

4. Forward-bias diode parameters, electronic noise, and photoresponse of graphene/silicon Schottky junctions with an interfacial native oxide layer/ An Y. [et al.] //Journal of Applied Physics. – 2015. – Vol. 118, №. 11. – P. 114307 (1–6).
5. Werner J. H. Barrier inhomogeneities at Schottky contacts / J. H. Werner, H. H. Güttler //Journal of applied physics. – 1991. – Vol. 69, №. 3. – P. 1522–1533.
6. Tung R. T. The physics and chemistry of the Schottky barrier height/ R. T. Tung //Applied Physics Reviews. – 2014. – Т. 1. – №. 1. – P. 011304 (1–20).
7. Numerical modeling of Schottky barrier diode characteristics / Splith D. [et al.] //Physica Status Solidi A. – 2021. – Vol. 218, №. 12. – P. 2100121 (1–5).

## **ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИБОРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ 2D-МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ**

**И. И. Абрамов, В. А. Лабунюв, Н. В. Коломейцева, В. О. Ермак**

---

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

В докладе проведено теоретическое исследование приборных гетероструктур на основе 2D-материалов, а именно: полевых транзисторов (ПТ) на двухслойном графене (ДГ), а также многобарьерных гетероструктур на основе  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  и  $\text{GaN}/\text{SiC}$ /графен с вертикальным транспортом с помощью разработанных физико-математических моделей, входящих в состав системы моделирования нанoeлектронных приборов NANODEV.

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

## **THEORETICAL INVESTIGATION OF DEVICE HETEROSTRUCTURES BASED ON 2D-MATERIALS WITH THE USING OF PHYSICO-MATHEMATICAL MODELS**

**I. I. Abramov, V. A. Labunov, N. V. Kalameitsava, V. O. Ermak**

---

*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 theoretical investigation of device heterostructures based on 2D-materials, namely field-effect transistors based on bilayer graphene and heterostructures based on  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  and  $\text{GaN}/\text{SiC}$ /graphene with vertical transport has been carried out with the using of developed models included in simulation system of nanoelectronic devices NANODEV.

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

## ВВЕДЕНИЕ

2D-материалы, в том числе графен, а также  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WSe}_2$  толщиной в один или несколько одноатомных слоев считаются перспективными при создании новых приборов на основе гетероструктур, включающих слои данных материалов. Применение графена и других 2D-материалов предложено многими исследователями в нанoeлектронике, в частности, в радиочастотных полевых транзисторах, сенсорах, резонансно-туннельных диодах и других нанoeлектронных приборах [1–3].

## МОДЕЛИ

Рассмотрим квантовую диффузионно-дрейфовую модель ПТ на ДГ, представляющую собой комбинацию физико-топологической и электрической моделей. Ранее была разработана модель ПТ на основе однослойного графена. Детальное описание модели приведено в [4]. Выделим особенности модели ПТ на ДГ. Исследуемый прибор имеет два затвора. Верхний затвор отделен от канала тонким слоем диэлектрика, а нижний затвор расположен на подложке, отделенной от канала диэлектриком нижнего затвора. Причем толщина верхнего диэлектрика примерно в 10–30 раз превышает толщину диэлектрика нижнего затвора. Поверх канала также расположены сток и исток. Одной из основных проблем в ПТ на однослойном графене было наличие токов утечки в закрытом состоянии ПТ. Для устранения этого недостатка было предложено вместо однослойного графена использовать двухслойный графен в качестве проводящего канала ПТ. Исследования показали, что при приложении напряжения между верхним и нижним затворами в ДГ происходит открытие запрещенной зоны, а следовательно, возможно управление проводимостью канала. Т.е. применяя в качестве канала ДГ вместо однослойного графена возможно получить улучшенные характеристики ПТ, добиваясь получения тока насыщения в ПТ на ДГ. В предложенной квантовой диффузионно-дрейфовой модели ПТ на ДГ [1, 5] производится предварительный расчет открытия запрещенной зоны в ДГ. Затем происходит самосогласованный расчет электростатического потенциала с учетом коэффициента квантовой емкости  $\alpha$ , принимая во внимание тип проводимости канала. Далее находятся: общая плотность листа ДГ, скорость насыщения, эффективная подвижность носителей заряда. На завершающем этапе находится плотность тока в зависимости от напряжения на стоке с учетом сопротивлений на стоке и истоке. Более подробное описание модели приведено в [1, 5].

Рассмотрим физико-математическую модель резонансно-туннельных гетероструктур, предназначенную для моделирования характеристик двух- и многобарьерных гетероструктур на основе различных 2D-материалов [1, 6]. Модель относится к классу комбинированных и адаптирована для приборных структур с вертикальным транспортом. В модели исследуемая приборная структура состоит из трех видов областей: контактов, приконтактных областей и активной области. Алгоритм модели включает самосогласованное решение уравнений Шредингера и Пуассона с целью нахождения электростатического потенциала. На следующем этапе с учетом найденного на предыдущем этапе потенциала решается только уравнение Шредингера для структуры с произвольным числом барьеров. В результате находятся волновые функции в зоне проводимости и на их основе вычисляется коэффициент прохождения исследуемой гетероструктуры. На завершающем этапе рассчитывается плотность тока. Более подробно модель рассмотрена в [6]. С ее помощью проведены рас-

четы электрических характеристик четырехбарьерной гетероструктуры  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с вертикальным транспортом.

Для расчетов характеристик резонансно-туннельных диодов предназначена модель, подробное описание которой приведено в [7]. Модель является модификацией комбинированной модели [8]. С ее помощью в данной работе проведены расчеты трехбарьерной гетероструктуры  $\text{GaN}/\text{SiC}/\text{графен}/\text{SiC}/\text{графен}/\text{SiC}/\text{GaN}$  с вертикальным транспортом.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Теоретические исследования проведены с помощью квантовых диффузионно-дрейфовых моделей полевых транзисторов, предназначенных для моделирования данных устройств с каналами представляющими собой однослойный и двухслойных графен [5]. Проведено сравнение выходных характеристик для графеновых двухзатворных полевых транзисторов с каналами из одно- и двухслойного графена. ПТ на кремниевой подложке имеет 2 подзатворных диэлектрика  $\text{SiO}_2$  толщиной 8 и 90 нм соответственно.

Выходные характеристики получены при постоянном напряжении на верхнем затворе равном  $-1$  В (рис. 1). На рис. 1 кривая 1 соответствует ПТ с каналом ДГ, кривая 2 – ПТ с каналом представляющим собой однослойный графен со следующими параметрами подвижности носителей заряда ( $h = 0,1$ ;  $m = 0,05$ ), кривая 3 – ПТ с каналом, представляющим собой однослойный графен с параметрами, входящими в расчет эффективной подвижности носителей заряда ( $h = 0,1$ ;  $m = 1,0$ ). Рис. 1 показывает, что на выходных характеристиках при равных приложенных напряжениях, температуре окружающей среды и геометрических параметрах прибора на характеристике ПТ на ДГ наблюдается область насыщения (кривая 1, рис. 1). Это объясняется открытием запрещенной зоны в двухслойном графене, в результате чего он работает как полупроводник. Вследствие чего, преимущество ПТ на ДГ перед ПТ на однослойном графене становится очевидным. На графиках приведены результаты моделирования для плотности тока стока.

Далее проведены исследования четырехбарьерных гетероструктур на основе  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с вертикальным транспортом с использованием комбинированной модели [6]. Гетероструктура обладает следующими параметрами. Потенциальные барьеры  $\text{WSe}_2$  высотой в 0,67 эВ и шириной в 3 атомных слоя расположены с чередованием между квантовыми ямами  $\text{MoS}_2$  шириной в 6 слоев. Приконтактные области  $\text{MoS}_2$  протяженностью 20 нм легированы донорной примесью  $2 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$ . Диэлектрическая проницаемость материалов задается в зависимости от количества слоев. Потенциальные барьеры  $\text{WSe}_2$  имеют значение диэлектрической проницаемости равное 7,9, а квантовые ямы  $\text{MoS}_2$  – 7,3 [9].

На рис. 2 показаны вольт-амперные характеристики (ВАХ) исследуемой гетероструктуры с вертикальным транспортом при различных температурах окружающей среды. Кривая 1 соответствует температуре 77 К, кривая 2 – температуре 300 К. Расчеты показали, что характеристики обладают следующими соотношениями пикового тока к току долины: 1) 18 при 77 К; 2) 2,88 при 300 К.

Адекватность предложенной модели подтверждена полученными результатами моделирования гетероструктуры  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ .

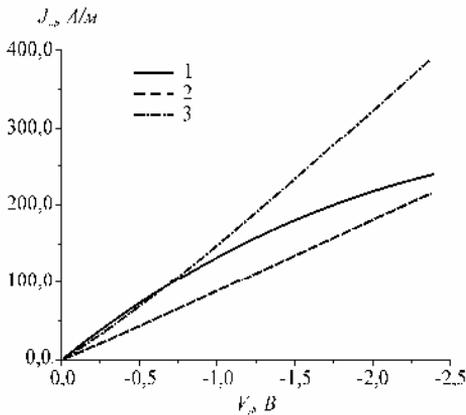


Рис. 1. Сравнение выходных характеристик ПТ с каналами из двухслойного (кривая 1) и однослойного графена (кривая 2 (параметры подвижности  $h = 0,1$ ;  $m = 0,05$ ), кривая 3 (параметры подвижности  $h=0,1$ ;  $m=1,0$ ))

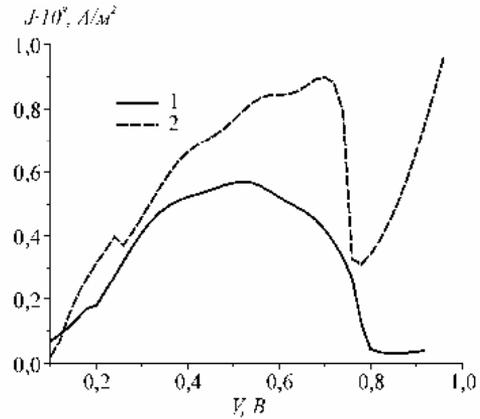


Рис. 2. ВАХ четырехбарьерной гетероструктуры  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с вертикальным транспортом при различных температурах окружающей среды: 1 –  $T = 77$  К; 2 –  $T = 300$  К

Дальнейшие результаты получены с использованием комбинированной модели резонансно-туннельных структур [7, 8], модифицированной на случай вертикального транспорта. Исследуемая трехбарьерная гетероструктура GaN/SiC/графен/SiC/графен/SiC/GaN состоит из следующих областей: 1) эмиттера и коллектора GaN шириной по 20 нм; 2) спейсерных областей GaN шириной по 5 нм; 3) областей барьеров SiC и квантовых ям, состоящих из нескольких слоев графена. Потенциальные барьеры SiC высотой 0,92 эВ имеют протяженность по 1,0 нм. Приконтактные области легированы донорной примесью  $1 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ . Диэлектрическая проницаемость и эффективная масса графена зависят от количества слоев, что было учтено при дальнейших расчетах. В работе было проведено моделирование электрических характеристик исследуемой гетероструктуры с различным числом слоев графена. ВАХ обладают ярко выраженной областью отрицательной дифференциальной проводимости. На рис. 3 кривая 1 соответствует 2 слоям графена, кривая 2 – 3 слоям. Показано, что с увеличением количества слоев графена, пиковый ток снижается, а пиковое напряжение смещается в область более низких значений.

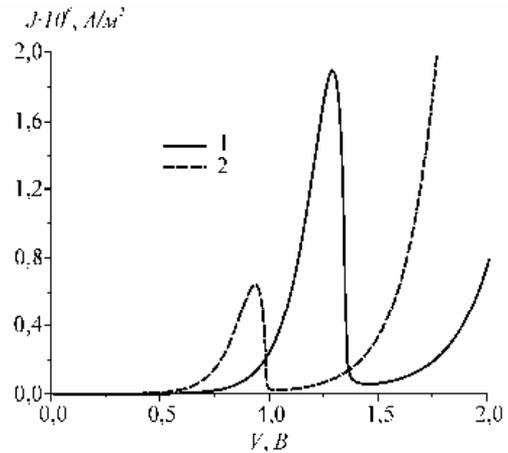


Рис. 3. ВАХ трехбарьерной гетероструктуры GaN/SiC/graphene с вертикальным транспортом при различных ширинах квантовых ям: 1 – двухслойный графен; 2 – трехслойный графен

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью программ, входящих в систему моделирования нанoeлектронных устройств NANODEV [10, 11] и реализующих модели различных приборных гетероструктур на основе двумерных материалов, проведено моделирование полевых транзисторов на двухслойном графене, многобарьерных гетероструктур на основе  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  и  $\text{GaN}/\text{SiC}$ /графен с вертикальным транспортом. Проведенные исследования показали перспективность рассчитанных гетероструктур для дальнейшей разработки новой базы приборов микро- и нанoeлектроники на различных 2D-материалах.

Работа подготовлена по результатам исследований, проведенных в рамках Государственных программ научных исследований Республики Беларусь «Конвергенция», «Материаловедение, новые материалы и технологии», «Фотоника и электроника для инноваций».

## 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 нанoeлектроники. / 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<sub>2</sub> heterostructures / S. Larentis [et al.] // Nanoletters. – 2014. – Vol. 14. – P. 2039–2045.
10. Dielectric 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.).