra išties atitinka diodo modelį, kurį galima aprašyti standartiniais būdais. Tiesa, apskaičiuotos barjerų aukščių vertės iš I-V ir C-V skiriasi nežymiai (**A** atveju: $\Phi_{Bn} = 0,446$ eV ir $\Phi_{Bn} = 0,434$ eV, **D** atveju: $\Phi_{Bn} = 0,505$ eV ir $\Phi_{Bn} = 0,461$ eV), tačiau vis tiek neprilygsta p-Si/MoS₂ sandūrai būdingai vertei.

Paskutiniųjų **C** ir **F** voltamperinėse charakteristikose srovės kilimo, būdingo kitiems bandiniams nėra pastebima ir pačios charakteristikos savo forma yra labai panašios į tipines diodo charakteristikas. Šių bandinių, sierintų 150 h/l dujų srautu, esant atitinkamai 500 °C ir 600 °C sierinimo temperatūrai, apskaičiuotos šunto varžos yra daug kartų didesnės nei nuoseklios varžos, tai parodo, kad visa srovė teka būtent per sandūrą, o ne per bandinio kraštus ar kitas trumpinančias bandinio vietas. **F** bandinio atveju barjero aukštis gautas iš I-V charakteristikos ($\Phi_{Bn} = 0,655$ eV) yra šiek tiek mažesnės vertės, nei gautas iš C-V charakteristikų ($\Phi_{Bn} = 0,751$ eV), tačiau abi vertės yra gana artimos jau aptartai, šiai sandarai būdingai vertei. Taip pat tokie rezultatai lėmia ir šio bandinio idealumo faktoriaus vertę ($n = 1.687$), kuri, lyginant su jau aptartų bandinių vertėmis, yra artima idealaus diodo idealumo faktoriaus vertei ($n = 1$). **C** bandinio barjero aukštis tiek gautas iš voltamperinės ($\Phi_{0Bn} = 0,79$ eV), tiek iš voltfaradinės ($\Phi_{0Bn} = 0,771$ eV) charakteristikų yra beveik vienodas ir taip pat beveik sutapo su p-Si/MoS₂ sandarai būdinga verte. Šunto varža, kaip ir **F** bandinio atveju, yra daug kartų didesnė nei nuoseklioji varža, o idealumo faktoriaus vertė ($n = 1,221$) yra dar labiau artima idealaus diodo faktoriaus vertei. Abejų bandinių nuskurdintos srities plotis silicyje yra pakankamai didelis, kad tuneliavimo procesas būtų nepaisomas. Sprendžiant iš šių bandinių charakteristikų bei charakteringų parametrų dydžių, galima daryti išvadą, kad Mo sluoksnis buvo pilnai susierintas.

Sierinimo temperatūros pakėlimas nuo 500 °C iki 600 °C iš esmės pablogino p-Si/MoS₂ struktūrą ir tą parodo beveik visų parametrų priklausomybės (13 pav. ir 20 pav). Išimtis taikoma tik **A** ir **D** bandinių C-V matavimams, kur suskaičiuotas nuskurdintos srities plotis silicyje ir barjero aukštis **D** bandinio atveju yra didesnis nei **A** atveju. Temperatūros kėlimas sąlygoja didesnes molekulių, pasiekiančių bandinius, energijas. Tokios molekulės gali ne tik elastiškai susidurti su bandinio paviršiumi ir atsokti, o ir formuoti ryšius tarp tų pačių sieros atomų ir jungtis į saleles bandinio paviršiuje.

Lygiagrečiai elektriniams matavimams buvo taikoma paviršiaus skenuojančio zondo mikroskopija ir struktūros Ramano spektroskopija. Iš atominių jėgų mikroskopo padarytų paviršiaus nuotraukų (21 pav.) ir apskaičiuotų, paviršius apibūdinančių, parametrų (7

lentele) galima spręsti, kad padidinus sierinimo temperatūrą bandinių paviršiai po sierinimo pasidaro šiurkštesni. Vienintelė išimtis būtų bandinys **C**, kurio paviršius net po sierinimo 500 °C temperatūroje yra nelygiausias: paviršius turi keletą smailių, iš kurių aukščiausia siekia net 356 nm. Visų bandinių paviršiniai nelygumai koreliuoja su elektrinių matavimų rezultatais. Galima matyti, kad prasčiausiai susierintų bandinių paviršiai yra lygiausi (pavyzdžiui bandinys **B** ir **E**). Greičiausiai dėl to, kad buvo sieros atomų nepriteklus ir pirma šie atomai jungėsi prie gilesnių Mo sluoksnių, todėl ir paviršiuje esantys Mo atomai lieka nesusierinti ir nuotraukose matome tik tai Mo atomų išsidėstymą. Kalbant apie **C** ir **F** bandinius galima manyti, kad paviršiaus nelygumai šiuo atveju asocijuojasi su sieros pertekliumi sierinimo metu. Kuomet yra sieros atomų perteklius, arba tiksliau, sieros atomų energija yra pakankama, kad visi Mo sluoksniai būtų susierinti, tai papildomi sieros atomai kaupiasi ant bandinių paviršių, taip formuodami nuotraukose matomas viršūnes. **B** ir **E** bandinių atveju per mažas srautas gali reikšti, kad sieros atomai jungiasi prie viršutinių Mo sluoksnių iki tam tikro gylio, o tuomet pradeda formuotis į saleles ant bandinio paviršiaus. Tokiu atveju susierinama daugiau Mo atomų, nei **A** ir **D** atveju.

Atlikta Ramano spektrų analizė patvirtina aukščiau išsakytas idėjas dėl bandinių Mo sluoksnių susierinimo gylio. Ramano spektruose atstumas tarp matomų juostų yra susijęs su susiformavusių sluoksnių skaičiumi. Vieno MoS₂ sluoksnio spektre šios juostos yra nutolusios per ~ 19 cm⁻¹, o didinant sluoksnių skaičių, juostos slenkasi į skirtingas puses dažnių skalėje, todėl didėja ir atstumas tarp šių juostų [60], [63]. Remiantis paminėtuose darbuose aprašyta metodika, buvo apskaičiuotas ir MoS₂ sluoksnių skaičius pagamintuose bandiniuose $N \sim 17$. Taip pat sluoksnių skaičius priklauso ne tik nuo atstumo tarp Ramano spektrinių juostų, bet ir nuo santykinio jų intensyvumo (E_{2g}^1 / A_{1g}): vieno MoS₂ sluoksnio juostų intensyvumų santykis yra maždaug lygus 1, o didinant šių sluoksnių skaičių santykis mažėja. Taigi iš išmatuotuose spektruose galime matyti, kad nors ir spektrinės juostos yra nutolusios vienodu atstumu (28,2 cm⁻¹) skirtingiems bandiniams, tačiau mažiausias santykinis intensyvumas priklauso **C** ir **F** bandiniams, šiek tiek didesnę juostų santykį atitinka **A** ir **D** bandiniai, o didžiausią santykį rodo **B** ir **E** bandiniai. Tai reiškia, jog nors visi bandiniai į gylį turi vienodą skaičių suformuotų MoS₂ sluoksnių, tačiau ne visi sluoksniai turi vienodą skaičių susierintų Mo atomų, atitinkamai **C** ir **F** bandiniai turi daugiausiai, o **B** ir **E** – mažiausiai. Tokia išvada suriša visų matavimų rezultatus.

Pagrindiniai rezultatai ir išvados

Šiame darbe buvo tiriami dvimačių sluoksnių dariniai iš junginių MoS₂ bei metalinių sluoksnių. Taip pat buvo matuojamos šių junginių I-V ir C-V charakteristikos, iš kurių buvo skaičiuojami charakteringieji struktūros parametrai, apibūdinantys struktūrų gamavimo ypatumus bei kokybę.

Tyrimo rezultatais įrodyta, jog eksperimentinių I-V ir C-V analizė, paremta klasikiniu Šotki sandūros modeliu, yra tinkama kiekybiškai aprašyti nuokrypius nuo modelio parametrų susieti su sandūros silicis – metalo disulfidas formavimo technologinėmis sąlygomis bei kiekybiškai palyginti technologinių kintamųjų įtaką sandūros parametrų pokyčiams. Skaitinės gautų parametrų vertės gali būti priskirtos tam tikriems apibrėžtiems technologinio proceso etapams ir gali būti naudojamos kaip kriterijai etapo pabaigos identifikavimui.

Lygiagrečiai atlikta bandinių topografijos ir Ramano spektrų analizė patvirtino išvadą, gautą iš I-V ir C-V charakteristikų tyrimo ir kartu pademonstravo, jog elektrinės charakteristikos yra informatyvesnės už tiesioginio struktūros ir sandūros tyrimo rezultatus bei gali būti panaudotos sulfidavimo proceso stebėjimo parametrų kalibracinių skaitmeninių sekų sudarymui.

Remiantis charakteringaisiais parametrais, galime teigti, jog nuo bandinių sierinimo dujų srauto MoS₂ sluoksnio formavimosi procesas priklauso netiesiškai: geriausių rezultatų rodė bandiniai sierinti 150 l/h, atitinkantys p-n sandūrą, o blogiausių – 100 l/h. Sierinimo temperatūros didinimas beveik visais atvejais labiau sugadindavo struktūrą, todėl saugu daryti išvadą, kad šių sluoksnių sierinimo technologija turėtų apsisistoti ties 500 °C.

Literatūros sąrašas

- [1] K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, and A. H. Castro Neto, “2D materials and van der Waals heterostructures,” *Science*, vol. 353, no. 6298, p. aac9439, Jul. 2016, doi: 10.1126/science.aac9439.
- [2] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “The rise of graphene,” *Nature Mater.*, vol. 6, no. 3, Art. no. 3, Mar. 2007, doi: 10.1038/nmat1849.
- [3] K. S. Novoselov *et al.*, “Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films,” *Science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, Oct. 2004, doi: 10.1126/science.1102896.
- [4] C. Lee, X. Wei, J. Kysar, and J. Hone, “Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene,” *Science (New York, N.Y.)*, vol. 321, pp. 385–8, Jul. 2008, doi: 10.1126/science.1157996.
- [5] C. Tan *et al.*, “Recent Advances in Ultrathin Two-Dimensional Nanomaterials,” *Chem. Rev.*, vol. 117, no. 9, pp. 6225–6331, May 2017, doi: 10.1021/acs.chemrev.6b00558.
- [6] D. R. Cooper *et al.*, “Experimental Review of Graphene,” *ISRN Condensed Matter Physics*, vol. 2012, pp. 1–56, Apr. 2012, doi: 10.5402/2012/501686.
- [7] M. Chhowalla, Z. Liu, and H. Zhang, “Two-dimensional transition metal dichalcogenide (TMD) nanosheets,” *Chem. Soc. Rev.*, vol. 44, no. 9, pp. 2584–2586, 2015, doi: 10.1039/C5CS90037A.
- [8] A. Kuc and T. Heine, “The Electronic Structure Calculations of Two-Dimensional Transition-Metal Dichalcogenides in the Presence of External Electric and Magnetic Fields,” *Chemical Society Reviews*, vol. 44, p. 2603, Dec. 2014, doi: 10.1039/c4cs00276h.
- [9] Q. He, Y. Liu, C. Tan, W. Zhai, G. Nam, and H. Zhang, “Quest for p-Type Two-Dimensional Semiconductors,” *ACS Nano*, vol. 13, no. 11, pp. 12294–12300, Nov. 2019, doi: 10.1021/acsnano.9b07618.
- [10] A. Kuc and T. Heine, “The electronic structure calculations of two-dimensional transition-metal dichalcogenides in the presence of external electric and magnetic fields,” *Chem. Soc. Rev.*, vol. 44, no. 9, pp. 2603–2614, 2015, doi: 10.1039/C4CS00276H.
- [11] W. Bao, X. Cai, D. Kim, K. Sridhara, and M. S. Fuhrer, “High mobility ambipolar MoS₂ field-effect transistors: Substrate and dielectric effects,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 102, no. 4, p. 042104, Jan. 2013, doi: 10.1063/1.4789365.
- [12] W. Wu *et al.*, “High mobility and high on/off ratio field-effect transistors based on chemical vapor deposited single-crystal MoS₂ grains,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 102, no. 14, p. 142106, Apr. 2013, doi: 10.1063/1.4801861.

- [13] S. Bertolazzi, J. Brivio, and A. Kis, “Stretching and Breaking of Ultrathin MoS₂,” *ACS Nano*, vol. 5, no. 12, pp. 9703–9709, Dec. 2011, doi: 10.1021/nn203879f.
- [14] L. Liu and Z. Shen, “Bandgap engineering of graphene: A density functional theory study,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, no. 25, p. 252104, Dec. 2009, doi: 10.1063/1.3276068.
- [15] I. Meric, M. Y. Han, A. F. Young, B. Ozyilmaz, P. Kim, and K. L. Shepard, “Current saturation in zero-bandgap, top-gated graphene field-effect transistors,” *Nature Nanotech.*, vol. 3, no. 11, Art. no. 11, Nov. 2008, doi: 10.1038/nnano.2008.268.
- [16] C.-H. Chu, H.-C. Lin, C.-H. Yeh, Z.-Y. Liang, M.-Y. Chou, and P.-W. Chiu, “End-Bonded Metal Contacts on WSe₂ Field-Effect Transistors,” *ACS Nano*, vol. 13, no. 7, pp. 8146–8154, Jul. 2019, doi: 10.1021/acsnano.9b03250.
- [17] P. Zhao *et al.*, “Effects of annealing on top-gated MoS₂ transistors with HfO₂ dielectric,” *Journal of Vacuum Science & Technology B*, vol. 35, no. 1, p. 01A118, Jan. 2017, doi: 10.1116/1.4974220.
- [18] S. Larentis, B. Fallahazad, and E. Tutuc, “Field-effect transistors and intrinsic mobility in ultra-thin MoSe₂ layers,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 101, no. 22, p. 223104, Nov. 2012, doi: 10.1063/1.4768218.
- [19] V. Podzorov, M. E. Gershenson, Ch. Kloc, R. Zeis, and E. Bucher, “High-mobility field-effect transistors based on transition metal dichalcogenides,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 84, no. 17, pp. 3301–3303, Apr. 2004, doi: 10.1063/1.1723695.
- [20] L. Yu *et al.*, “High-Performance WSe₂ Complementary Metal Oxide Semiconductor Technology and Integrated Circuits,” *Nano Lett.*, vol. 15, no. 8, pp. 4928–4934, Aug. 2015, doi: 10.1021/acs.nanolett.5b00668.
- [21] M. Tosun *et al.*, “High-Gain Inverters Based on WSe₂ Complementary Field-Effect Transistors,” *ACS Nano*, vol. 8, no. 5, pp. 4948–4953, May 2014, doi: 10.1021/nn5009929.
- [22] J. Y. Lim *et al.*, “Homogeneous 2D MoTe₂ p–n Junctions and CMOS Inverters formed by Atomic-Layer-Deposition-Induced Doping,” *Advanced Materials*, vol. 29, no. 30, p. 1701798, 2017, doi: 10.1002/adma.201701798.
- [23] H. Wang *et al.*, “Integrated Circuits Based on Bilayer MoS₂ Transistors,” *Nano Lett.*, vol. 12, no. 9, pp. 4674–4680, Sep. 2012, doi: 10.1021/nl302015v.
- [24] R. Cheng *et al.*, “Electroluminescence and Photocurrent Generation from Atomically Sharp WSe₂/MoS₂ Heterojunction p–n Diodes,” *Nano Lett.*, vol. 14, no. 10, pp. 5590–5597, Oct. 2014, doi: 10.1021/nl502075n.
- [25] Y. Deng *et al.*, “Black Phosphorus–Monolayer MoS₂ van der Waals Heterojunction p–n Diode,” *ACS Nano*, vol. 8, no. 8, pp. 8292–8299, Aug. 2014, doi: 10.1021/nn5027388.

- [26] P. Desai, A. K. Ranade, R. Mahyavanshi, M. Tanemura, and G. Kalita, "Influence of MoS₂-Silicon Interface States on Spectral Photoresponse Characteristics," *physica status solidi (a)*, vol. 216, no. 18, p. 1900349, 2019, doi: 10.1002/pssa.201900349.
- [27] S. Chuang *et al.*, "MoS₂ P-type Transistors and Diodes Enabled by High Work Function MoO_x Contacts," *Nano Lett.*, vol. 14, no. 3, pp. 1337–1342, Mar. 2014, doi: 10.1021/nl4043505.
- [28] Y. Chen *et al.*, "High-Performance Photovoltaic Detector Based on MoTe₂/MoS₂ Van der Waals Heterostructure," *Small*, vol. 14, no. 9, p. 1703293, 2018, doi: 10.1002/sml.201703293.
- [29] V. Dhyani, M. Das, W. Uddin, P. K. Muduli, and S. Das, "Self-powered room temperature broadband infrared photodetector based on MoSe₂/germanium heterojunction with 35 A/W responsivity at 1550 nm," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 114, no. 12, p. 121101, Mar. 2019, doi: 10.1063/1.5085763.
- [30] X. Wang *et al.*, "Ultrasensitive and Broadband MoS₂ Photodetector Driven by Ferroelectrics," *Advanced Materials*, vol. 27, no. 42, pp. 6575–6581, 2015, doi: 10.1002/adma.201503340.
- [31] S. Bertolazzi, D. Krasnozhan, and A. Kis, "Nonvolatile Memory Cells Based on MoS₂/Graphene Heterostructures," *ACS Nano*, vol. 7, no. 4, pp. 3246–3252, Apr. 2013, doi: 10.1021/nn3059136.
- [32] A. A. Bessonov, M. N. Kirikova, D. I. Petukhov, M. Allen, T. Ryhänen, and M. J. A. Bailey, "Layered memristive and memcapacitive switches for printable electronics," *Nature Mater*, vol. 14, no. 2, Art. no. 2, Feb. 2015, doi: 10.1038/nmat4135.
- [33] Q. A. Vu *et al.*, "Two-terminal floating-gate memory with van der Waals heterostructures for ultrahigh on/off ratio," *Nat Commun*, vol. 7, no. 1, Art. no. 1, Sep. 2016, doi: 10.1038/ncomms12725.
- [34] G.-H. Lee *et al.*, "Flexible and Transparent MoS₂ Field-Effect Transistors on Hexagonal Boron Nitride-Graphene Heterostructures," *ACS Nano*, vol. 7, no. 9, pp. 7931–7936, Sep. 2013, doi: 10.1021/nn402954e.
- [35] Z. Zheng, T. Zhang, J. Yao, Y. Zhang, J. Xu, and G. Yang, "Flexible, transparent and ultra-broadband photodetector based on large-area WSe₂ film for wearable devices," *Nanotechnology*, vol. 27, no. 22, p. 225501, Apr. 2016, doi: 10.1088/0957-4484/27/22/225501.
- [36] H. Nam *et al.*, "Fabrication and comparison of MoS₂ and WSe₂ field-effect transistor biosensors," *Journal of Vacuum Science & Technology B*, vol. 33, no. 6, p. 06FG01, Nov. 2015, doi: 10.1116/1.4930040.
- [37] T. Pham, G. Li, E. Bekyarova, M. E. Itkis, and A. Mulchandani, "MoS₂-Based Optoelectronic Gas Sensor with Sub-parts-per-billion Limit of NO₂ Gas Detection," *ACS Nano*, vol. 13, no. 3, pp. 3196–3205, Mar. 2019, doi: 10.1021/acsnano.8b08778.

- [38] H. S. Lee, J. Ahn, W. Shim, S. Im, and D. K. Hwang, "2D WSe₂/MoS₂ van der Waals heterojunction photodiode for visible-near infrared broadband detection," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 113, no. 16, p. 163102, Oct. 2018, doi: 10.1063/1.5042440.
- [39] M. S. Choi *et al.*, "Lateral MoS₂ p–n Junction Formed by Chemical Doping for Use in High-Performance Optoelectronics," *ACS Nano*, vol. 8, no. 9, pp. 9332–9340, Sep. 2014, doi: 10.1021/nn503284n.
- [40] W. Choi *et al.*, "High-Detectivity Multilayer MoS₂ Phototransistors with Spectral Response from Ultraviolet to Infrared," *Advanced Materials*, vol. 24, no. 43, pp. 5832–5836, 2012, doi: 10.1002/adma.201201909.
- [41] D. Y. Song, D. Chu, S. K. Lee, S. W. Pak, and E. K. Kim, "High photoresponsivity from multilayer MoS₂/Si heterojunction diodes formed by vertically stacking," *Journal of Applied Physics*, vol. 122, no. 12, p. 124505, Sep. 2017, doi: 10.1063/1.4994740.
- [42] C.-Y. Huang *et al.*, "Hybrid 2D/3D MoS₂/GaN heterostructures for dual functional photoresponse," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 112, no. 23, p. 233106, Jun. 2018, doi: 10.1063/1.5030537.
- [43] G. H. Shin *et al.*, "Si–MoS₂ Vertical Heterojunction for a Photodetector with High Responsivity and Low Noise Equivalent Power," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 11, no. 7, pp. 7626–7634, Feb. 2019, doi: 10.1021/acsami.8b21629.
- [44] "2D Materials: An Introduction to Two-Dimensional Materials," *Ossila*. <https://www.ossila.com/pages/introduction-2d-materials> (accessed November 11, 2021).
- [45] J. Yu, J. Li, W. Zhang, and H. Chang, "Synthesis of high quality two-dimensional materials via chemical vapor deposition," *Chemical Science*, vol. 6, no. 12, pp. 6705–6716, 2015, doi: 10.1039/C5SC01941A.
- [46] Y. Zhang, L. Zhang, and C. Zhou, "Review of Chemical Vapor Deposition of Graphene and Related Applications," *Acc. Chem. Res.*, vol. 46, no. 10, pp. 2329–2339, Oct. 2013, doi: 10.1021/ar300203n.
- [47] H. Li, J. Wu, Z. Yin, and H. Zhang, "Preparation and Applications of Mechanically Exfoliated Single-Layer and Multilayer MoS₂ and WSe₂ Nanosheets," *Acc. Chem. Res.*, vol. 47, no. 4, pp. 1067–1075, Apr. 2014, doi: 10.1021/ar4002312.
- [48] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, "Van der Waals heterostructures," *Nature*, vol. 499, no. 7459, Art. no. 7459, Jul. 2013, doi: 10.1038/nature12385.
- [49] S. J. Haigh *et al.*, "Cross-sectional imaging of individual layers and buried interfaces of graphene-based heterostructures and superlattices," *Nature Mater*, vol. 11, no. 9, pp. 764–767, Sep. 2012, doi: 10.1038/nmat3386.

- [50] Z. Lin *et al.*, “2D materials advances: from large scale synthesis and controlled heterostructures to improved characterization techniques, defects and applications,” *2D Mater.*, vol. 3, no. 4, p. 042001, Dec. 2016, doi: 10.1088/2053-1583/3/4/042001.
- [51] S. B. Mitta *et al.*, “Electrical characterization of 2D materials-based field-effect transistors,” *2D Mater.*, vol. 8, no. 1, p. 012002, Nov. 2020, doi: 10.1088/2053-1583/abc187.
- [52] S.-J. Liang, B. Cheng, X. Cui, and F. Miao, “Van der Waals Heterostructures for High-Performance Device Applications: Challenges and Opportunities,” *Advanced Materials*, vol. 32, no. 27, p. 1903800, Jul. 2020, doi: 10.1002/adma.201903800.
- [53] S. K. Cheung and N. W. Cheung, “Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 49, no. 2, pp. 85–87, Jul. 1986, doi: 10.1063/1.97359.
- [54] M. Mamor, “Interface gap states and Schottky barrier inhomogeneity at metal/n-type GaN Schottky contacts,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 21, no. 33, p. 335802, Aug. 2009, doi: 10.1088/0953-8984/21/33/335802.
- [55] A. Tataroğlu and Ş. Altındal, “Characterization of current–voltage (I–V) and capacitance–voltage–frequency (C–V–f) features of Al/SiO₂/p-Si (MIS) Schottky diodes,” *Microelectronic Engineering*, vol. 83, no. 3, pp. 582–588, Mar. 2006, doi: 10.1016/j.mee.2005.12.014.
- [56] Y. S. Ocağ, M. Kulakci, T. Kılıçoğlu, R. Turan, and K. Akkılıç, “Current–voltage and capacitance–voltage characteristics of a Sn/Methylene Blue/p-Si Schottky diode,” *Synthetic Metals*, vol. 159, no. 15, pp. 1603–1607, Aug. 2009, doi: 10.1016/j.synthmet.2009.04.024.
- [57] M. E. Aydın, F. Yakuphanoglu, J.-H. Eom, and D.-H. Hwang, “Electrical characterization of Al/MEH-PPV/p-Si Schottky diode by current–voltage and capacitance–voltage methods,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 387, no. 1, pp. 239–244, Jan. 2007, doi: 10.1016/j.physb.2006.04.012.
- [58] “Metal / p-semiconductor Schottky contact in the depletion approximation.” <http://lampx.tugraz.at/~hadley/psd/L6/pabruptschottky.html> (accessed May 02, 2022).
- [59] D. Nečas and P. Klapetek, “Gwyddion: an open-source software for SPM data analysis,” *Open Physics*, vol. 10, no. 1, Jan. 2012, doi: 10.2478/s11534-011-0096-2.
- [60] S. Mignuzzi *et al.*, “Effect of disorder on Raman scattering of single-layer MoS₂,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, no. 19, p. 195411, May 2015, doi: 10.1103/PhysRevB.91.195411.
- [61] Y. Kim, T. Kim, and E. K. Kim, “Photoelectric Characteristics of a Large-Area n-MoS₂/p-Si Heterojunction Structure Formed through Sulfurization Process,” *Sensors*, vol. 20, no. 24, Art. no. 24, Jan. 2020, doi: 10.3390/s20247340.

- [62] T. Han *et al.*, “Probing the Optical Properties of MoS₂ on SiO₂/Si and Sapphire Substrates,” *Nanomaterials*, vol. 9, no. 5, Art. no. 5, May 2019, doi: 10.3390/nano9050740.
- [63] L. Liang and V. Meunier, “First-principles Raman spectra of MoS₂, WS₂ and their heterostructures,” *Nanoscale*, vol. 6, no. 10, pp. 5394–5401, Apr. 2014, doi: 10.1039/C3NR06906K.
- [64] M. Kamarauskas *et al.*, “Photovoltaic effect-driven IR response of heterojunctions obtained by direct CVD synthesis of MoS₂ nanolayers on crystalline silicon,” *Nanotechnology*, vol. 31, no. 42, p. 425603, Jun. 2020, doi: 10.1088/1361-6528/ab98c0.
- [65] V. Agafonov *et al.*, “Single variable defined technology control of the optical properties in MoS₂ films with controlled number of 2D-layers,” *Nanotechnology*, vol. 31, no. 2, p. 025602, Jan. 2020, doi: 10.1088/1361-6528/ab4753.
- [66] K. Sreenu, C. Venkata Prasad, and V. Rajagopal Reddy, “Barrier Parameters and Current Transport Characteristics of Ti/p-InP Schottky Junction Modified Using Orange G (OG) Organic Interlayer,” *Journal of Elec Materi*, vol. 46, no. 10, pp. 5746–5754, Oct. 2017, doi: 10.1007/s11664-017-5611-9.
- [67] A. Tataroğlu and Ş. Altındal, “Characterization of current–voltage (I–V) and capacitance–voltage–frequency (C–V–f) features of Al/SiO₂/p-Si (MIS) Schottky diodes,” *Microelectronic Engineering*, vol. 83, no. 3, pp. 582–588, Mar. 2006, doi: 10.1016/j.mee.2005.12.014.

INVESTIGATION OF ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF TWO-DIMENSIONAL LAYER HETEROSTRUCTURES AND APPLICATION TO DIRECTLY CHANGE THE DIRECT GROWING CONDITIONS OF MOLYBDENUM DISULFIDE

Domantas Česnys

Summary

Heterostructures of transition metal disulfides (TMD's) have unique mechanical, thermal, electrical and optical properties which differ with structure thickness. However, the function of such compounds is not well understood using known models. The study of mentioned properties of these structures yields characteristic parameters suitable not only for modeling their working principle, but also describing the criteria for technological conditions to form a heterostructure of predicted parameters.

In this work, we prepared six different samples of p-Si/MoS₂ by changing the parameters of sulfurization process. The samples were treated with a different temperature and different flow of sulfur during sulfurization. Electrical measurements were performed in order to obtain I-V and C-V characteristics from which p-Si/MoS₂ structure characterizing parameters were calculated. By comparing values of the parameters, we were able to quantitatively distinguish samples in which MoS₂ was fully formed and managed to describe the differences between those samples in which MoS₂ was not fully formed.

Along with electrical measurements we performed Raman spectroscopy and scanning probe microscopy measurements. Both methods agreed with our results from electrical measurements and also demonstrated that electrical measurements were more informative regarding the analysis of p-Si/MoS₂ structure. It is also safe to say, that electrical measurements can be used as an efficient method to describe transitional p-Si/MoS₂ structures.

In case of sulfurization parameters, the most optimal sulfurization temperature and the most optimal flow of gaseous mix of S/Ar during sulfurization was clarified to be 500 °C and 150 l/h accordingly. The samples in which MoS₂ was formed very poorly, were manufactured using 100 l/h S/Ar flow and 600 °C temperature.