

Экспериментальное и теоретическое исследование функционализации квазидвумерных образцов MoS_2 плазмой $\text{N}_2/\text{O}_2/\text{H}_2$

Д.Е. Мележенко, Д.В. Лопаев, А.И. Зотович, С.А. Хлебников, А.А. Соловых,
Ю.А. Манкелевич, Л.С. Новиков, Е.Н. Воронина
НИИЯФ имени Д.В. Скобельцына МГУ имени М.В. Ломоносова

Введение

Квази2D дисульфид молибдена MoS_2 – один из наиболее перспективных полупроводниковых материалов нового поколения благодаря уникальному сочетанию электронных, механических, тепловых и оптических свойств¹.

Для создания надежной технологии плазменной обработки квази2D материалов необходим тщательный анализ эффектов, возникающих в этих пленках под действием как радикалов, так и ионов плазмы.

Методика исследования

Плазма $\text{N}_2/\text{O}_2/\text{H}_2$ вниз по потоку

- стенд с удаленным источником ICP плазмы (частота 13.56 МГц, мощность 200 Вт давление 100 мТорр, проток газа 20 sccm)
- тепловые атомы N, O и H, флюенс до 10^{23} cm^{-2}

Плазма $\text{N}_2/\text{O}_2/\text{H}_2$

- поверхностно-волновой разряд (SWD), частота 81 МГц
- ионы N_2^+ , O_2^+ , H_3^+ с энергией 22, 22 и 35 эВ.

Диагностика образцов – эллипсометрия, ACM, KPC, XRF, XPS спектры

Диагностика образцов

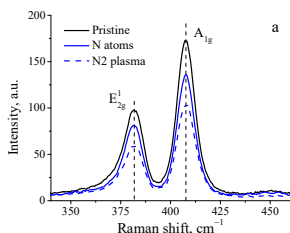
- спектроскопическая эллипсометрия,
- атомно-силовая микроскопия
- КРС спектроскопия
- энергодисперсионная рентгеновская (EDX) спектроскопия
- рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS)

Моделирование

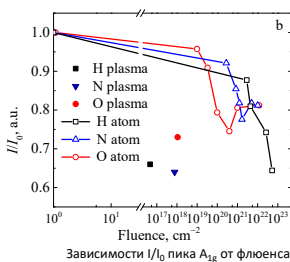
- метод теории функционала плотности (DFT)
- статические и динамические расчеты

Результаты и обсуждение

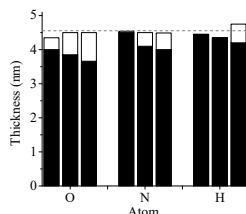
КРС спектроскопия и эллипсометрия



КРС спектры исходных и облученных пленок



Зависимости I/I_0 пика A_{1g} от флюенса воздействующих частиц



Толщины пленок MoS_2 без подложки на основании эллипсометрических данных

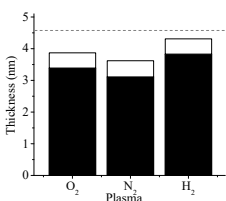
По мере увеличения длительности обработки наблюдалось постепенное ослабление интенсивности линий в КРС спектрах, которое свидетельствует о модификации поверхностного слоя пленки MoS_2 .

Ослабление происходит значительно быстрее под действием плазмы, т.е. одновременном воздействии ионов и атомов, чем при обработке только атомами.

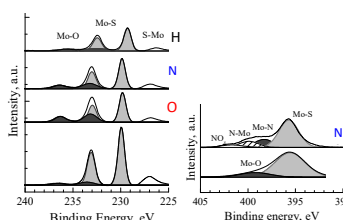
В случае атомов O и N с ростом времени обработки интенсивность перестает снижаться, однако для атомов H подобного насыщения не происходит.

Анализ эллипсометрических данных показал, что под действием атомов общая толщина пленки MoS_2 практически не изменяется, но происходит изменение оптических свойств образцов вблизи поверхности.

Совместное воздействие ионов и атомов приводит к более существенному уменьшению толщины пленки MoS_2



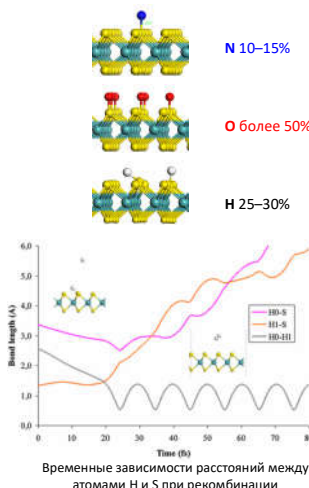
EDX и XPS спектроскопия



В результате обработки атомами O и N наблюдается заметное снижение концентрации серы в образцах и увеличение концентрации кислорода.

Воздействие атомов N также приводит к образованию модифицированного слоя MoS_2N_x за счет частичного замещения серы азотом на поверхности пленки.

DFT-моделирование



Основные процессы при взаимодействии тепловых атомов N, O и H с поверхностью бездефектного монослоя MoS_2 :

- хемосорбция (N^* , O, H)
- физическая сорбция и рассеяние (N)
- рекомбинация (N, H)

Образование S-вакансий под действием тепловых атомов N, O и H возможно в результате реакций отрыва молекул SO_2 , SN, H_2S соответственно.

Воздействие ионов N_2^+ с энергией 10–15 эВ не приводит к появлению стабильных дефектов и встраиванию азота в монослой.

Для интенсивного образования дефектов на поверхности монослоя необходима энергия ионов 20–35 эВ.

Выводы

Воздействие атомов O, N и H на ультратонкие пленки MoS_2 приводит к модификации их верхних слоев за счет удаления серы и встраивания в образовавшиеся вакансии налетающих атомов.

При обработке атомами общая толщина пленки практически не изменяется, но на ее поверхности может формироваться ультратонкий диэлектрический слой. Высокая химическая активность атомов O обуславливает более существенное изменение свойств приповерхностных слоев пленок по сравнению с атомами N и H.

В противоположность атомам обработка плазмой даже при низких энергиях ионов приводит к частичному удалению верхних слоев, тем самым вызывая более интенсивное разрушение пленок

Полученные данные могут использоваться для разработки новых и оптимизации существующих технологий обработки полупроводниковых материалов

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00178