

GROWTH, MATERIAL CHARACTERIZATION, AND APPLICATIONS OF TRANSITION METAL DICALCOGENIDES

MD SAMIM REZA



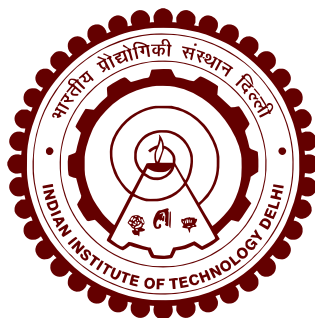
**FUNCTIONAL MATERIALS & DEVICES LABORATORY
DEPARTMENT OF ELECTRICAL ENGINEERING
INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI
MARCH 2026**

©Indian Institute of Technology Delhi(IITD), New Delhi, 2026
All rights reserved.

Growth, material characterization, and applications of transition metal dichalcogenides

Md Samim Reza

A dissertation submitted in partial fulfilment of conditions for award of the degree of Doctor of Philosophy



Functional Materials & Devices Laboratory
Department of Electrical Engineering
Indian Institute of Technology Delhi
March 2026

Copyright © 2026 Md Samim Reza All Rights Reserved, except for any material that may be clearly marked and attributed to external sources. In those cases alone, the copyrights pertaining to the identified material belong to their respective owners.

Use of the material herein is protected by Indian Copyright Act, 1957 (and any subsequent Amendments), and applicable International copyright Treaties that India is signatory to. "Fair Use" and "fair dealing" is permitted within the context of widely accepted academic standards, subject to legal interpretation in Indian courts.

The author(s) hereby grant(s) to IIT Delhi permission to reproduce, and to distribute publicly, paper and electronic copies of this document using any medium now known, or hereafter created, subject to conditions of the copyright, and reproduction of this notice.

Certificate from Advisors

This is to certify that the thesis entitled **Growth, material characterization, and applications of transition metal dichalcogenides**, being submitted by **Md Samim Reza** to IIT Delhi, is worthy of consideration for the award of the degree of Ph.D. and is a record of the original research work carried out by this student under my/our supervision. The results contained in this thesis, which may have been previously communicated in the form of manuscripts, conference presentations or patent filings, have not been submitted in part or full, to any other University or Institute for the award of any academic degree.

I/We certify that this student has pursued the prescribed course of research.

Research Advisor(s):



Madhusudan Singh

Acknowledgement

I extend my deepest gratitude to my advisor, Professor Madhusudan Singh, whose unwavering support and patience have been the cornerstones of my PhD journey. His insightful critiques, constructive feedback, and constant encouragement shaped my research trajectory and nurtured my growth as a scientist. I am profoundly grateful for his mentorship and belief in my potential, and I am deeply indebted to him for his mentorship and for instilling a passion for 2D materials.

I am also grateful to my esteemed committee members, Professor Prof. Abhishek Dixit, Prof. V. Ramgopal Rao, and Prof. R.S. Dhaka, for their invaluable contributions to this dissertation. Their thoughtful questions, insightful suggestions, and careful reviews significantly enhanced the quality and depth of my work.

I also want to thank the Department of Electrical Engineering and the Indian Institute of Technology Delhi for providing essential resources and fostering an inspiring research environment. I would also like to acknowledge the administrative and technical staff at IIT Delhi for their invaluable support. Their efforts have ensured the seamless progression of my research activities, and I am grateful for their assistance.

I would also like to acknowledge the contributions of my collaborators, Shubhangi Majumdar (PhD Scholar) and Prof. Pramit Chowdhury, for their valuable discussions, technical assistance, and collaborative spirit. Their help with transient absorption spectroscopy was invaluable. I would also like to thank my industry collaborators from Quazar Tech. (Aman Abhishek Tiwari, Dr. Krishnendu Chatterjee, Dr. Deshdeep Sahdev) for developing the custom chemical vapor deposition (CVD) system and assistance with the development of MoS₂ growth recipe.

My heartfelt thanks go to my FMDL lab mates, Dr. Parvez Akhtar, Tejveer Singh Anand, Dr. Rajinder Singh Deol, Dr. Nidhi Dua, and Prof. Bhaskar Mitra's Group labmates. Their friendship and assistance have been a source of great support, and their contributions to our collaborative research have been invaluable.

I extend my sincere gratitude to the postdoctoral researchers, Dr. Henam Sylvia Devi, Dr. Sandeep Kumar, and Dr. Soumen Saha, for their mentorship and collaboration at different stages of my PhD. Their insights and expertise in the field of growth chemistry have significantly enhanced the quality of my research.

To my family and friends, I offer my deepest and most heartfelt gratitude. Your steadfast love, support, and belief in me have been my guiding light throughout this long and demanding journey. I am incredibly grateful to my parents, brothers, sisters-in-law, cousins, uncles, and aunts for their sacrifices, understanding, and endless encouragement. Your unwavering support has been a constant source of motivation and inspiration.

Finally, and most importantly, a big hug goes out to my nephews and niece, Rahat, Rifat, and Sanaya. Their boundless energy, infectious laughter, and delightfully silly demands provided much-needed happy moments throughout this process.

Above all, I express my gratitude to the Almighty, my Sustainer, whose guidance, patience, and wisdom carried me through this journey.

Md Samim Reza
New Delhi, March 2026

Abstract

Two-dimensional transition metal dichalcogenides (2D-TMDs) have recently garnered significant interest among materials scientists due to their diverse properties, spanning from electronic to optoelectronic applications. The research problem we aim to address is the inherent zero bandgap of graphene, which limits its practical use in the semiconductor industry. This problem has led to the exploration of bandgap engineering, which, while producing promising results, adds cost to the fabrication process and significantly decreases the properties. The unique and wide range of features exhibited by 2D-TMDs, from semiconductor behavior (MoS_2 , WSe_2) to insulating behavior (HfS_2) to metallic behavior (VSe_2 , NbS_2), make them a potential solution to this problem. Among all the TMDs, molybdenum disulfide (MoS_2) is the most widely studied. The nonzero bandgap in MoS_2 , WS_2 can be tuned an indirect-to-direct by reducing to a monolayer. Bulk MoS_2 has an indirect bandgap of ~ 1.2 eV, which is tuned to a direct bandgap of ~ 1.8 eV for monolayer MoS_2 . Similarly, in WS_2 , the band gap can also be tuned from ~ 1.3 eV indirect-to-direct ~ 2.1 eV direct bandgap semiconductor by decreasing the number of layers to single. Tunable bandgaps make them useful for fabricating memristors, transistors, photodetectors, piezoelectric devices, etc. A significant amount of work has been carried out in this field, but growing high crystalline large domain-sized monolayer WS_2 remains a major challenge, underscoring the need for further research and innovation in the field.

An atmospheric pressure chemical vapor deposition (APCVD) was employed to grow WS_2 on a SiO_2 substrate. Field emission scanning electron microscopy scan revealed the growth of various morphologies of WS_2 . In triangular flakes, a maximum edge length of ~ 110 μm (for multilayer) and ~ 60 μm (for monolayer) was observed optically. Energy dispersive X-ray analysis revealed a W:S ratio close to a 1:2 for the tungsten-to-sulfur ratio. Two sets of intensity ratios $\left(\frac{2LA(M)}{A_{1g}}\right)$, calculated from Raman spectra, were found: ~ 2.15 and ~ 0.56 , corresponding respectively to monolayer, and multilayer growth of WS_2 . Photoluminescence measurements yield peaks at ~ 640 nm (for monolayer) and ~ 660 nm (for multilayer), with the former peak exhibiting a ~ 20 -fold enhancement than the latter, suggesting a radiatively more efficient direct bandgap. Various sample geometries were employed to address the inherent problem of low-surface coverage for CVD-grown TMDs. Along with the monolayer, multilayer WS_2 flakes of different shapes: triangular pyramidal, truncated triangular, butterfly-shaped, and hexagonal flakes, nanoflowers as well as quasi-fractal shapes of varying dimensions, were also grown by optimizing the growth parameters. The arrangement of substrates in sample geometries B (two growth substrates placed on top, facing each other) and C (similar to B but with thin strips of silicon wafer acting as pillars) likely enhanced the local precursor concentration at the substrate surface, leading to improved growth area coverage. As expected, moving inward from the precursor vapor entry edge increased surface coverage; however, multilayer WS_2 growth predominated over monolayer formation in these approaches. Through implementing sample geometry C, the inherent issue of low vapor concentration at the substrate surface was addressed, as evident from the improved surface coverage from $\sim 23.31\%$ (classical three-region APCVD approach) to $\sim 62.86\%$ growth by employing a sample geometry C. However, complete surface coverage was not achieved.

A two-step growth was implemented to address this issue: deposition of nanoscale thin tungsten using a sputtering approach and sulfurization at the desired temperature. The growth of multilayer nanosheets of WS_2 was observed in field emission scanning electron microscopy (FESEM) analysis. An energy dispersive X-ray (EDX) study revealed a stoichiometry close to a 1:2 atomic ratio for W:S, confirming the growth of WS_2 . X-ray diffraction (XRD) analysis revealed the growth of hexagonal phased WS_2 (2H- WS_2). Various sulfur precursors ranging from 100-900 mg were used as a source of sulfur, keeping all other parameters unchanged. The EDX analyzed as-grown samples to characterize the effect of sulfur amount on growth stoichiometry. The impact of sulfur on the growth of WS_2 thin film using sulfurization was studied. The as-grown thin films were categorized into three stoichiometric regions based on the S: W ratio from EDX analysis: (a) < 2 , (b) ~ 2 , and (c) > 2 .

To further simplify the sulfurization process, a drop cast of alcohol-dispersed WO_3 is followed by sulfurization. Drop-cast

provides control over the distribution and coverage of WO_3 on the substrate (SiO_2). Moreover, the ethanol-dispersed drop-cast method is straightforward and eliminates the necessity of specialized precursor materials or sophisticated deposition tools like sputtering or ALD. This approach is adaptable and compatible with various growth substrates.

Bulk WS_2 , a semiconductor with a bandgap of ~ 1.35 eV, has low photoresponsivity owing to the poor optical absorbance, which restricts its application in high-performance photodetection. The study observed that the doping of silver in WS_2 (Ag:WS_2) enhanced the photoelectronic response. The material's structure, morphology, and purity were analyzed using high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM), FESEM, and Raman spectroscopy. HRTEM revealed the sheet-like morphology of WS_2 and the presence of spherical Ag nanoparticles in Ag:WS_2 . A threefold increase in absorbance of WS_2 upon introducing Ag was observed in ultraviolet-visible (UV-Vis) spectra. Lateral metal-semiconductor-metal (MSM) photodetectors were fabricated using pristine WS_2 (control) and Ag:WS_2 (test) to evaluate their photodetection capabilities. Strong phonon scattering, often induced by intrinsic vacancy defects, can significantly hinder the performance of carrier transport, resulting in poor photodetection. Comparative analysis of these devices under dark conditions and exposure to solar AM1.5G light revealed that the Ag:WS_2 (test) device exhibited a ~ 9 -fold increase in photocurrent compared to its pristine WS_2 (control) counterpart under the same illuminated conditions. Further, this study demonstrates a ~ 6 -fold increase in the carrier lifetime in silver-doped test devices using transient absorption, implying an effective reduction in carrier-phonon scattering.

सार

दो-आयामी संक्रमण धातु डाइचलकोजेनाइड्स (2D-TMDs) ने हाल ही में सामग्री वैज्ञानिकों के बीच काफी रुचि जगाई है, क्योंकि इनके गुण बहुत विविध हैं – इलेक्ट्रॉनिक से लेकर ऑप्टोइलेक्ट्रॉनिक अनुप्रयोगों तक। जिस शोध समस्या को हम हल करना चाहते हैं, वह है ग्राफीन का स्वाभाविक 'शून्य बैंडगैप', जो अर्धचालक उद्योग में इसके व्यावहारिक उपयोग को सीमित करता है। इस समस्या के कारण 'बैंडगैप इंजीनियरिंग' की खोज शुरू हुई; हालाँकि इसके परिणाम आशाजनक रहे हैं, लेकिन यह निर्माण प्रक्रिया की लागत बढ़ा देती है और सामग्री के गुणों को काफी हद तक कम कर देती है। 2D-TMDs द्वारा प्रदर्शित अद्वितीय और व्यापक विशेषताएं – अर्धचालक व्यवहार (MoS_2 , WSe_2) से लेकर कुचालक व्यवहार (HfS_2) और फिर धात्विक व्यवहार (VSe_2 , NbS_2) तक – इन्हें इस समस्या का एक संभावित समाधान बनाती हैं। सभी TMDs में से, मोलिब्डेनम डाइसल्फाइड (MoS_2) पर सबसे अधिक अध्ययन किया गया है। MoS_2 और WS_2 में मौजूद 'अशून्य बैंडगैप' को, सामग्री को घटाकर एक 'मोनोलेयर' (एकल परत) में बदलने पर, 'अप्रत्यक्ष' से 'प्रत्यक्ष' प्रकार में बदला जा सकता है। स्थूल MoS_2 का बैंडगैप अप्रत्यक्ष होता है और इसका मान लगभग 1.2 eV होता है; वहीं, एकल-परत MoS_2 के लिए इसे बदलकर लगभग 1.8 eV का प्रत्यक्ष बैंडगैप बना दिया जाता है। इसी तरह, WS_2 में भी, परतों की संख्या घटाकर एक करने पर बैंडगैप को लगभग 1.3 eV (अप्रत्यक्ष) से बदलकर लगभग 2.1 eV (प्रत्यक्ष) बैंडगैप वाले अर्धचालक में बदला जा सकता है। इन बैंडगैप्स को अपनी आवश्यकतानुसार बदलने की क्षमता इन्हें मेमरिस्टर्स, ट्रांजिस्टर्स, फोटोडिटेक्टर्स, पीजोइलेक्ट्रिक उपकरणों आदि के निर्माण के लिए उपयोगी बनाती है। इस क्षेत्र में काफी काम किया जा चुका है, लेकिन उच्च-क्रिस्टलीयता और बड़े डोमेन-आकार वाली एकल-परत WS_2 को विकसित करना अभी भी एक बड़ी चुनौती बना हुआ है; यह इस बात को रेखांकित करता है कि इस क्षेत्र में और अधिक शोध तथा नवाचार की आवश्यकता है।

SiO_2 सबस्ट्रेट (आधार) पर WS_2 को विकसित करने के लिए 'वायुमंडलीय दबाव रासायनिक वाष्प जमाव' (APCVD) विधि का उपयोग किया गया। 'फील्ड एमिशन स्कैनिंग इलेक्ट्रॉन माइक्रोस्कोपी' द्वारा किए गए स्कैन से WS_2 की विभिन्न प्रकार की आकृतियों के विकास का पता चला। त्रिकोणीय फ्लेक्स में, ऑप्टिकली देखने पर अधिकतम किनारे की लंबाई $\sim 110 \mu\text{m}$ (मल्टीलेयर के लिए) और $\sim 60 \mu\text{m}$ (मोनोलेयर के लिए) पाई गई। एनर्जी डिस्पर्सिव X-रे एनालिसिस से पता चला कि टंगस्टन-से-सल्फर का अनुपात (W:S) 1:2 के करीब था। रमन स्पेक्ट्रा से गणना किए गए तीव्रता अनुपातों $\left(\frac{2LA(M)}{A_{1g}}\right)$ के दो सेट मिले: ~ 2.15 र ~ 0.56 , जो क्रमशः WS_2 के मोनोलेयर और मल्टीलेयर विकास के अनुरूप थे। फोटोल्यूमिनेसेंस मापों से $\sim 640 \text{ nm}$ (मोनोलेयर के लिए) और $\sim 660 \text{ nm}$ (मल्टीलेयर के लिए) पर पीक मिले; इनमें से पहला पीक दूसरे की तुलना में ~ 20 गुना अधिक तीव्रता दिखाता है, जो एक अधिक रेडिएटिव रूप से कुशल डायरेक्ट बैंडगैप का संकेत देता है। CVD-विकसित TMDs के लिए कम सतह कवरेज की अंतर्निहित समस्या को हल करने के लिए विभिन्न नमूना ज्यामितियों का उपयोग किया गया। मोनोलेयर के साथ-साथ, विकास मापदंडों को अनुकूलित करके विभिन्न आकारों के मल्टीलेयर WS_2 फ्लेक्स भी विकसित किए गए: जैसे त्रिकोणीय पिरामिडनुमा, कटे हुए त्रिकोणीय, तितली के आकार के, और षट्भुज फ्लेक्स, नैनोफ्लावर, साथ ही विभिन्न आयामों के अर्ध-फ्रैक्चल आकार। नमूना ज्यामितियों B (दो विकास सबस्ट्रेट्स एक-दूसरे के ऊपर, आमने-सामने रखे गए) और C (B के समान, लेकिन सिलिकॉन वेफर की पतली पट्टियों का उपयोग खंभों के रूप में किया गया) में सबस्ट्रेट्स की व्यवस्था ने संभवतः सबस्ट्रेट की सतह पर स्थानीय प्रीकर्सर सांद्रता को बढ़ाया, जिससे विकास क्षेत्र कवरेज में सुधार हुआ। जैसा कि अपेक्षित था, प्रीकर्सर वाष्प प्रवेश किनारे से अंदर की ओर बढ़ने पर सतह कवरेज में वृद्धि हुई; हालाँकि, इन दृष्टिकोणों में मोनोलेयर निर्माण की तुलना में मल्टीलेयर WS_2 का विकास अधिक प्रभावी रहा। नमूना ज्यामिति C को लागू करके, सबस्ट्रेट की सतह पर कम वाष्प सांद्रता की अंतर्निहित समस्या का समाधान किया गया; यह बात सतह कवरेज में हुए सुधार से स्पष्ट है, जो $\sim 23.31\%$ (पारंपरिक

तीन-क्षेत्र APCVD दृष्टिकोण) से बढ़कर $\sim 62.86\%$ (नमूना ज्यामिति C का उपयोग करके) हो गया। हालाँकि, पूर्ण सतह कवरेज प्राप्त नहीं हो सका।

इस समस्या को हल करने के लिए दो-चरणों वाली विकास प्रक्रिया अपनाई गई: स्पटरिंग विधि का उपयोग करके नैनोस्केल पतली टंगस्टन परत जमाना और वांछित तापमान पर सल्फराइजेशन करना। फील्ड एमिशन स्कैनिंग इलेक्ट्रॉन माइक्रोस्कोपी (FESEM) विश्लेषण में WS_2 की बहु-परत नैनोशीट्स का विकास देखा गया। एक ऊर्जा-प्रकीर्णन X-किरण (EDX) अध्ययन से पता चला कि W:S का परमाणु अनुपात 1:2 के काफी करीब था, जिससे WS_2 के विकास की पुष्टि हुई। X-किरण विवर्तन (XRD) विश्लेषण से हेक्सागोनल चरण वाले WS_2 ($2H-WS_2$) के विकास का पता चला। सल्फर के स्रोत के रूप में 100–900 mg तक के विभिन्न सल्फर प्रीकर्सर्स (पूर्वगामी पदार्थों) का उपयोग किया गया, जबकि अन्य सभी मापदंडों को अपरिवर्तित रखा गया। EDX द्वारा विकसित नमूनों का विश्लेषण किया गया ताकि विकास की रससमीकरणमिति पर सल्फर की मात्रा के प्रभाव को समझा जा सके। सल्फराइजेशन विधि का उपयोग करके WS_2 की पतली फिल्म के विकास पर सल्फर के प्रभाव का अध्ययन किया गया। विकसित पतली फिल्मों को EDX विश्लेषण से प्राप्त S:W अनुपात के आधार पर तीन रससमीकरणमितीय क्षेत्रों में वर्गीकृत किया गया: (a) < 2 , (b) ~ 2 , और (c) > 2 ।

सल्फराइजेशन प्रक्रिया को और आसान बनाने के लिए, अल्कोहल में घुले हुए WO_3 की एक बूंद (ड्रॉप कास्ट) डाली जाती है, जिसके बाद सल्फराइजेशन किया जाता है। ड्रॉप-कास्ट विधि से सबस्ट्रेट (SiO_2) पर WO_3 के फैलाव और कवरेज को नियंत्रित किया जा सकता है। इसके अलावा, इथेनॉल में घुली हुई ड्रॉप-कास्ट विधि सीधी-सादी है और इसमें किसी खास प्रीकर्सर सामग्री या स्पटरिंग या ALD जैसे जटिल जमाव (deposition) उपकरणों की जरूरत नहीं पड़ती। यह तरीका लचीला है और अलग-अलग तरह के ग्रोथ सबस्ट्रेट्स के साथ इस्तेमाल किया जा सकता है।

थोक WS_2 , जो ~ 1.35 eV के बैंडगैप वाला एक सेमीकंडक्टर है, में कम ऑप्टिकल अवशोषण के कारण फोटो-रिस्पॉन्सिविटी कम होती है, जिससे उच्च-प्रदर्शन वाले फोटोडिटेक्शन में इसका उपयोग सीमित हो जाता है। इस अध्ययन में पाया गया कि WS_2 में चांदी (Ag) की डोपिंग करने से ($Ag:WS_2$) फोटोइलेक्ट्रॉनिक प्रतिक्रिया बढ़ गई। सामग्री की संरचना, आकारिकी और शुद्धता का विश्लेषण हाई-रिज़ॉल्यूशन ट्रांसमिशन इलेक्ट्रॉन माइक्रोस्कोपी (HRTEM), FESEM और रमन स्पेक्ट्रोस्कोपी का उपयोग करके किया गया। HRTEM से WS_2 की शीट जैसी संरचना और $Ag:WS_2$ में गोलाकार Ag नैनोकणों की उपस्थिति का पता चला। अल्ट्रावायलेट-विज़िबल (UV-Vis) स्पेक्ट्रा में, Ag मिलाने पर WS_2 के अवशोषण में तीन गुना वृद्धि देखी गई। फोटोडिटेक्शन क्षमताओं का मूल्यांकन करने के लिए, शुद्ध WS_2 (नियंत्रण) और $Ag:WS_2$ (परीक्षण) का उपयोग करके पार्श्व धातु-सेमीकंडक्टर-धातु (MSM) फोटोडिटेक्टर बनाए गए। तीव्र फोनन प्रकीर्णन, जो अक्सर आंतरिक रिक्ति दोषों के कारण होता है, वाहक परिवहन के प्रदर्शन में काफी बाधा डाल सकता है, जिसके परिणामस्वरूप फोटोडिटेक्शन खराब होता है। अंधेरे की स्थिति में और सौर AM1.5G प्रकाश के संपर्क में आने पर इन उपकरणों के तुलनात्मक विश्लेषण से पता चला कि $Ag:WS_2$ (परीक्षण) उपकरण ने समान रोशनी की स्थिति में अपने शुद्ध WS_2 (नियंत्रण) समकक्ष की तुलना में फोटोकंट में ~ 9 गुना वृद्धि प्रदर्शित की। इसके अलावा, यह अध्ययन क्षणिक अवशोषण का उपयोग करके चांदी-डोप्ड परीक्षण उपकरणों में वाहक जीवनकाल में ~ 6 गुना वृद्धि को दर्शाता है, जिसका अर्थ है कि वाहक-फोनन प्रकीर्णन में प्रभावी कमी आई है।

সারসংক্ষেপ

দ্বিমাত্রিক ট্রানজিশন মেটাল ডাইক্যালকোজেনাইডসমূহ (2D-TMDs) সম্প্রতি বস্তুবিজ্ঞানীদের (materials scientists) মধ্যে ব্যাপক আগ্রহের সৃষ্টি করেছে; এর কারণ হলো এদের বৈচিত্র্যময় বৈশিষ্ট্যসমূহ, যা ইলেকট্রনিক থেকে শুরু করে অপটোইলেকট্রনিক—উভয় ক্ষেত্রেই বিস্তৃত। আমরা যে গবেষণাগত সমস্যাটির সমাধানের লক্ষ্য নির্ধারণ করেছি, তা হলো গ্রাফিনের সহজাত ‘শূন্য ব্যান্ডগ্যাপ’ (zero bandgap) সমস্যা; এই সমস্যাটি সেমিকন্ডাক্টর শিল্পে গ্রাফিনের ব্যবহারিক প্রয়োগকে সীমিত করে দেয়। এই সমস্যার সমাধানের পথ ধরেই ‘ব্যান্ডগ্যাপ ইঞ্জিনিয়ারিং’-এর অনুসন্ধান শুরু হয়; যদিও এই পদ্ধতিটি আশাব্যঞ্জক ফলাফল প্রদান করে, তবুও এটি উৎপাদন প্রক্রিয়ার খরচ বাড়িয়ে দেয় এবং গ্রাফিনের মৌলিক বৈশিষ্ট্যগুলোকে উল্লেখযোগ্যভাবে হ্রাস করে ফেলে। 2D-TMDs-এর প্রদর্শিত অনন্য ও বিস্তৃত বৈশিষ্ট্যসমূহ—যা সেমিকন্ডাক্টর আচরণ (MoS_2 , WSe_2) থেকে শুরু করে অন্তরক বা ইনসুলেটর আচরণ (HfS_2) এবং ধাতব আচরণ (VSe_2 , NbS_2) পর্যন্ত বিস্তৃত—এদেরকে উল্লিখিত সমস্যার একটি সম্ভাব্য সমাধান হিসেবে প্রতিষ্ঠিত করে। সমস্ত TMD-এর মধ্যে, মলিবডেনাম ডাইসালফাইড (MoS_2) নিয়েই সর্বাধিক গবেষণা পরিচালিত হয়েছে। MoS_2 এবং WS_2 -এর অ-শূন্য ব্যান্ডগ্যাপকে এদের স্তরসংখ্যা কমিয়ে একক স্তরে (monolayer) পরিণত করার মাধ্যমে ‘পরোক্ষ’ (indirect) অবস্থা থেকে ‘প্রত্যক্ষ’ (direct) অবস্থায় রূপান্তর বা টিউন করা সম্ভব। স্থূল বা বাল্ক (MoS_2)-এর একটি পরোক্ষ ব্যান্ডগ্যাপ থাকে, যার মান প্রায় ~ 1.2 eV; কিন্তু একে যখন একক স্তরে (MoS_2 monolayer) পরিণত করা হয়, তখন এর ব্যান্ডগ্যাপ পরিবর্তিত হয়ে একটি প্রত্যক্ষ ব্যান্ডগ্যাপে রূপ নেয়, যার মান প্রায় ~ 1.8 eV। একইভাবে, WS_2 -এর ক্ষেত্রেও স্তরসংখ্যা কমিয়ে একক স্তরে নিয়ে আসার মাধ্যমে এর ব্যান্ডগ্যাপকে পরোক্ষ অবস্থা (~ 1.3 eV) থেকে প্রত্যক্ষ সেমিকন্ডাক্টর অবস্থা (~ 2.1 eV) পর্যন্ত টিউন বা পরিবর্তন করা সম্ভব। এই পরিবর্তনযোগ্য ব্যান্ডগ্যাপের বৈশিষ্ট্যের কারণেই 2D-TMDs-সমূহ মেমরিস্টর, ট্রানজিস্টর, ফটোডিটেক্টর, পিজোইলেকট্রিক যন্ত্রাংশ ইত্যাদি তৈরির ক্ষেত্রে অত্যন্ত উপযোগী হয়ে ওঠে। এই ক্ষেত্রে ইতিমধ্যেই উল্লেখযোগ্য পরিমাণ গবেষণা ও কাজ সম্পন্ন হয়েছে; তথাপি, উচ্চ-ক্ষটিক গুণমানসম্পন্ন (high crystalline) এবং বৃহৎ-পরিসরের (large domain-sized) একক-স্তরবিশিষ্ট WS_2 প্রস্তুত বা ‘গ্রো’ করা এখনও একটি বড় চ্যালেঞ্জ হিসেবেই রয়ে গেছে—যা এই ক্ষেত্রে আরও গভীর গবেষণা এবং উদ্ভাবনের প্রয়োজনীয়তাকেই জোরালোভাবে নির্দেশ করে।

একটি SiO_2 সাবস্ট্রেটের ওপর WS_2 প্রস্তুত করার উদ্দেশ্যে ‘বায়ুমণ্ডলীয় চাপে রাসায়নিক বাষ্প অধঃক্ষেপণ’ (APCVD) নামক একটি পদ্ধতি প্রয়োগ করা হয়েছিল। ‘ফিল্ড এমিশন স্ক্যানিং ইলেকট্রন মাইক্রোস্কোপি’ (FESEM) স্ক্যানের মাধ্যমে WS_2 -এর বিভিন্ন ধরনের গঠনশৈলী বা ‘মরফোলজি’ গঠিত হওয়ার বিষয়টি উন্মোচিত হয়েছে। ত্রিকোণাকার ফ্লেক বা পাতলা স্তরের ক্ষেত্রে, আলোকীয় পর্যবেক্ষণে সর্বোচ্চ প্রান্তের দৈর্ঘ্য বহুস্তরের (multilayer) জন্য প্রায় $110 \mu\text{m}$ এবং এককস্তরের (monolayer) জন্য প্রায় $60 \mu\text{m}$ পরিলক্ষিত হয়েছে। শক্তি-বিক্ষিপ্ত এক্স-রে বিশ্লেষণ (energy dispersive X-ray analysis) থেকে দেখা গেছে যে, টাংস্টেন ও সালফারের অনুপাত (W:S) ১:২-এর অত্যন্ত কাছাকাছি। রামান বর্ণালী (Raman spectra) থেকে গণনা করা তীব্রতার অনুপাতের $\left(\frac{2L_A(M)}{A_{1g}}\right)$ দুটি সেট পাওয়া গেছে: যথাক্রমে প্রায় 2.15 এবং প্রায় 0.56—যা যথাক্রমে WS_2 -এর এককস্তর এবং বহুস্তরের বৃদ্ধির নির্দেশক। ফোটোলুমিনেসেন্স পরিমাপে এককস্তরের জন্য প্রায় 640 nm এবং বহুস্তরের জন্য প্রায় 660 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্যে শিখর (peak) পাওয়া গেছে; এদের মধ্যে প্রথম শিখরটির তীব্রতা দ্বিতীয়টির তুলনায় প্রায় ২০ গুণ বেশি পরিলক্ষিত হয়েছে। এটি নির্দেশ করে যে, এককস্তরের ক্ষেত্রে বিকিরণগতভাবে অধিকতর দক্ষ একটি ‘সরাসরি ব্যান্ডগ্যাপ’ (direct bandgap) বিদ্যমান। CVD পদ্ধতিতে প্রস্তুতকৃত TMD-গুলোর ক্ষেত্রে পৃষ্ঠতলে স্লথ আবরণের (low-surface coverage) যে সহজাত সমস্যাটি থাকে, তা সমাধানের লক্ষ্যে নমুনার বিভিন্ন জ্যামিতিক বিন্যাস বা আকৃতি প্রয়োগ করা হয়েছিল। বৃদ্ধির শর্তাবলিকে (growth parame-

ters) সর্বোত্তম পর্যায়ে বিন্যস্ত করার মাধ্যমে এককস্তরের পাশাপাশি বিভিন্ন আকৃতির বহুস্তরবিশিষ্ট WS_2 ফ্লেকও প্রস্তুত করা সম্ভব হয়েছে; এদের মধ্যে রয়েছে ত্রিকোণাকার পিরামিডীয়, কর্তিত ত্রিকোণাকার, প্রজাপতি-আকৃতির ও ষড়ভুজাকার ফ্লেক, ন্যানোক্লাওয়ার এবং বিভিন্ন মাত্রার 'কোয়াসি-ফ্র্যাক্টাল' আকৃতি। নমুনার জ্যামিতিক বিন্যাস 'B' (যেখানে দুটি বৃদ্ধির সাবস্ট্রেট বা আধার একে অপরের মুখোমুখি হয়ে উপরে স্থাপিত থাকে) এবং 'C' (যা বিন্যাস 'B'-এর অনুরূপ, তবে এতে সিলিকন ওয়েফারের সরু ফালিগুলো স্তম্ভ বা খুঁটি হিসেবে কাজ করে)—এই বিন্যাসগুলোতে সাবস্ট্রেটগুলোর অবস্থানের ফলে সম্ভবত সাবস্ট্রেটের পৃষ্ঠতলে 'প্রিকারসার' বা কাঁচামাল বাষ্পের স্থানীয় ঘনত্ব বৃদ্ধি পেয়েছে; যার ফলস্বরূপ পৃষ্ঠতলে বৃদ্ধির আওতা বা আবরণ উল্লেখযোগ্যভাবে উন্নত হয়েছে। প্রত্যাশা অনুযায়ী, প্রিকারসার বাষ্প প্রবেশের প্রাপ্ত থেকে ভেতরের দিকে অগ্রসর হওয়ার সাথে সাথে পৃষ্ঠতলের আবরণ বৃদ্ধি পেয়েছে; তবে এই পদ্ধতিগুলোতে এককস্তর গঠনের তুলনায় বহুস্তরবিশিষ্ট WS_2 -এর বৃদ্ধিই অধিক প্রাধান্য বিস্তার করেছে। নমুনার জ্যামিতিক বিন্যাস 'C' প্রয়োগ করার মাধ্যমে সাবস্ট্রেটের পৃষ্ঠতলে বাষ্পের ঘনত্বের স্বল্পতা-জনিত সহজাত সমস্যাটির সমাধান করা সম্ভব হয়েছে। এর প্রমাণ হিসেবে দেখা যায় যে, জ্যামিতিক বিন্যাস 'C' ব্যবহারের ফলে পৃষ্ঠতলে বৃদ্ধির আওতা বা আবরণ পূর্বের প্রায় ২৩.৩১% (যা চিরাচরিত তিন-অঞ্চলবিশিষ্ট APCVD পদ্ধতির ফলাফল) থেকে বৃদ্ধি পেয়ে প্রায় ৬২.৮৬%-এ উন্নীত হয়েছে। অবশ্য, এর পরেও পৃষ্ঠতলের সম্পূর্ণ আবরণ বা পূর্ণাঙ্গ আচ্ছাদন অর্জন করা সম্ভব হয়নি।

এই সমস্যাটি সমাধানের লক্ষ্যে একটি দ্বি-ধাপবিশিষ্ট বৃদ্ধি প্রক্রিয়া অবলম্বন করা হয়েছিল: স্পাটারিং (sputtering) পদ্ধতির মাধ্যমে ন্যানো-স্কেলে অতি-পাতলা টাংস্টেন (tungsten) জমা করা এবং কাঙ্ক্ষিত তাপমাত্রায় সালফারাইজেশন (sulfurization) সম্পন্ন করা। ফিল্ড এমিশন স্ক্যানিং ইলেকট্রন মাইক্রোস্কোপি (FESEM) বিশ্লেষণের মাধ্যমে WS_2 -এর বহুস্তরবিশিষ্ট ন্যানোশিটসমূহের বৃদ্ধি পরিলক্ষিত হয়। একটি এনার্জি ডিসপারসিভ এক্স-রে (EDX) সমীক্ষায় W:S-এর পারমাণবিক অনুপাত ১:২-এর অত্যন্ত নিকটবর্তী একটি স্টোইকিওমেট্রি (stoichiometry) উন্মোচিত হয়, যা WS_2 -এর বৃদ্ধিকে নিশ্চিত করে। এক্স-রে ডিফ্রাকশন (XRD) বিশ্লেষণে ষড়ভুজাকার দশাবিশিষ্ট (hexagonal phase) WS_2 ($2H-WS_2$)-এর বৃদ্ধি ধরা পড়ে। সালফারের উৎস হিসেবে ১০০ থেকে ৯০০ মিলিগ্রামের বিভিন্ন মাত্রার সালফার প্রিকারসার (precursors) ব্যবহার করা হয়েছিল, যেখানে অন্যান্য সকল প্যারামিটার অপরিবর্তিত রাখা হয়। বৃদ্ধির স্টোইকিওমেট্রির ওপর সালফারের পরিমাণের প্রভাব নিরূপণের লক্ষ্যে সদ্য প্রস্তুতকৃত নমুনাগুলোকে EDX-এর মাধ্যমে বিশ্লেষণ করা হয়। সালফারাইজেশন পদ্ধতি ব্যবহার করে WS_2 পাতলা ফিল্মের বৃদ্ধির ওপর সালফারের প্রভাবটি বিশদভাবে অধ্যয়ন করা হয়। EDX বিশ্লেষণের প্রাপ্ত S:W অনুপাতের ভিত্তিতে সদ্য প্রস্তুতকৃত পাতলা ফিল্মগুলোকে তিনটি স্টোইকিওমেট্রিক অঞ্চলে শ্রেণীবদ্ধ করা হয়: (a) < 2 , (b) ~ 2 , এবং (c) > 2 ।

সালফারাইজেশন প্রক্রিয়াকে আরও সরল করার জন্য, অ্যালকোহলে দ্রবীভূত WO_3 -এর ড্রপ কাস্টের পর সালফারাইজেশন করা হয়। ড্রপ-কাস্ট পদ্ধতি সাবস্ট্রেটের (SiO_2) উপর WO_3 -এর বন্টন এবং আবরণের উপর নিয়ন্ত্রণ প্রদান করে। অধিকন্তু, ইথানলে দ্রবীভূত ড্রপ-কাস্ট পদ্ধতিটি সহজবোধ্য এবং এটি বিশেষায়িত প্রিকারসার উপাদান বা স্পাটারিং বা ALD-এর মতো অত্যাধুনিক ডিপোজিশন টুলের প্রয়োজনীয়তা দূর করে। এই পদ্ধতিটি বিভিন্ন গ্রোথ সাবস্ট্রেটের সাথে অভিযোজনযোগ্য এবং সামঞ্জস্যপূর্ণ।

বাল্ক WS_2 , যা প্রায় ১.৩৫ ইলেকট্রন-ভোল্ট ব্যান্ডগ্যাপ বিশিষ্ট একটি সেমিকন্ডাক্টর, এর দুর্বল অপটিক্যাল অ্যাবজর্বেন্সের কারণে এর ফটোরেসপন্সিভিটি কম, যা উচ্চ-ক্ষমতাসম্পন্ন ফটোডিটেকশনে এর প্রয়োগকে সীমাবদ্ধ করে। গবেষণায় দেখা গেছে যে WS_2 -তে সিলভারের ডোপিং ($Ag:WS_2$) ফটোইলেকট্রনিক প্রতিক্রিয়া বৃদ্ধি করে। হাই-রেজোলিউশন ট্রান্সমিশন ইলেকট্রন মাইক্রোস্কোপি (HRTEM), FESEM এবং রামান স্পেকট্রোস্কোপি ব্যবহার করে উপাদানটির গঠন, রূপ এবং বিশুদ্ধতা বিশ্লেষণ করা হয়েছিল। HRTEM-এর মাধ্যমে WS_2 -এর শিট-সদৃশ গঠন এবং $Ag:WS_2$ -তে গোলাকার Ag ন্যানোকণার উপস্থিতি প্রকাশ পেয়েছে। অতিবেগুনি-

দৃশ্যমান (UV-Vis) বর্ণালীতে Ag যোগ করার ফলে WS₂-এর শোষণ তিনগুণ বৃদ্ধি পেয়েছে বলে পরিলক্ষিত হয়েছে। এদের আলোক-শনাক্তকরণ ক্ষমতা মূল্যায়নের জন্য বিশুদ্ধ WS₂ (control) এবং Ag:WS₂ (test) ব্যবহার করে পার্শ্বীয় ধাতু-সেমিকন্ডাক্টর-ধাতু (MSM) ফটোডিটেক্টর তৈরি করা হয়েছিল। তীব্র ফোনন বিক্ষেপণ, যা প্রায়শই অভ্যন্তরীণ শূন্যতা ত্রুটির কারণে ঘটে, তা বাহক পরিবহনের কার্যকারিতাকে উল্লেখযোগ্যভাবে বাধাগ্রস্ত করতে পারে, যার ফলে দুর্বল আলোক-শনাক্তকরণ হয়। অন্ধকার অবস্থায় এবং সৌর AM1.5G আলোর সংস্পর্শে এই ডিভাইসগুলির তুলনামূলক বিশ্লেষণে দেখা গেছে যে, একই আলোকিত পরিস্থিতিতে Ag:WS₂ (test) ডিভাইসটি তার বিশুদ্ধ WS₂ (control) প্রতিরূপের তুলনায় প্রায় ৯-গুণ বেশি ফটোকারেন্ট প্রদর্শন করেছে। অধিকন্তু, এই গবেষণাটি ট্রানজিয়েন্ট অ্যাবজর্পশন ব্যবহার করে সিলভার-ডোপড পরীক্ষামূলক ডিভাইসগুলিতে ক্যারিয়ার লাইফটাইমে প্রায় ৬-গুণ বৃদ্ধি প্রদর্শন করে, যা ক্যারিয়ার-ফোনন স্ক্যাটারিং-এর কার্যকর হ্রাসকে নির্দেশ করে।

ਸਾਰ

ਦੋ-ਅਯਾਮੀ ਪਰਿਵਰਤਨ ਧਾਤੂ ਡਾਈਚਲਕੋਜੇਨਾਈਡਜ਼ (2D-TMDs) ਨੇ ਹਾਲ ਹੀ ਵਿੱਚ ਸਮੱਗਰੀ ਵਿਗਿਆਨੀਆਂ ਵਿੱਚ ਇਲੈਕਟ੍ਰਾਨਿਕ ਤੋਂ ਲੈ ਕੇ ਆਪਟੋਇਲੈਕਟ੍ਰਾਨਿਕ ਐਪਲੀਕੇਸ਼ਨਾਂ ਤੱਕ ਫੈਲੀਆਂ ਆਪਣੀਆਂ ਵਿਭਿੰਨ ਵਿਸ਼ੇਸ਼ਤਾਵਾਂ ਦੇ ਕਾਰਨ ਮਹੱਤਵਪੂਰਨ ਦਿਲਚਸਪੀ ਪ੍ਰਾਪਤ ਕੀਤੀ ਹੈ। ਜਿਸ ਖੋਜ ਸਮੱਸਿਆ ਨੂੰ ਅਸੀਂ ਹੱਲ ਕਰਨ ਦਾ ਟੀਚਾ ਰੱਖਦੇ ਹਾਂ ਉਹ ਹੈ ਗ੍ਰਾਫੀਨ ਦਾ ਅੰਦਰੂਨੀ ਜ਼ੀਰੋ ਬੈਂਡਗੈਪ, ਜੋ ਸੈਮੀਕੰਡਕਟਰ ਉਦਯੋਗ ਵਿੱਚ ਇਸਦੀ ਵਿਹਾਰਕ ਵਰਤੋਂ ਨੂੰ ਸੀਮਤ ਕਰਦਾ ਹੈ। ਇਸ ਸਮੱਸਿਆ ਨੇ ਬੈਂਡਗੈਪ ਇੰਜੀਨੀਅਰਿੰਗ ਦੀ ਖੋਜ ਵੱਲ ਅਗਵਾਈ ਕੀਤੀ ਹੈ, ਜੋ ਕਿ ਵਾਅਦਾ ਕਰਨ ਵਾਲੇ ਨਤੀਜੇ ਪੈਦਾ ਕਰਦੇ ਹੋਏ, ਨਿਰਮਾਣ ਪ੍ਰਕਿਰਿਆ ਵਿੱਚ ਲਾਗਤ ਜੋੜਦੀ ਹੈ ਅਤੇ ਵਿਸ਼ੇਸ਼ਤਾਵਾਂ ਨੂੰ ਮਹੱਤਵਪੂਰਨ ਤੌਰ 'ਤੇ ਘਟਾਉਂਦੀ ਹੈ। 2D-TMDs ਦੁਆਰਾ ਪ੍ਰਦਰਸ਼ਿਤ ਵਿਸ਼ੇਸ਼ਤਾਵਾਂ ਦੀ ਵਿਲੱਖਣ ਅਤੇ ਵਿਸ਼ਾਲ ਸ਼੍ਰੇਣੀ, ਸੈਮੀਕੰਡਕਟਰ ਵਿਵਹਾਰ (MoS_2 , WSe_2) ਤੋਂ ਲੈ ਕੇ ਇੰਜ਼ੂਲੇਟਿੰਗ ਵਿਵਹਾਰ (HfS_2) ਤੋਂ ਲੈ ਕੇ ਧਾਤੂ ਵਿਵਹਾਰ (VSe_2 , NbS_2), ਉਹਨਾਂ ਨੂੰ ਇਸ ਸਮੱਸਿਆ ਦਾ ਇੱਕ ਸੰਭਾਵੀ ਹੱਲ ਬਣਾਉਂਦੀ ਹੈ। ਸਾਰੇ TMDs ਵਿੱਚੋਂ, ਮੋਲੀਬਡੇਨਮ ਡਾਈਸਲਫਾਈਡ (MoS_2) ਸਭ ਤੋਂ ਵੱਧ ਅਧਿਐਨ ਕੀਤਾ ਜਾਂਦਾ ਹੈ। MoS_2 , WS_2 ਵਿੱਚ ਗੈਰ-ਜ਼ੀਰੋ ਬੈਂਡਗੈਪ ਨੂੰ ਇੱਕ ਮੋਨੋਲੇਅਰ ਤੱਕ ਘਟਾ ਕੇ ਇੱਕ ਅਸਿੱਧੇ-ਤੋਂ-ਸਿੱਧੇ ਟਿਊਨ ਕੀਤਾ ਜਾ ਸਕਦਾ ਹੈ। ਬਲਕ MoS_2 ਵਿੱਚ ~ 1.2 eV ਦਾ ਇੱਕ ਅਸਿੱਧਾ ਬੈਂਡਗੈਪ ਹੈ, ਜੋ ਕਿ ਮੋਨੋਲੇਅਰ MoS_2 ਲਈ ~ 1.8 eV ਦੇ ਸਿੱਧੇ ਬੈਂਡਗੈਪ ਨਾਲ ਟਿਊਨ ਕੀਤਾ ਜਾਂਦਾ ਹੈ। ਇਸੇ ਤਰ੍ਹਾਂ, WS_2 ਵਿੱਚ, ਬੈਂਡ ਗੈਪ ਨੂੰ ~ 1.3 eV ਅਸਿੱਧੇ-ਤੋਂ-ਸਿੱਧੇ ~ 2.1 eV ਸਿੱਧੇ ਬੈਂਡਗੈਪ ਸੈਮੀਕੰਡਕਟਰ ਤੋਂ ਪਰਤਾਂ ਦੀ ਗਿਣਤੀ ਨੂੰ ਸਿੰਗਲ ਤੱਕ ਘਟਾ ਕੇ ਵੀ ਟਿਊਨ ਕੀਤਾ ਜਾ ਸਕਦਾ ਹੈ। ਟਿਊਨੇਬਲ ਬੈਂਡਗੈਪ ਉਹਨਾਂ ਨੂੰ ਮੈਮਰੀਸਟਰ, ਟਰਾਂਜਿਸਟਰ, ਫੋਟੋਡਿਟੈਕਟਰ, ਪਾਈਜ਼ੋਇਲੈਕਟ੍ਰਿਕ ਡਿਵਾਈਸਾਂ ਆਦਿ ਬਣਾਉਣ ਲਈ ਉਪਯੋਗੀ ਬਣਾਉਂਦੇ ਹਨ। ਇਸ ਖੇਤਰ ਵਿੱਚ ਕਾਫ਼ੀ ਕੰਮ ਕੀਤਾ ਗਿਆ ਹੈ, ਪਰ ਉੱਚ ਕ੍ਰਿਸਟਲਿਨ ਵੱਡੇ ਡੋਮੇਨ-ਆਕਾਰ ਦੇ ਮੋਨੋਲੇਅਰ WS_2 ਨੂੰ ਵਧਣਾ ਇੱਕ ਵੱਡੀ ਚੁਣੌਤੀ ਬਣਿਆ ਹੋਇਆ ਹੈ, ਜੋ ਕਿ ਖੇਤਰ ਵਿੱਚ ਹੋਰ ਖੋਜ ਅਤੇ ਨਵੀਨਤਾ ਦੀ ਜ਼ਰੂਰਤ ਨੂੰ ਦਰਸਾਉਂਦਾ ਹੈ।

ਇੱਕ SiO_2 ਸਬਸਟਰੇਟ 'ਤੇ WS_2 ਨੂੰ ਵਧਾਉਣ ਲਈ ਇੱਕ ਵਾਯੂਮੰਡਲ ਦਬਾਅ ਰਸਾਇਣਕ ਭਾਫ਼ ਜਮ੍ਹਾਂ (APCVD) ਦੀ ਵਰਤੋਂ ਕੀਤੀ ਗਈ ਸੀ। ਫੀਲਡ ਐਮੀਸ਼ਨ ਸਕੈਨਿੰਗ ਇਲੈਕਟ੍ਰੋਨ ਮਾਈਕ੍ਰੋਸਕੋਪੀ ਸਕੈਨ ਨੇ WS_2 ਦੇ ਵੱਖ-ਵੱਖ ਰੂਪ ਵਿਗਿਆਨਾਂ ਦੇ ਵਾਧੇ ਦਾ ਖੁਲਾਸਾ ਕੀਤਾ। ਤਿਕੋਣੀ ਫਲੇਕਸ ਵਿੱਚ, ~ 110 μm (ਮਲਟੀਲੇਅਰ ਲਈ) ਅਤੇ ~ 60 μm (ਮੋਨੋਲੇਅਰ ਲਈ) ਦੀ ਵੱਧ ਤੋਂ ਵੱਧ ਕਿਨਾਰੇ ਦੀ ਲੰਬਾਈ ਆਪਟੀਕਲੀ ਦੇਖੀ ਗਈ। ਊਰਜਾ ਫੈਲਾਉਣ ਵਾਲੇ ਐਕਸ-ਰੇ ਵਿਸ਼ਲੇਸ਼ਣ ਨੇ ਟੰਗਸਟਨ-ਤੋਂ-ਸਲਫਰ ਅਨੁਪਾਤ ਲਈ 1:2 ਦੇ ਨੇੜੇ W:S ਅਨੁਪਾਤ ਦਾ ਖੁਲਾਸਾ ਕੀਤਾ। ਰਮਨ ਸਪੈਕਟਰਾ ਤੋਂ ਗਿਣਿਆ ਗਿਆ ਤੀਬਰਤਾ ਅਨੁਪਾਤ $\left(\frac{2LA(M)}{A_{1g}}\right)$ ਦੇ ਦੋ ਸੈੱਟ ਮਿਲੇ: ~ 2.15 ਅਤੇ ~ 0.56 , ਕ੍ਰਮਵਾਰ ਮੋਨੋਲੇਅਰ ਅਤੇ WS_2 ਦੇ ਬਹੁ-ਪਰਤੀ ਵਿਕਾਸ ਦੇ ਅਨੁਸਾਰ। ਫੋਟੋਲੂਮਿਨੈਂਸ ਮਾਪ ~ 640 nm (ਮੋਨੋਲੇਅਰ ਲਈ) ਅਤੇ ~ 660 nm (ਬਹੁ-ਪਰਤੀ ਲਈ) 'ਤੇ ਸਿਖਰ ਪ੍ਰਾਪਤ ਕਰਦੇ ਹਨ, ਜਿਸ ਵਿੱਚ ਪਹਿਲਾ ਸਿਖਰ ਬਾਅਦ ਵਾਲੇ ਨਾਲੋਂ ~ 20 -ਗੁਣਾ ਵਾਧਾ ਪ੍ਰਦਰਸ਼ਿਤ ਕਰਦਾ ਹੈ, ਜੋ ਕਿ ਰੇਡੀਏਟਿਵ ਤੌਰ 'ਤੇ ਵਧੇਰੇ ਕੁਸ਼ਲ ਸਿੱਧਾ ਬੈਂਡਗੈਪ ਦਾ ਸੁਝਾਅ ਦਿੰਦਾ ਹੈ। CVD-ਉਗਾਏ TMDs ਲਈ ਘੱਟ-ਸਤਹ ਕਵਰੇਜ ਦੀ ਅੰਦਰੂਨੀ ਸਮੱਸਿਆ ਨੂੰ ਹੱਲ ਕਰਨ ਲਈ ਵੱਖ-ਵੱਖ ਨਮੂਨਾ ਜਿਓਮੈਟਰੀ ਲਗਾਏ ਗਏ ਸਨ। ਮੋਨੋਲੇਅਰ ਦੇ ਨਾਲ, ਵੱਖ-ਵੱਖ ਆਕਾਰਾਂ ਦੇ ਮਲਟੀਲੇਅਰ WS_2 ਫਲੇਕਸ: ਤਿਕੋਣੀ ਪਿਰਾਮਿਡਲ, ਕੱਟੇ ਹੋਏ ਤਿਕੋਣੀ, ਤਿਤਲੀ ਦੇ ਆਕਾਰ ਦੇ, ਅਤੇ ਛੇ-ਭੁਜ ਫਲੇਕਸ, ਨੈਨੋਫੁੱਲ ਅਤੇ ਨਾਲ ਹੀ ਵੱਖ-ਵੱਖ ਮਾਪਾਂ ਦੇ ਅਰਧ-ਫ੍ਰੈਕਟਲ ਆਕਾਰ, ਨੂੰ ਵੀ ਵਿਕਾਸ ਮਾਪਦੰਡਾਂ ਨੂੰ ਅਨੁਕੂਲ ਬਣਾ ਕੇ ਉਗਾਇਆ ਗਿਆ ਸੀ। ਨਮੂਨਾ ਜਿਓਮੈਟਰੀ B (ਉੱਪਰ ਰੱਖੇ ਗਏ ਦੋ ਵਿਕਾਸ ਸਬਸਟਰੇਟ, ਇੱਕ ਦੂਜੇ ਦੇ ਸਾਹਮਣੇ) ਅਤੇ C (B ਦੇ ਸਮਾਨ ਪਰ ਸਿਲੀਕਾਨ ਵੇਫਰ ਦੀਆਂ ਪਤਲੀਆਂ ਪੱਟੀਆਂ ਦੇ ਨਾਲ ਥੰਮ੍ਹਾਂ ਵਜੋਂ ਕੰਮ ਕਰਦੇ ਹੋਏ) ਵਿੱਚ ਸਬਸਟਰੇਟਾਂ ਦੀ ਵਿਵਸਥਾ ਨੇ ਸੰਭਾਵਤ ਤੌਰ 'ਤੇ ਸਬਸਟਰੇਟ ਸਤਹ 'ਤੇ ਸਥਾਨਕ ਪੂਰਵਗਾਮੀ ਗਾੜ੍ਹਾਪਣ ਨੂੰ ਵਧਾਇਆ, ਜਿਸ ਨਾਲ ਵਿਕਾਸ ਖੇਤਰ ਕਵਰੇਜ ਵਿੱਚ ਸੁਧਾਰ ਹੋਇਆ। ਜਿਵੇਂ ਕਿ ਉਮੀਦ ਕੀਤੀ ਗਈ ਸੀ, ਪੂਰਵਗਾਮੀ ਭਾਫ਼ ਪ੍ਰਵੇਸ਼ ਕਿਨਾਰੇ ਤੋਂ ਅੰਦਰ ਵੱਲ ਵਧਣ ਨਾਲ ਸਤਹ ਕਵਰੇਜ ਵਧ ਗਈ; ਹਾਲਾਂਕਿ, ਇਹਨਾਂ ਪਹੁੰਚਾਂ ਵਿੱਚ ਮੋਨੋਲੇਅਰ ਗਠਨ ਉੱਤੇ ਮਲਟੀਲੇਅਰ WS_2 ਵਿਕਾਸ ਪ੍ਰਮੁੱਖ ਸੀ। ਨਮੂਨਾ ਜਿਓਮੈਟਰੀ C ਨੂੰ ਲਾਗੂ ਕਰਕੇ, ਸਬਸਟਰੇਟ ਸਤਹ 'ਤੇ ਘੱਟ ਭਾਫ਼ ਗਾੜ੍ਹਾਪਣ ਦੇ ਅੰਦਰੂਨੀ ਮੁੱਦੇ ਨੂੰ ਸੰਬੋਧਿਤ ਕੀਤਾ ਗਿਆ ਸੀ, ਜਿਵੇਂ ਕਿ ਨਮੂਨਾ ਜਿਓਮੈਟਰੀ C ਨੂੰ ਰੁਜ਼ਗਾਰ ਦੇ ਕੇ $\sim 23.31\%$ (ਕਲਾਸੀਕਲ ਤਿੰਨ-ਖੇਤਰ APCVD ਪਹੁੰਚ) ਤੋਂ $\sim 62.86\%$ ਵਾਧੇ ਤੱਕ ਸੁਧਾਰੀ ਹੋਈ ਸਤਹ ਕਵਰੇਜ ਤੋਂ ਸਪੱਸ਼ਟ ਹੈ। ਹਾਲਾਂਕਿ, ਪੂਰੀ ਸਤਹ ਕਵਰੇਜ ਪ੍ਰਾਪਤ ਨਹੀਂ ਕੀਤੀ ਗਈ ਸੀ।

ਇਸ ਮੁੱਦੇ ਨੂੰ ਹੱਲ ਕਰਨ ਲਈ ਦੋ-ਪੜਾਅ ਦਾ ਵਾਧਾ ਲਾਗੂ ਕੀਤਾ ਗਿਆ ਸੀ: ਸਪਟਰਿੰਗ ਪਹੁੰਚ ਦੀ ਵਰਤੋਂ ਕਰਦੇ ਹੋਏ ਨੈਨੋਸਕੇਲ ਪਤਲੇ ਟੰਗਸਟਨ ਦਾ ਜਮ੍ਹਾਕਰਨ ਅਤੇ ਲੋੜੀਂਦੇ ਤਾਪਮਾਨ 'ਤੇ ਸਲਫਰਾਈਜ਼ੇਸ਼ਨ। ਫੀਲਡ ਐਮੀਸ਼ਨ ਸਕੈਨਿੰਗ ਇਲੈਕਟ੍ਰੋਨ ਮਾਈਕ੍ਰੋਸਕੋਪੀ (FESEM) ਵਿਸ਼ਲੇਸ਼ਣ ਵਿੱਚ WS_2 ਦੀਆਂ ਮਲਟੀਲੇਅਰ ਨੈਨੋਸ਼ੀਟਾਂ ਦਾ ਵਾਧਾ ਦੇਖਿਆ ਗਿਆ।

ਇੱਕ ਉਰਜਾ ਫੈਲਾਉਣ ਵਾਲੇ ਐਕਸ-ਰੇ (EDX) ਅਧਿਐਨ ਨੇ W:S ਲਈ 1:2 ਪਰਮਾਣੂ ਅਨੁਪਾਤ ਦੇ ਨੇੜੇ ਇੱਕ ਸਟੋਈਚਿਓਮੈਟਰੀ ਦਾ ਖੁਲਾਸਾ ਕੀਤਾ, ਜੋ WS_2 ਦੇ ਵਾਧੇ ਦੀ ਪੁਸ਼ਟੀ ਕਰਦਾ ਹੈ। ਐਕਸ-ਰੇ ਵਿਭਿੰਨਤਾ (XRD) ਵਿਸ਼ਲੇਸ਼ਣ ਨੇ ਹੈਕਸਾਗੋਨਲ ਪੜਾਅਵਾਰ WS_2 ($2H-WS_2$) ਦੇ ਵਾਧੇ ਦਾ ਖੁਲਾਸਾ ਕੀਤਾ। 100-900 ਮਿਲੀਗ੍ਰਾਮ ਤੱਕ ਦੇ ਵੱਖ-ਵੱਖ ਸਲਫਰ ਪੁਰਵਗਾਮੀਆਂ ਨੂੰ ਸਲਫਰ ਦੇ ਸਰੋਤ ਵਜੋਂ ਵਰਤਿਆ ਗਿਆ ਸੀ, ਬਾਕੀ ਸਾਰੇ ਮਾਪਦੰਡਾਂ ਨੂੰ ਬਦਲਿਆ ਨਹੀਂ ਰੱਖਿਆ ਗਿਆ ਸੀ। EDX ਨੇ ਵਿਕਾਸ ਸਟੋਈਚਿਓਮੈਟਰੀ 'ਤੇ ਸਲਫਰ ਦੀ ਮਾਤਰਾ ਦੇ ਪ੍ਰਭਾਵ ਨੂੰ ਦਰਸਾਉਣ ਲਈ ਵਧੇ ਹੋਏ ਨਮੂਨਿਆਂ ਦਾ ਵਿਸ਼ਲੇਸ਼ਣ ਕੀਤਾ। ਸਲਫਰਾਈਜ਼ੇਸ਼ਨ ਦੀ ਵਰਤੋਂ ਕਰਦੇ ਹੋਏ WS_2 ਪਤਲੀ ਫਿਲਮ ਦੇ ਵਾਧੇ 'ਤੇ ਸਲਫਰ ਦੇ ਪ੍ਰਭਾਵ ਦਾ ਅਧਿਐਨ ਕੀਤਾ ਗਿਆ। EDX ਵਿਸ਼ਲੇਸ਼ਣ ਤੋਂ S:W ਅਨੁਪਾਤ ਦੇ ਆਧਾਰ 'ਤੇ ਵਧੀਆਂ ਪਤਲੀਆਂ ਫਿਲਮਾਂ ਨੂੰ ਤਿੰਨ ਸਟੋਈਚਿਓਮੈਟ੍ਰਿਕ ਖੇਤਰਾਂ ਵਿੱਚ ਸ਼੍ਰੇਣੀਬੱਧ ਕੀਤਾ ਗਿਆ ਸੀ: (a) < 2 , (b) ~ 2 , ਅਤੇ (c) > 2 ।

ਸਲਫਰਾਈਜ਼ੇਸ਼ਨ ਪ੍ਰਕਿਰਿਆ ਨੂੰ ਹੋਰ ਸਰਲ ਬਣਾਉਣ ਲਈ, ਅਲਕੋਹਲ-ਖਿੰਡੇ ਹੋਏ WO_3 ਦੀ ਇੱਕ ਬੂੰਦ ਕਾਸਟ ਤੋਂ ਬਾਅਦ ਸਲਫਰਾਈਜ਼ੇਸ਼ਨ ਕੀਤਾ ਜਾਂਦਾ ਹੈ। ਡ੍ਰੌਪ-ਕਾਸਟ ਸਬਸਟਰੇਟ (SiO_2) 'ਤੇ WO_3 ਦੀ ਵੰਡ ਅਤੇ ਕਵਰੇਜ 'ਤੇ ਨਿਯੰਤਰਣ ਪ੍ਰਦਾਨ ਕਰਦਾ ਹੈ। ਇਸ ਤੋਂ ਇਲਾਵਾ, ਈਥਾਨੋਲ-ਖਿੰਡੇ ਹੋਏ ਡ੍ਰੌਪ-ਕਾਸਟ ਵਿਧੀ ਸਿੱਧੀ ਹੈ ਅਤੇ ਵਿਸ਼ੇਸ਼ ਪੁਰਵਗਾਮੀ ਸਮੱਗਰੀਆਂ ਜਾਂ ਸਪਟਰਿੰਗ ਜਾਂ ALD ਵਰਗੇ ਸੂਝਵਾਨ ਜ਼ਮੂਜ਼ੇ ਕਰਨ ਵਾਲੇ ਸਾਧਨਾਂ ਦੀ ਜ਼ਰੂਰਤ ਨੂੰ ਖਤਮ ਕਰਦੀ ਹੈ। ਇਹ ਪਹੁੰਚ ਵੱਖ-ਵੱਖ ਵਿਕਾਸ ਸਬਸਟਰੇਟਾਂ ਦੇ ਨਾਲ ਅਨੁਕੂਲ ਅਤੇ ਅਨੁਕੂਲ ਹੈ।

ਬਲਕ WS_2 , ~ 1.35 eV ਦੇ ਬੈਂਡਗੈਪ ਵਾਲਾ ਇੱਕ ਸੈਮੀਕੰਡਕਟਰ, ਵਿੱਚ ਮਾੜੀ ਆਪਟੀਕਲ ਸੋਖਣ ਦੇ ਕਾਰਨ ਘੱਟ ਫੋਟੋਰਿਸਪਾਂਸਿਵਿਟੀ ਹੈ, ਜੋ ਉੱਚ-ਪ੍ਰਦਰਸ਼ਨ ਫੋਟੋਡਿਟੈਕਸ਼ਨ ਵਿੱਚ ਇਸਦੀ ਵਰਤੋਂ ਨੂੰ ਸੀਮਤ ਕਰਦਾ ਹੈ। ਅਧਿਐਨ ਨੇ ਦੇਖਿਆ ਕਿ WS_2 ($Ag:WS_2$) ਵਿੱਚ ਚਾਂਦੀ ਦੀ ਡੋਪਿੰਗ ਨੇ ਫੋਟੋਇਲੈਕਟ੍ਰਾਨਿਕ ਪ੍ਰਤੀਕਿਰਿਆ ਨੂੰ ਵਧਾਇਆ। ਸਮੱਗਰੀ ਦੀ ਬਣਤਰ, ਰੂਪ ਵਿਗਿਆਨ ਅਤੇ ਸੁੱਧਤਾ ਦਾ ਵਿਸ਼ਲੇਸ਼ਣ ਉੱਚ-ਰੈਜ਼ੋਲਿਊਸ਼ਨ ਟ੍ਰਾਂਸਮਿਸ਼ਨ ਇਲੈਕਟ੍ਰੋਨ ਮਾਈਕ੍ਰੋਸਕੋਪੀ (HRTEM), FESEM, ਅਤੇ ਰਮਨ ਸਪੈਕਟ੍ਰੋਸਕੋਪੀ ਦੀ ਵਰਤੋਂ ਕਰਕੇ ਕੀਤਾ ਗਿਆ ਸੀ। HRTEM ਨੇ WS_2 ਦੀ ਸ਼ੀਟ-ਵਰਗੀ ਰੂਪ ਵਿਗਿਆਨ ਅਤੇ $Ag:WS_2$ ਵਿੱਚ ਗੋਲਾਕਾਰ Ag ਨੈਨੋਪਾਰਟਿਕਲ ਦੀ ਮੌਜੂਦਗੀ ਦਾ ਖੁਲਾਸਾ ਕੀਤਾ। Ag ਨੂੰ ਪੇਸ਼ ਕਰਨ 'ਤੇ WS_2 ਦੇ ਸੋਖਣ ਵਿੱਚ ਤਿੰਨ ਗੁਣਾ ਵਾਧਾ ਅਲਟਰਾਵਾਇਲਟ-ਵਿਜ਼ੀਬਲ (UV-Vis) ਸਪੈਕਟਰਾ ਵਿੱਚ ਦੇਖਿਆ ਗਿਆ। ਲੇਟਰਲ ਮੈਟਲ-ਸੈਮੀਕੰਡਕਟਰ-ਮੈਟਲ (MSM) ਫੋਟੋਡਿਟੈਕਟਰਾਂ ਨੂੰ ਉਨ੍ਹਾਂ ਦੀ ਫੋਟੋਡਿਟੈਕਸ਼ਨ ਸਮਰੱਥਾਵਾਂ ਦਾ ਮੁਲਾਂਕਣ ਕਰਨ ਲਈ ਪ੍ਰਿਸਟਾਈਨ WS_2 (ਨਿਯੰਤਰਣ) ਅਤੇ $Ag:WS_2$ (ਟੈਸਟ) ਦੀ ਵਰਤੋਂ ਕਰਕੇ ਬਣਾਇਆ ਗਿਆ ਸੀ। ਮਜ਼ਬੂਤ ਫੋਨੋਨ ਸਕੈਟਰਿੰਗ, ਅਕਸਰ ਅੰਦਰੂਨੀ ਖਾਲੀ ਥਾਂ ਦੇ ਨੁਕਸਾਂ ਦੁਆਰਾ ਪ੍ਰੇਰਿਤ, ਕੈਰੀਅਰ ਟ੍ਰਾਂਸਪੋਰਟ ਦੇ ਪ੍ਰਦਰਸ਼ਨ ਨੂੰ ਮਹੱਤਵਪੂਰਨ ਤੌਰ 'ਤੇ ਰੋਕ ਸਕਦੀ ਹੈ, ਜਿਸਦੇ ਨਤੀਜੇ ਵਜੋਂ ਮਾੜੀ ਫੋਟੋਡਿਟੈਕਸ਼ਨ ਹੁੰਦੀ ਹੈ। ਹਨੇਰੇ ਦੀਆਂ ਸਥਿਤੀਆਂ ਵਿੱਚ ਇਹਨਾਂ ਡਿਵਾਈਸਾਂ ਦੇ ਤੁਲਨਾਤਮਕ ਵਿਸ਼ਲੇਸ਼ਣ ਅਤੇ ਸੂਰਜੀ AM1.5G ਰੋਸ਼ਨੀ ਦੇ ਸੰਪਰਕ ਤੋਂ ਪਤਾ ਚੱਲਿਆ ਕਿ $Ag:WS_2$ (ਟੈਸਟ) ਡਿਵਾਈਸ ਨੇ ਉਸੇ ਪ੍ਰਕਾਸ਼ਮਾਨ ਸਥਿਤੀਆਂ ਵਿੱਚ ਇਸਦੇ ਪ੍ਰਿਸਟਾਈਨ WS_2 (ਨਿਯੰਤਰਣ) ਹਮਰੁਤਬਾ ਦੇ ਮੁਕਾਬਲੇ ਫੋਟੋਕਰੰਟ ਵਿੱਚ ~ 9 -ਗੁਣਾ ਵਾਧਾ ਪ੍ਰਦਰਸ਼ਿਤ ਕੀਤਾ। ਇਸ ਤੋਂ ਇਲਾਵਾ, ਇਹ ਅਧਿਐਨ ਅਸਥਾਈ ਸਮਾਈ ਦੀ ਵਰਤੋਂ ਕਰਦੇ ਹੋਏ ਸਿਲਵਰ-ਡੋਪਡ ਟੈਸਟ ਡਿਵਾਈਸਾਂ ਵਿੱਚ ਕੈਰੀਅਰ ਲਾਈਫਟਾਈਮ ਵਿੱਚ ~ 6 -ਗੁਣਾ ਵਾਧਾ ਦਰਸਾਉਂਦਾ ਹੈ, ਜੋ ਕਿ ਕੈਰੀਅਰ-ਫੋਨੋਨ ਸਕੈਟਰਿੰਗ ਵਿੱਚ ਇੱਕ ਪ੍ਰਭਾਵਸ਼ਾਲੀ ਕਮੀ ਨੂੰ ਦਰਸਾਉਂਦਾ ਹੈ।

Contents

Certificate	iii
1 Introduction	1
1.1 Overview	1
1.2 Market	3
1.3 Literature survey	5
1.3.1 Molybdenum disulfide (MoS_2)	5
1.3.2 Tungsten disulfide WS_2	6
1.4 Thesis Organization	12
2 Methods and protocols	13
2.1 Characterization techniques	13
2.1.1 X-ray diffraction (XRD)	13
2.1.2 Raman	13
2.1.3 Atomic force microscopy (AFM)	13
2.1.4 Optical microscope	14
2.1.5 Field emission scanning electron microscopy (FESEM)	14
2.1.6 Photoemission spectroscopy (XPS)	14
2.1.7 UV-Visible (UV-Vis) spectroscopy	14
2.1.8 Transient absorption spectroscopy	14
2.1.9 High-resolution transmission electron microscopy (HRTEM)	14
2.2 Electrical characterization	14
2.2.1 Solar simulator	14
2.3 Chemical vapor deposition (CVD) system	15
2.3.1 Design of reactor	15
2.4 Growth	15
2.4.1 APCVD growth of WS_2	15
2.4.2 CVD growth of MoS_2	18
2.4.3 Materials	18
2.4.4 APCVD growth recipe for MoS_2	18
2.4.5 Sulfurization growth of WS_2	19
2.4.6 Sulfurization growth of alcohol-dispersed WO_3 -drop cast WS_2	20
2.5 Device fabrication	21
2.5.1 Design of mask	21
2.5.2 Fabrication of electrode	21
2.5.3 Fabrication of WS_2 and Ag-doped WS_2 photodetector	23
2.5.4 Fabrication of upconversion photodetector	23
3 APCVD growth of WS_2	25
3.1 Overview	25
3.2 Results	25
3.3 Discussion	29
3.4 Summary	34

3.4.1	Custom APCVD system	34
3.4.2	Large edge-length crystals	34
3.4.3	Raman characterization	34
3.4.4	Photoluminescence (PL) characterization	34
3.4.5	Material composition	36
3.4.6	Growth of diverse morphologies	36
3.4.7	Improved surface coverage	36
4	Impact of sulfur abundance on the growth of tungsten disulfide thin film using sulfurization of nanoscale tungsten films	39
4.1	Overview	39
4.2	Results	39
4.3	Discussion	42
4.3.1	High growth surface coverage	42
4.3.2	Control of growth stoichiometry	53
4.3.3	Problem with direct WS ₂ sputter and post-deposition processes	53
4.3.4	Advantages of a chlorine-free growth approach	53
4.3.5	Environmental and safety considerations	53
4.3.6	Comparison with wet chemical and exfoliation techniques	53
4.4	Summary	54
5	Growth and characterization of tungsten disulfide thin films via sulfurization of alcohol-dispersed WO₃	55
5.1	Overview	55
5.2	Results	55
5.3	Discussion	58
5.4	Summary	61
6	Reduced carrier-phonon scattering and enhanced absorption in silver-doped transition metal dichalcogenide photodetectors	63
6.1	Overview	63
6.2	Results	63
6.3	Discussion	69
6.4	Summary	76
7	Conclusion	77
7.1	Concluding Thoughts	77
7.2	Future Scope	78
8	Additional work	79
8.1	Zinc-induced improvement in photocurrent generation for upconversion materials	79
8.1.1	Overview	79
8.1.2	Introduction	80
8.1.3	Results and discussion	80
8.1.4	Summary	81
8.2	Solar cell	86
8.2.1	Fabrication of solar cell	86
8.2.2	Design of measurement setup prototype	86
8.3	Installation, testing and development of MoS ₂ growth recipe	86
8.3.1	Chemical vapor deposition (CVD) system	87
8.3.2	Atmospheric pressure growth	89
8.3.3	Low-pressure growth	91
8.4	Image analysis	92
9	Coursework	95

10 Research Output	97
10.1 Journal Articles	97
10.2 Conferences	97
10.3 Patents	98
11 Biography	99

List of Figures

1.1	Schematic representation of MoS ₂ (Mo- black, S-yellow) layered structure by ball and stick model where two S-atom sandwiched the Mo-atom. In MoS ₂ , inter-layers are weakly bounded by VdW forces while intra-layers are strongly bonded by covalent bonds. Reprinted with permission from Ref.[21], Copyright ©Macmillan Pub Ltd: Nature (2011).	2
1.2	Graphical representation of all possible 2D layered TMDs [4].	2
1.3	Application of TMDs in electronic, photonic, green energy, bio-sensors, gas sensors, and piezoelectric devices. Reprinted with permission from Ref.[37], Copyright ©Elsevier Ltd: Materials Today (2017) under a Creative Commons Attribution 4.0	3
1.4	Graph depicting the annual publication and citation count on 2D materials over the last decade. Reprinted with permission from Ref.[49], Copyright ©John Wiley and Sons: Advanced Sensor Research (2023) under a Creative Commons Attribution 4.0.	4
1.5	Graph depicting the annual publication count on 2D materials in photocatalytic CO ₂ reduction. Reprinted with permission from Ref.[52], Copyright ©Royal Soc. chem.: J. Mater. Chem. A (2020).	4
1.6	(a) Numbers of 2D materials as antimicrobial agents associated publications; (b) percentages of 2D materials used in antimicrobial agent preparation. Reprinted with permission from Ref.[51], Copyright ©Springer Nature: J. Mater. Sci. (2020).	5
1.7	Shape evolution of monolayer MoS ₂ with varying amount of Mo:S ratios. Reprinted with permission from Ref.[67], Copyright ©The Amer. Chem. Soc.: Chem. Mater. (2014).	6
1.8	Schematic illustrated the reactant's mass ratios and the domain shape of the as-grown MoS ₂ relationship. Two types of MoS ₂ terminations, Mo-zz and S-zz, are shown. The right-end schematic diagram is the final domain shape. Reprinted with permission from Ref.[67], Copyright ©The Amer. Chem. Soc.: Chem. Mater. (2014).	7
1.9	diagram schematically illustrates the shape evolution and shape consistency in CVD grown monolayer MoS ₂ at different temperatures: 720, 740, 760, and 780 °C. Reprinted with permission from Ref.[72], Copyright IOP Publishing: Applied Physics Express (2017).	8
1.10	The evolution of shape and domain size of MoS ₂ on SiO ₂ substrate in an oxygen environment. Optical images of as-grown MoS ₂ (a) without O ₂ flow. Moreover, (d-e) with 0.2, 0.5, 1, and 2 sccm O ₂ flow for 10 minutes, respectively. Fig. (fj) AFM topological morphologies of the corresponding samples. Fig. (h) shows an extracted height profile of thickness 0.8 nm corresponds to ML-MoS ₂ . Reprinted with permission from Ref.[73], Copyright ©The American Chemical Society: J Amer. Chem. Soc.(2015).	8
1.11	Optical images of as-synthesized WS ₂ at various temperatures (a-d) 750, 850, 900, and 950 °C, respectively, with 50 SCCM forming gas (3% H ₂) flow. Inset: Raman spectrum for multilayer WS ₂ at the boundary of the trapped pre-growth site. Clean triangular flakes of ML-WS ₂ were obtained in the temperature range 850-900 °C. Reprinted with permission from Ref.[90], Copyright ©RSC Adv. (2015).	9
1.12	SEM images of (a-c) as-grown WS ₂ formed when both precursors reached an elevated temperature at the same time (0 minutes), (d-f) as-grown WS ₂ when S was introduced at 20 minutes before WO ₃ reached elevated temperature. (g) Schematic representation of the substrate placement configuration: placed upside down just above the WO ₃ powder; kept at a gap of 10 cm from WO ₃ precursor. (h) SEM image shows only a few as-grown flakes at the edge of the substrate placed upside down. Reprinted with permission from Ref.[91], Copyright ©RSC (2014).	9

1.13	SEM images of the synthesized WS_2 by APCVD approach with growth temperature (a-e) 750, 800, 850, 880, 900, and 950 °C respectively. Reprinted with permission from Ref.[93] with Creative Common license, Copyright ©Springer(2017).	10
2.1	A standard temperature and carrier gas flowrate profile for APCVD growth of WS_2	17
2.2	CVD growth geometry. Distances between sulfur to WO_3 and WO_3 to the substrate are represented by d_1 (15-30 cm) and d_2 (5-15 cm).	17
2.3	Configuration for MoS_2 CVD growth.	19
2.4	A standard temperature and carrier gas flowrate profile for sulfurization growth of WS_2	20
2.5	Schematic representation of the standard sulfurization approach for sputter-deposited tungsten thin film. Distances between sulfur to WO_3 and sputter-deposited tungsten thin film on the substrate is represented by d_1	21
2.6	FESEM image of (a) fabricated interdigitated electrodes used for the photodetector, showing Ti/Au fingers with a width of 10 μm and an inter-finger spacing of 20 μm patterned on a Si/SiO ₂ substrate, and (b) fabricated Ag-doped WS_2 photodetector	22
2.7	Process flow diagram for the fabrication of WS_2 and Ag-doped WS_2 photodetectors.	23
3.1	Optical images of the APCVD grown WS_2 on the Si/SiO ₂ substrate. In all cases, precursor flow is upwards, from the bottom of each image to its top. (a) Triangular flakes of as-grown WS_2 (using sample geometry A); the largest edge-length of $\sim 110 \mu m$ was observed. (b) Flakes, star-shaped, spiral, and pyramidal-structured WS_2 (using sample geometry B). (c) Variation of the edge length of grown WS_2 with the flow. (d) Multilayer WS_2 growth at the center of the sample. Samples corresponding to (c) and (d) were grown using sample geometry C. Raman spectra were measured (for geometries B and C) for all growths, and none of the analyses yielded peaks other than WS_2 and the SiO ₂ substrate, confirming thereby that no WO_3 was incorporated in WS_2 (Fig. (3.5))	26
3.2	FESEM scans for WS_2 growths in sample geometry A: (a) WS_2 flakes, (b) quasi-fractal triangular flake growth, (c) multilayer, (d) pyramidal multilayer, (e) nanoflower, and (f) dendritic.	28
3.3	Raman spectra of as-grown (a) monolayer, and (b) multilayer WS_2 flakes.	30
3.4	Raman spectra were measured at two different points on the flake. The peak at $\sim 520/cm$ corresponds to the substrate.	31
3.5	Raman spectra of as-grown WS_2 using substrate geometries B and C. Exemplar Raman measurement points in illustrative optical images are marked in white. The extra peak at 520/cm for green regions corresponds to the substrate, as the grown layer is thinner.	31
3.6	(a) PL spectra of as-grown WS_2 . (b) Deconvoluted PL spectra of as-grown WS_2 . It is deconvoluted into A-exciton (A^0), negatively charged exciton (A^-) and defect-bound exciton (X^D).	32
3.7	FESEM scan image defining locations for EDX measurements, and EDX elemental composition analysis summary, inferred from energy dispersive spectra.	33
3.8	Surface area coverage calculation for the as-grown WS_2 on the Si/SiO ₂ substrate using OpenCV. (a) Input optical image, (b) processed grayscale image, (c) processed blurred image, (d) processed threshold image, (e) final inverted image.	37
3.9	Surface area coverage calculation for the as-grown WS_2 on the Si/SiO ₂ substrate using OpenCV from a given FESEM image. (a) Input FESEM image, (b) processed grayscale image, (c) processed blurred image, (d) processed threshold image, and (e) final inverted image.	38
4.1	FESEM data for the as-grown sulfurized samples with various amounts of sulfur precursor. Color-coded boxes indicate the ranges of sulfur compositions as defined under Methods.	41
4.2	EDX elemental composition analysis of the as-grown samples. The uncertainty (ΔX) in the ratio was determined using standard error propagation for ratios. Color-coded background colors indicate the ranges of sulfur compositions as defined under Experimental.	42
4.3	(a) Thin film mode XRD data for the samples. Color-coded traces indicate the ranges of sulfur compositions as defined under Methods. (b) Peak intensity to FWHM ratio of the selected peaks. Note: (a) contains normalized counts.	43

4.4	Extracted Raman peak ratios $\left(\frac{2LA(M)}{A_{1g}}\right)$ (left Y-axis, filled circles), and peak differences ($A_{1g} - E_{2g}^1$) (right Y-axis, filled squares). Color-coded background colors indicate the ranges of sulfur compositions as defined under Method.	44
4.5	Raman peak analysis for various amounts of sulfur.	44
4.6	XPS analysis of as-grown film using sulfurization of sputter-deposited tungsten. Color-coded boxes indicate the ranges of sulfur compositions as defined under Methods.	45
4.7	EDX analysis of S100 -grown film on the substrate. (a) - (b) FESEM image and EDX elemental mapping of the investigated area. EDX elemental mapping for (c) tungsten, (d) sulfur and (e) corresponding elemental composition table of the as-grown S100 film.	46
4.8	EDX analysis of S200 -grown film on the substrate. (a) - (b) FESEM image and EDX elemental mapping of the investigated area. EDX elemental mapping for (c) tungsten, (d) sulfur and (e) corresponding elemental composition table of the as-grown S200 film.	47
4.9	EDX analysis of S250 -grown film on the substrate. (a) - (b) FESEM image and EDX elemental mapping of the investigated area. EDX elemental mapping for (c) tungsten, (d) sulfur and (e) corresponding elemental composition table of the as-grown S250 film.	48
4.10	EDX analysis of S350 -grown sample. (a) EDX elemental compositional spectrum (inset: FESEM image of the investigated area) and (b) corresponding elemental composition table.	48
4.11	EDX analysis of S450 -grown sample. (a) EDX elemental compositional spectrum (inset: FESEM image of the investigated area) and (b) corresponding elemental composition table.	49
4.12	EDX analysis of S500 -grown film on the substrate. (a) - (b) FESEM image and EDX area mapping of the investigated area. (c) - (d) EDX elemental mapping for W and S, respectively and (e) corresponding elemental composition table of the as-grown S500 film.	49
4.13	EDX analysis of S550 -grown film on the substrate. (a) - (b) FESEM image and EDX area mapping of the investigated area. (c) - (d) EDX elemental mapping for W and S, respectively and (e) corresponding elemental composition table of the as-grown S550 film.	50
4.14	EDX analysis of S650 -grown sample. (a) EDX elemental compositional spectrum (inset: FESEM image of the investigated area) and (b) corresponding elemental composition table.	50
4.15	EDX analysis of S900 -grown film on the substrate. (a) - (b) FESEM image and EDX area mapping of the investigated area. (c) - (f) EDX elemental mapping for W, S, C and O, respectively and (g) corresponding elemental composition table of the as-grown S900 film.	51
5.1	Thin film mode XRD patternographic of the as-grown samples.	56
5.2	(a)-(b) FESEM scanned images, and (c) AFM surface morphology of the as-grown sulfurized samples.	57
5.3	Raman spectra of the as-grown WS₂ film.	58
5.4	Raman area mapping of the as-grown WS₂ . (a) Raman vibrational modes peak ratio $\left(\frac{2LA(M)}{A_{1g}}\right)$, and (b) peak positional distance ($A_{1g} - E_{2g}^1$) mapping. (c) Raman vibrational modes peak in-plane (E_{2g}^1) and (c) out-of-plane (A_{1g}) mapping.	59
5.5	Surface area coverage calculation for the as-grown WS₂ on the Si/SiO ₂ substrate using OpenCV. (a) Input FESEM image, (b) processed image (contrast limited adaptive histogram equalization (CLAHE)), (c) WS₂ mask, (d) voids highlighted in red, (e) original FESEM image with void regions highlighted in red (overlay), and (f) corresponding statistics.	60
5.6	FESEM images of the as-grown sulfurized samples with various amounts of sulfur precursor.	61
6.1	Synthesis of Ag-doped WS₂ (test) and FESEM scan images for WS₂ (control) and Ag: WS₂ (test). Courtesy: Dr. Henam Sylvia Devi.	64
6.2	PXRD patterns of WS₂ (control) and Ag: WS₂ (test). The XRD peaks are labeled with (hkl) values for +(hkl) Ag, *(hkl) WS₂ , and #(hkl) Ag ₂ S (silver sulfide)[185].	65
6.3	HRTEM image of WS₂ (control) and Ag: WS₂ (test). (a) WS₂ (control) layered structure, (b)-(c) Ag: WS₂ (test), (d) Ag: WS₂ (test) for d-spacing measurement. SAED pattern for (e) WS₂ (control) and (f) Ag: WS₂ (test).	66
6.4	Raman spectra for WS₂ (control) and Ag: WS₂ (test).	67
6.5	UV-Vis spectra for WS₂ (control) and Ag: WS₂ (test).	68

6.6	Nyquist plot of the EIS measurement for WS₂ (control) and Ag:WS₂ (test) . (Inset) Equivalent circuit: $R_1 + \frac{Q_2}{R_2}$, where Q_2 and a_2 are parameter and exponent of the constant phase element (CPE). Fit parameters: control : R_1 (9.726 Ω), R_2 (167.8 k Ω), Q_2 (11.15×10^{-6} Fs ^{a_2-1}), and a_2 (0.8874), and test : R_1 (4.745 Ω), R_2 (171.6 k Ω), Q_2 (17.69×10^{-6} Fs ^{a_2-1}), and a_2 (0.8719).	68
6.7	IV data for the fabricated devices: WS₂ (control) and Ag:WS₂ (test) devices under AMI.5G illumination.	70
6.8	On-off characteristics of the fabricated Ag:WS ₂ device. Current vs. time characteristics of the fabricated devices under dark and solar AMI.5G light-illuminated conditions, (a) on/off photocurrent data, measured (b) fall (decay) time, and (c) rise time.	71
6.9	Time-dependent photoresponse of WS₂ (control) photodetector under AMI.5G illumination conditions.	72
6.10	Extended photoresponse data for Ag:WS ₂ photodetector under solar AMI.5G exposure.	72
6.11	Transient absorption spectroscopy analysis of WS₂ (control) and Ag:WS₂ (test) with 350 nm excitation source.	73
6.12	Current fitting (dashed line, left Y-axis) of the fabricated devices: WS₂ (control) and Ag:WS₂ (test) . Conductance values (solid lines, right Y-axis) are calculated from the fitted curve for the fabricated devices. The conductance, $S = \frac{\partial I}{\partial V} = I_0 \cdot \frac{q}{nk_B T} \cdot \exp\left(\frac{qV}{nk_B T}\right)$, where n is the ideality factor from the governing diode equation.	74
6.13	Schematic diagram of (a) flat band Structure of Au and WS ₂ with no contact between layers (before contact), (b) band alignments of lateral metal-semiconductor-metal (Ti-Au/WS ₂ /Au-Ti) in the thermal equilibrium state. Schematic band alignments of the lateral MSM photodetector under applied voltage (V_{DS}) and exposure (c) WS₂ (control) and (d) Ag-doped WS₂ (test) .	76
8.1	This study demonstrates zinc-induced enhancement in photocurrent generation within NaGdF ₄ :Er ³⁺ upconversion material.	79
8.2	Powder mode XRD patternographic of the as-synthesized control and test samples.	81
8.3	FESEM images for (a)-(c) control and (d)-(f) test samples.	82
8.4	Photoluminescence spectra of the control and test samples.	83
8.5	Photocurrent response of the as-fabricated devices. (a) photocurrent response of the Er³⁺-only (control) and Er³⁺-Zn³⁺ (test) co-doped devices under dark and AMI.5G illumination, (b) on/off photocurrent response of both the samples. Photoresponse of the Er-only (Control) and Er-Zn co-doped (test) fabricated devices. Measured (a)-(e) rise and fall time of control and test devices.	84
8.6	Photoresponse of the Er-only (Control) and Er-Zn co-doped (test) fabricated devices. Measured (a)-(e) rise and fall time of control and test devices.	85
8.7	Current vs. voltage characteristics of the fabricated solar cell.	86
8.8	A custom-built solar cell measurement jig to test the fabricated solar cells.	87
8.9	Major constituent modules of the custom-built horizontal-tubular split furnace CVD system.	87
8.10	Left gas-cum-vacuum column.	88
8.11	Right gas-cum-vacuum column.	89
8.12	Custom-built horizontal-tubular split furnace.	90
8.13	Optical and AFM analysis of APCVD grown MoS ₂ flakes on SiO ₂ substrate. (a)-(b) optical images revealed the distribution of flakes on the substrate. (c) AFM tapping phase image and (d) AFM image of a single triangular MoS ₂ flake.	90
8.14	Raman analysis of APCVD grown MoS ₂ flakes. Inset: An approximate test point (laser spot) taken for measurement.[Recipe development and characterization with assistance from Quazar Technology, New Delhi].	91
8.15	(a)-(b) Optical microscopy analysis of low-pressure CVD grown samples on SiO ₂ substrate.	92
8.16	Analysis code	93

List of Tables

1.1	Electronic characteristics of various TMD materials. Reprinted with permission from Ref. [24], Copyright ©Springer Nature: Nature Chemistry (2013).	1
3.1	Growth conditions (for sample geometry A), including substrate temperature (T_{sub}), and Ar gas flow rate ($\dot{m}$), and relative precursor placement geometries (d_1 and d_2), for growing various morphologies of WS_2 . . .	27
3.2	Comparison of various WS_2 growth approaches.	35
4.1	Fitted binding energy positions (in eV) of W 4f, W 5p, and S 2p peaks for all as-grown films. The table provides a comparison of chemical states and peak positions across samples grown under different conditions. . .	41
4.2	Comparison of various WS_2 growth approaches.	52
5.1	Comparison of WS_2 growth approaches	56
6.1	Summary of reported photoelectric properties of TMDs and other 2D materials from previous studies, highlighting key parameters.	75
9.1	Coursework undertaken.	95

