22. V. K. Pecharsky, P. Y. Zavalij. Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials. Springer, 2005.
23. G. Aburakhmanov, N. G. Abdurakhmanova (2005) Phys. Stat. Sol.(a) 202(9) 1799 –1802.
24. А.А. Аппен. Химия стекла. Изд-во Химия, Ленинград, 1974.
25. K. P. O'Donnell and X. Chen (1991) Appl. Phys. Lett.. 58 (25) 2924–2926.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА И ДРУГИХ 2D-МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ СИСТЕМЫ NANODEV

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

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

В докладе рассмотрено моделирование полевых графеновых транзисторов на двухслойном графене и гетероструктур на основе 2D-материалов с вертикальным транспортом. Для моделирования транзисторов на двухслойном графене в квантовой диффузионно-дрейфовой модели использовался предложенный метод расчета квантовой емкости. Приведены результаты моделирования вольт-амперных характеристик (ВАХ) резонансно-туннельных диодов (РТД) на основе GaN/AlGaN с вертикальным транспортом с использованием предложенной комбинированной модели. Модель основана на численном решении уравнений Шредингера и Пуассона в активной области прибора. Рассмотрены случаи барьеров AlGaN различной толщины и различных ширин GaN квантовой ямы. Все расчеты проведены с помощью системы моделирования наноэлектронных приборов NANODEV, разрабатываемой в БГУИР с 1995 года.

Ключевые слова: двухслойный графен; 2D-материалы; моделирование; полевой графеновый транзистор; гетероструктура с вертикальным транспортом.

SIMULATION OF DEVICE STRUCTURES BASED ON BILAYER GRAPHENE AND OTHER 2D-MATERIALS WITH THE USE OF SYSTEM NANODEV

I. I. Abramov, V. A. Labunov, N. V. Kalameitsava, 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)

In the paper simulation of field-effect transistors based on bilayer graphene and heterostructures based on 2D-materials with vertical transport has been carried out. The proposed method for calculating the quantum capacitance was used to simulate transistors based on two-layer graphene in the quantum diffusion-drift model. The report presents the simulation results of IV-characteristics of resonant tunneling diodes (RTDs) based on GaN/AlGaN with vertical transport using the proposed numerical combined model. The model is based on the numerical solution of the Schredinger and Poisson equations in the

active region of the device. Cases with AlGaN barriers of various thicknesses and GaN quantum wells of various widths are considered. All calculations were carried out using the NANODEV nanoelectronic devices simulation system, which has been developed at BSUIR since 1995.

Key words: bilayer grapheme; 2D-materials; simulation; modeling; graphene field-effect transistor; heterostructures with vertical transport.

ВВЕДЕНИЕ

Графен рассматривается как перспективный материал для изготовления канала в полевых графеновых транзисторах (ПГТ) вследствие высокой скорости носителей и скорости насыщения в нем. Однако применение ПГТ было ограничено несколькими факторами, в частности, сравнительно высокой проводимостью стока вследствие нулевой запрещенной зоны, высоким контактным сопротивлением графен/металл. Улучшенные характеристики ПГТ были получены рядом исследователей при использовании в качестве канала двухслойного графена. При приложении вертикального электрического поля происходит открытие настраиваемой запрещенной зоны в канале прибора.

Нитриды третьей группы считаются одними из самых перспективных материалов для микроэлектронной промышленности. Нитрид галлия, в частности, используется для изготовления оптических приборов в видимой коротковолновой и УФ-области. Гетероструктуры GaN/AlGaN перспективны для высокомощных и высокочастотных усилителей. Благодаря большому разрыву зоны проводимости (1,75 эВ между AlN и GaN) и высокой энергии LO-фононов (92 мэВ для GaN), нитриды третьей группы могут использоваться в квантовых каскадных лазерах, которые могут функционировать при комнатной температуре в терагерцовом диапазоне частот. В связи с изложенным, перед исследователями стоит задача разработки адекватных численных моделей, подходящих для расчета ВАХ указанных приборов.

МОДЕЛИ

Исследование полевых транзисторов на двухслойном графене было проведено с помощью квантовой диффузионно-дрейфовой модели [1–3], представляющей собой комбинацию физико-топологической и электрической моделей [4]. В модифицированной модели применен предложенный метод расчета квантовой емкости в ПГТ на двухслойном графене. Полевой транзистор представляется в виде электрической схемы, на основе которой согласно законам Кирхгофа записываются уравнения для нахождения электростатического потенциала. На электрической схеме двухслойный графен, который используется в качестве токопроводящего канала транзистора, представляется в виде квантовой емкости. Путем аппроксимаций получено уравнение, имеющее существенное отличие от аналогичного уравнения для полевых транзисторов на монослойном графене. Рассмотрено три случая для нахождения коэффициента α при квантовой емкости в зависимости от приложенных смещений, а, следовательно, и от ширины запрещенной зоны. Далее на основе электростатического потенциала проводится расчет выходных характеристик ПГТ. Также рассмотрены три случая, учитывающие токоперенос электронами, дырками, и одновременно электронами и дырками.

Также рассмотрено моделирование гетероструктур на основе 2D-материалов с вертикальным транспортом с использованием модели, основанной на самосогласо-

ванном решении уравнений Шредингера и Пуассона [5–7]. Проведено исследование влияния уровня Ферми на вольт-амперные характеристики РТД на двухбарьерной гетероструктуре SiO_2/MoS_2 и исследование влияния размеров активных областей на вольт-амперные характеристики РТД на двухбарьерной гетероструктуре GaN/AlGaN.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Проведен расчет выходных характеристик ПГТ на двухслойном графене [8]. При расчетах использовались следующие параметры исследуемой структуры прибора: длина канала 12 мкм, ширина канала 60 мкм, толщина верхнего подзатворного диэлектрика 25 нм (Al_2O_3) и его диэлекрическая проницаемость $9{,}1\varepsilon_0$, толщина нижнего подзатворного диэлектрика 85 нм (SiO_3) и его диэлектрическая проницаемость $3{,}9\varepsilon_0$, сопротивление на стоке 200 Ом, сопротивление на истоке 200 Ом, температура окружающей среды 300 К.

На рис. 1 показаны выходные характеристики исследуемого прибора при фиксированном напряжении на верхнем затворе –3 В и различных напряжениях на нижнем затворе. Кривая *1* соответствует напряжению –60 В, кривая *2* – напряжению –40 В, кривая *3* – напряжению 0 В. Полученные результаты качественно согласуются с результатами экспериментальных данных работы [8].

Также проведены расчеты вольт-амперных характеристик РТД на гетероструктурах с вертикальным транспортом на основе материальной системы SiO_2/MoS_2. При расчетах были использованы следующие параметры: высота потенциальных барьеров в исследуемой структуре 3,3 эВ (SiO_2) [9], ширина барьеров 1,7 нм, ширина квантовой ямы (MoS_2) 3,6 нм, что соответствует 6 слоям MoS_2 [10], диэлектрическая проницаемость SiO_2 $3{,}9\varepsilon_0$, диэлектрическая проницаемость MoS_2 $7{,}2\varepsilon_0$. Приконтактные области MoS_2 протяженностью 20,0 нм легированы донорной примесью.

На рис. 2 показаны вольт-амперные характеристики РТД на гетероструктуре SiO_2/MoS_2 рассчитанные с помощью модели [7] модифицированной для случая РТД на гетероструктурах с вертикальным транспортом при различных значениях уровня Ферми.

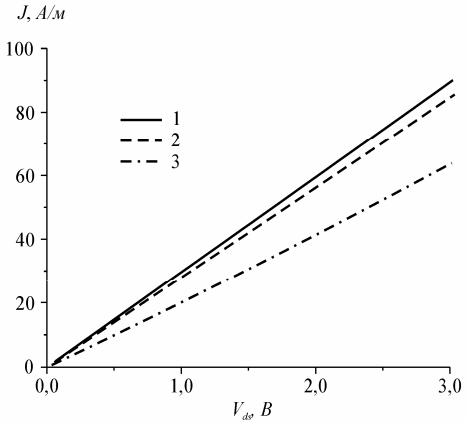

Рисунок 1. Выходные характеристики ПГТ на основе двухслойного графена при различных напряжениях на нижнем затворе: *1* – V_{bg} = –60 В; *2* – V_{bg} = –40 В; *3* – V_{bg} = 0 В

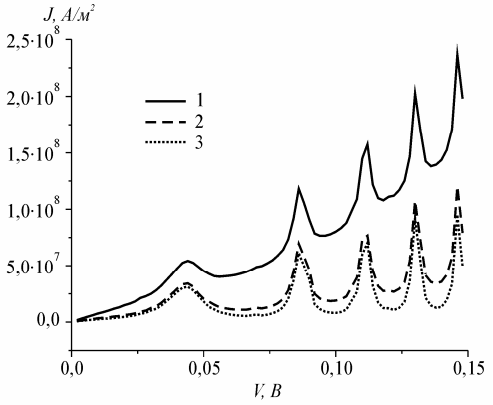

Рисунок 2. Вольт-амперные характеристики РТД на двухбарьерной гетероструктуре SiO_2/MoS_2 с вертикальным транспортом при различных значениях уровня Ферми: *1* – E_F = 2,55 эВ; *2* – E_F = 2,50 эВ; *3* – E_F = 2,45 эВ

Кривая *1* соответствует значению 2,55 эВ, кривая *2* – значению 2,50 эВ, кривая *3* – значению 2,45 эВ. При значениях уровня Ферми выше 2,55 эВ пиковые токи становятся маловыраженными.

Рассмотрен РТД на гетероструктуре GaN/AlGaN, который состоит из активной области квантовой ямы из нелегированного GaN шириной 1 нм, которая ограничена барьерами из $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$, толщина которых варьируется от BW = 0,5 нм до BW = 2 нм с шагом 0,5 нм. Активная область прибора отделена от легированных контактов из n^+-GaN спейсерными слоями из нелегированного GaN толщиной 5 нм. Проведен анализ влияния толщины барьеров. На рис. 3 приведены результаты расчета ВАХ такого РТД. Видно, что ВАХ чувствительна к изменению размеров барьеров. Плотности тока пика и долины уменьшаются, а контрастность ВАХ увеличивается по мере увеличения размеров барьеров.

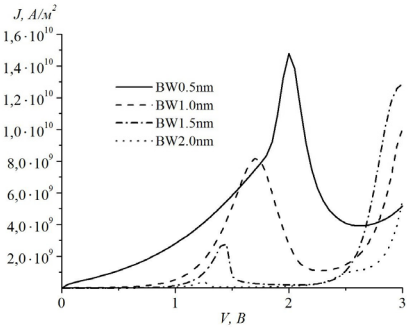

Рисунок 3. Расчеты ВАХ РТД на гетероструктуре $GaN/Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ для случаев с различной толщиной барьеров

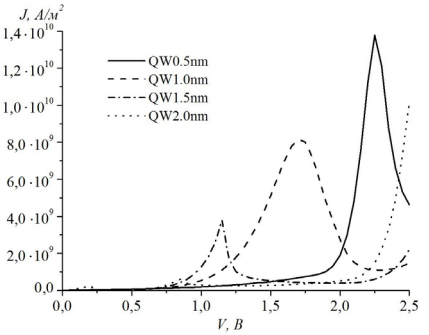

Рисунок 4. Расчеты ВАХ РТД на гетероструктуре $GaN/Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ для случаев с различной шириной квантовой ямы

Был проведен анализ влияния ширины квантовой ямы аналогичного РТД на гетероструктуре GaN/AlGaN. В этом случае толщина барьеров $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ равна 1 нм, а ширина квантовой ямы GaN варьируется от QW = 0,5 нм до QW = 2 нм с шагом 0,5 нм. Результаты расчета на рис. 4 показывают, что плотности тока пика и долины уменьшаются, а контрастность ВАХ увеличивается по мере увеличения размеров барьеров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная модель ПГТ на двухслойном графене позволяет рассчитывать электростатический потенциал в канале исследуемого прибора, ширину запрещенной зоны, открываемую в графене при приложении вертикального электрического поля, а также его электрические характеристики в зависимости от различных параметров, а именно: геометрических параметров структуры, температуры окружающей среды, параметров материалов и приложенных смещений. Рассчитаны вольт-амперные характеристики двухзатворного ПГТ на двухслойном графене.

С помощью программы, реализующей модель РТД на вертикальных гетероструктурах на основе двумерных материалов, проведено моделирование РТД на материальной системе SiO_2/MoS_2. Также проведено исследование влияния различных фак-

торов на характеристики РТД на основе GaN/AlGaN. Полученные результаты показывают, что ВАХ чувствительна как к изменению размеров барьеров, так и ширины квантовой ямы. Предложенную модель можно использовать для подбора оптимальной структуры РТД с вертикальным транспортом. Программы, реализующие эту модель и модель ПГТ включены в систему моделирования наноэлектронных устройств NANODEV [11].

Работа подготовлена по результатам исследования, проведенного в рамках Государственных программ научных исследований Республики Беларусь "Конвергенция"и "Микроэлектроника".

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. 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.
2. Quantum drift-diffusion models for dual-gate field-effect transistors based on mono- and bilayer graphene / I. I. Abramov [et al.] // Proc. of SPIE. — 2022. — V. 12157. — P. 121570X (6 pp.).
3. Влияние диэлектриков затворов полевых графеновых транзисторов на вольт-амперные характеристики / И. И. Абрамов [и др.] // Микроэлектроника. — 2021. — Т. 50, № 2. — С. 127—134.
4. Абрамов, И. И. Основы моделирования элементов микро- и наноэлектроники. / И. И. Абрамов. — Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. — 444 с.
5. 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. Simulation of graphene field-effect transistors and resonant tunneling diodes based on carbon nanomaterials / I. I. Abramov [et al.] // Proc. of SPIE. — 2019. — V. 11022. — P. 110220F (11 pp.).
7. Simulation of various nanoelectronic devices based on 2D materials / I. I. Abramov [et al.] // Proc. of SPIE. — 2022. — V. 12157. — P. 121570U (9 pp.).
8. Enhanced intrinsic voltage gain in artificially stacked bilayer CVD graphene field effect transistors / H. Pandey [et al.] // Ann. Phys. (Berlin). — 2017. — P. 1700106 (9 pp.).
9. Band offset and negative compressibility in Graphene-MoS_2 heterostructures / S. Larentis [et al.] // Nanoletters. — 2014. — Viol. 14. – P. 2039—2045.
10. Deilectric properties of hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides: from monolayer to bulk / A. Laturia // Nature. 2D Materials and Applications. — 2018. — Vol. 4. N 28. P. 1–6. https://doi.org/10.1038/s41699-020-00163-3.
11. A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities / I. I. Abramov [et al.] // Proc. of SPIE. — 2010. — Vol. 7521. — P. 75211E1 (11 pp.).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА МОНО- И БИСЛОЕВ ТРИКЛИННОГО ДИСУЛЬФИДА РЕНИЯ

А. В. Баглов[1,2], Л. С. Хорошко[1,2]

[1)] Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь, e-mail: baglov@bsu.by
[2)] Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь, e-mail: khoroshko@bsu.by

Методами из первых принципов в приближении локальной плотности исследована электронная структура моно- и бислоев триклинного дисульфида рения. Показа-