

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР НА ГРАФЕНЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ СИСТЕМЫ NANODEV

**И. И. Абрамов, В. А. Лабунов, Н. В. Коломейцева,
И. А. Романова, И. Ю. Щербакова**

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
П. Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь, e-mail: nanodev@bsuir.edu.by*

В докладе описаны комбинированные модели полевых графеновых транзисторов (ПГТ) и многобарьерных резонансно-туннельных диодов (РТД) на основе графена, включенные в систему моделирования нанoeлектронных приборов и устройств NANODEV. Проведены расчеты характеристик указанных приборных структур. Получено хорошее согласование с экспериментальными данными для выходных характеристик двухзатворного ПГТ. Исследовано влияние ширин барьеров и квантовых ям на вольт-амперные характеристики (ВАХ) четырехбарьерных РТД на основе графена на подложках гексагонального нитрида бора (h-BN) и диоксида кремния (SiO₂).

Ключевые слова: графен; комбинированные модели; полевой транзистор; моделирование; резонансно-туннельный диод; вольт-амперная характеристика.

SIMULATION OF DEVICE STRUCTURES BASED ON GRAPHENE USING NANODEV SYSTEM

I. I. Abramov, V. A. Labunov, N. V. Kolomejtseva, I. A. Romanova, I. Y. Shcherbakova

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P. Brovki str. 6,
220013 Minsk, Belarus,
Corresponding author: I. I. Abramov (nanodev@bsuir.edu.by)*

The paper describes the combined models of field-effect graphene transistors (GFETs) and multi-barrier resonant tunneling diodes (RTDs) based on graphene, which are included in the NANODEV nanoelectronic devices simulation system. A good agreement with experimental data have been obtained for output IV-characteristics of two gate graphene field-effect transistor. The influence of the widths of barriers and quantum wells on the IV-characteristics of four-barrier RTDs based on graphene on substrates of hexagonal boron nitride (h-BN) and silicon dioxide (SiO₂) is studied.

Key words: graphene; combined models; field-effect transistor; simulation; resonant tunneling diode; IV-characteristic.

ВВЕДЕНИЕ

Графен обладает рядом уникальных свойств, позволяющих создавать устройства значительно превосходящие традиционные по быстродействию [1]. К таким устройствам относятся полевые графеновые транзисторы и резонансно-туннельные диоды с областями, содержащими графен, которые могут использоваться в качестве активных элементов сверхбыстродействующих логических вентилей и высокочастотных генераторов. В работе рассмотрено моделирование этих приборов с использованием разработанных моделей с применением системы NANODEV.

МОДЕЛИ

Предложенная модель ПГТ является комбинированной, так как согласно классификации [2] является комбинацией физико-топологической и электрической моделей. Модель ПГТ [3] позволяет рассчитывать самосогласованный потенциал в канале, скорость насыщения с учетом рассеяния, квантовую емкость, эффективную подвижность носителей заряда, выходные и передаточные ВАХ одно- и двухзатворных ПГТ.

Для проведения расчетов характеристик многобарьерных РТД на основе графена использовалась разработанная комбинированная самосогласованная модель [4,5] на основе формализма волновых функций [2, 6]. Модель сочетает в себе применение квантовомаханического и полуклассического подходов [2, 6] для описания разного вида областей.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Моделировался двухзатворный ПГТ с длиной канала 18 мкм на подложке SiO_2/Si [7]. Графеновый канал находится между диэлектриками h-BN и Al_2O_3 . В расчетах h-BN пренебрегаем из-за малой толщины, а диэлектриком нижнего затвора является SiO_2 толщиной 285 нм, верхнего затвора – Al_2O_3 толщиной 26 нм. Расчеты проведены при температуре окружающей среды 300 К, энергии оптических фононов для Al_2O_3 на графене 55 мэВ. Другие данные приведены в [7].

На рис. 1 приведены результаты расчета выходных ВАХ ПГТ при постоянном напряжении на нижнем затворе 40 В и при различных напряжениях на верхнем затворе V_{tg} в сравнении с экспериментальными данными. Кривая 1 соответствует $V_{tg} = 8$ В, кривая 2 – 6 В, кривая 3 – 4 В, кривая 4 – 2 В, кривая 5 – 0 В, кривая 6 – экспериментальные данные, соответствующие различным напряжениям на верхнем затворе V_{tg} [7].

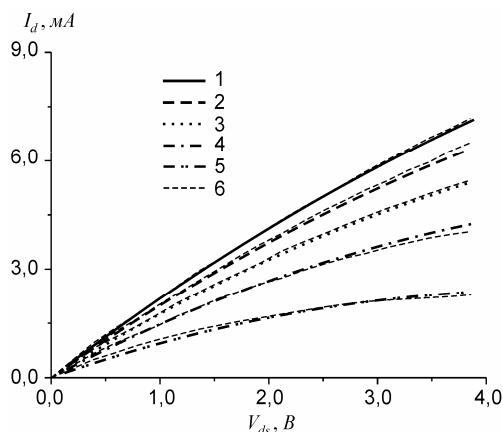


Рисунок 1. – Сравнение результатов моделирования ВАХ ПГТ при постоянном напряжении на нижнем затворе 40В с экспериментальными данными [7]

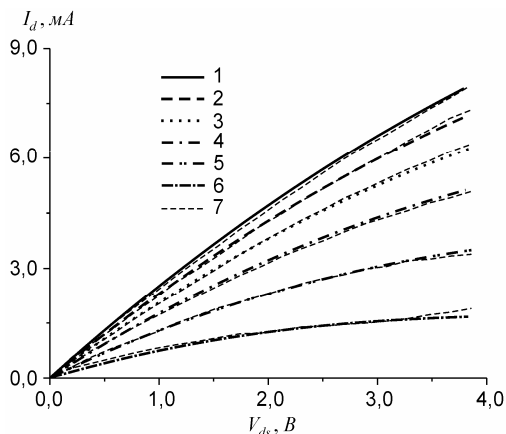


Рисунок 2. – Сравнение результатов моделирования ВАХ ПГТ при постоянном напряжении на нижнем затворе 70 В с экспериментальными данными [7]

Наилучшее согласование с экспериментальными данными получено при следующих параметрах: сопротивления стока и истока – 90 Ом, параметр $m = 1,0 \text{ В}^2$. Для кривых 1, 2, 3, 4 согласующий параметр $h = 0,165 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, для кривой 5 – (при $V_{ig} = 0 \text{ В}$) $h = 0,135 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$.

На рис. 2 приведены выходные ВАХ ПГТ при напряжении на нижнем затворе 70 В и при различных V_{ig} . Кривая 1 соответствует $V_{ig} = 8 \text{ В}$, кривая 2 – 6 В, кривая 3 – 4 В, кривая 4 – 2 В, кривая 5 – 0 В, кривая 6 – -2 В, кривая 7 – экспериментальные данные взяты из [7]. Наилучшее согласование с экспериментальными данными получено при следующих параметрах: сопротивления стока и истока – 69 Ом, параметр $m = 1,0 \text{ В}^2$. Для кривых 1, 2, 3, 4 согласующий параметр $h = 0,165 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, для кривой 5 – (при $V_{ig} = 0 \text{ В}$) $h = 0,145 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, для кривой 6 – (при $V_{ig} = -2 \text{ В}$) $h = 0,115 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$.

С применением разработанной численной комбинированной модели исследовались ВАХ РТД на основе графена на подложках h-BN и SiO₂ в зависимости от ширины барьеров и квантовых ям. В качестве примера на рис. 3 показано влияние ширины барьеров на ВАХ (точнее плотности тока от напряжения) четырехбарьерных РТД на двухслойном графене на подложке h-BN для трех случаев, когда ширины барьеров равны 1,2 нм (кривая 1), 1,3 нм (кривая 2) и 1,4 нм (кривая 3).

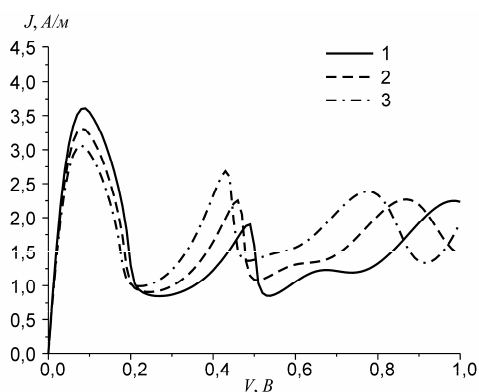


Рисунок 3. – ВАХ четырехбарьерных РТД для разных ширины барьеров

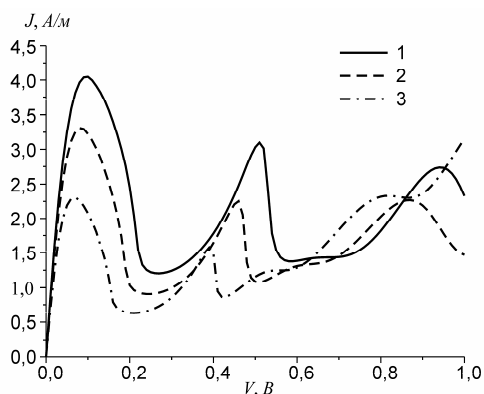


Рисунок 4. – ВАХ четырехбарьерных РТД для разных ширины квантовых ям

Моделирование проводилось для РТД, в котором высоты потенциальных барьеров задавались равными 3,137 эВ, ширины квантовых ям – 3,4 нм, ширины приконтактных областей – 17 нм, концентрация примеси в приконтактных областях $7,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$, а температура окружающей среды – 300 К. Как следует из рис. 3, увеличение ширины барьеров четырехбарьерных структур на основе графена на подложке h-BN приводит к уменьшению плотностей пиковых токов для первого пика, но при этом для второго и третьего пиков значения плотностей токов увеличиваются. Это согласуется с результатами, полученными для четырехбарьерного РТД на основе графена на подложке SiO₂.

На рис. 4 проиллюстрировано влияние ширины квантовых ям на ВАХ четырехбарьерных РТД на двухслойном графене на подложке h-BN для трех случаев, когда

ширины ям равны 3,0 нм (кривая 1), 3,4 нм (кривая 2) и 4,0 нм (кривая 3). При этом ширины потенциальных барьеров задавались равными 1,3 нм, а остальные параметры соответствуют приведенным выше. Установлено, что при увеличении ширины квантовых ям наблюдается уменьшение значений плотностей пиковых токов, а также уменьшение значений соответствующих им пиковых напряжений.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В докладе рассмотрено моделирование двухзатворного ПГТ с помощью комбинированной самосогласованной модели основанной на уравнении квантовой диффузионно-дрейфовой модели. С ее применением исследованы выходные ВАХ ПГТ в зависимости от приложенных смещений. Проиллюстрировано хорошее согласование результатов расчетов с использованием предложенной модели с экспериментальными данными, что подтверждает адекватность модели.

Представлены результаты исследования с использованием разработанной комбинированной самосогласованной модели четырехбарьерных РТД на основе двухслойного графена. Получены зависимости плотностей токов от напряжения таких РТД на подложках h-BN и SiO₂ для различных значений ширины потенциальных барьеров и квантовых ям.

Заметим, что наш опыт исследования многоостровковых одноэлектронных структур [2, 8–10] показывает, что подобный подход может использоваться и для построения элементов на основе многобарьерных структур на графене.

Программы, реализующие разработанные модели ПГТ и РТД на графене, включены в систему моделирования нанoeлектронных приборных структур и устройств NANODEV [11, 12], разрабатываемую в БГУИР с 1995 года для ПЭВМ.

Работа выполнена в рамках Государственных программ научных исследований Республики Беларусь "Конвергенция" и "Функциональные и композиционные материалы, наноматериалы" ("Нанотех").

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Beyond CMOS. International Roadmap for Devices and Systems. 2018, https://irds.ieee.org/images/files/pdf/2017/2017IRDS_BC.pdf
2. Абрамов, И.И. Основы моделирования элементов микро- и нанoeлектроники / Абрамов И. И. – LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2016. – 444 с.
3. Абрамов, И.И. Моделирование полевых графеновых транзисторов с одним и двумя затворами в различных режимах функционирования / И. И. Абрамов [и др.] // Нанотехнологии, разработка, применение: XXI век. – 2018. – № 3. – С. 16–24.
4. Абрамов, И.И. Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода / И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко // Электромагнитные волны и электронные системы. – 2002. – Т. 7, № 3. – С. 54–60.
5. Абрамов, И.И. Моделирование резонансно-туннельных приборных структур на основе углеродных наноматериалов / И.И. Абрамов [и др.] // Нанотехнологии, разработка, применение: XXI век. – 2017. – Т. 9, № 3. – С. 3–11.
6. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. I. Основные положения / И. И. Абрамов // Нано- и микросистемная техника. – 2006. – № 8. – С. 34–37.
7. Scaling of graphene field-effect transistors supported on hexagonal boron nitride: radio-frequency stability as a limiting factor / P. C. Feijoo [et al.] // Nanotechnology. – 2017. – V. 28. – P. 485203-1–10.
8. Абрамов И.И. Характеристики металлических одноэлектронных транзисторов на различных материалах / И.И. Абрамов, Е.Г. Новик // Физика и техника полупроводников. – 2000. – Т. 34, №8. – С. 1014–1019.

9. Абрамов И.И. Влияние параметров конструкции и материалов на вольт-амперные характеристики двухостровковых одноэлектронных цепочек / И.И. Абрамов [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36, №10. – С. 1272–1277.
10. Абрамов И.И. Модель многоостровковых одноэлектронных цепочек на основе метода Монте-Карло. / И.И. Абрамов [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т.37, №5. – С. 583–587.
11. Абрамов, И.И. Система моделирования нанoeлектронных приборов – NANODEV / И.И. Абрамов [и др.] // Микроэлектроника. – 2003. – Т. 32, № 2. – С. 124–133.
12. Abramov, I. I. A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities / I.I. Abramov [et al.] // Proc. of SPIE. – 2010. – V. 7521. – P. 75211E-1–11.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В НАНОТРУБКАХ СИЛИЦИДА МАГНИЯ

А. Ю. Алексеев, А. Г. Черных, А. Б. Филонов, Д. Б. Мигас

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6,
220013 Минск, Беларусь, e-mail: lucky.alexey94@gmail.com*

В зависимости от диаметра, нанотрубки, свёрнутые из двумерного Mg_2Si , имеют различную структуру: в нанотрубках с диаметром более 27 – 29 Å имеется искажение, аналогичное искажению динамически стабильной фазы Td двумерного Mg_2Si , тогда как нанотрубки с меньшим диаметром обладают более высокой симметрией и соответствуют нанотрубкам, свёрнутым из динамически нестабильной фазы T двумерного Mg_2Si . Зависимость энергии напряжения нанотрубок Mg_2Si от их диаметра содержит минимум, который приходится на нанотрубки (11,0) и (5,5) с диаметрами 15,7 и 12,5 Å, соответственно.

Ключевые слова: силицид; нанотрубка; наноструктура; отрицательная энергия напряжения; фазовый переход.

PHASE TRANSITION IN NANOTUBES OF MAGNESIUM SILICIDE

A. Yu. Alekseev, A. G. Chernykh, A. B. Filonov, D. B. Migas

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P. Browki str. 6, 220013 Minsk, Belarus
Corresponding author: A. Yu. Alekseev (lucky.alexey94@gmail.com)*

The structure of nanotubes, rolled up from the two-dimensional Mg_2Si , depends on their diameter: nanotubes with diameters more than 27 – 29 Å have a distortion similarly to the distortion of the dynamically stable Td phase of the two-dimensional Mg_2Si , while nanotubes with smaller diameters have a higher symmetry and correspond to nanotubes rolled up from the dynamical unstable T phase of the two-dimensional Mg_2Si . There is a minimum of strain energy of Mg_2Si nanotubes with respect to their diameter which occurs for (11,0) and (5,5) nanotubes with diameters of 15,7 and 12,5 Å, respectively.

Key words: silicide; nanotube; nanostructure; negative strain energy; phase transition.