

Моделирование выходных характеристик гетероструктурных приборов с использованием графена и его модификаций

В. Н. Мищенко

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь,
e-mail: mishchenko@bsuir.by*

С использованием метода Монте-Карло выполнено моделирование выходных характеристик гетероструктурных приборов, содержащих графен и его модификации. Получены основные характеристики таких приборов – зависимости выходного тока стока, коэффициента усиления от величины постоянного напряжения на затворе. Показана перспективность использования гетероструктурных приборов с использованием графена в конструкциях полупроводниковых приборов и устройств высокочастотных диапазонов.

Ключевые слова: графен; водород; фтор; метод Монте-Карло; гетероструктурный прибор.

Modeling of output characteristics of heterostructure devices using graphene and its modifications

V. N. Mishchanka

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus,
e-mail: mishchenko@bsuir.by*

Using the Monte Carlo method, the simulation of the output characteristics of heterostructure devices using graphene and its modifications was performed. The main characteristics of such devices were obtained - the dependences of the output drain current, the gain on the value of the constant voltage on the gate. The prospects of using heterostructure devices using graphene in the designs of high-frequency semiconductor devices are shown.

Key words: graphene; hydrogen; fluorine; Monte Carlo method; heterostructure device.

Введение

Исследования, выполненные в последние годы, показали, что графен, представляющий собой двухмерный слой углерода, обладает совокупностью ряда уникальных свойств и характеристик, например, большой механической жёсткостью и рекордно большой теплопроводностью. Но одно из свойств графена – высокая подвижность носителей заряда, которая является одной из самой высокой среди всех известных материалов, делает его перспективным материалом для использования в наноэлектронике и прогнозирует в будущем возможную замену более изученных и популярных материалов в интегральных микросхемах [1, 2]. Однако для реализации уникальных свойств графена в электронике необходимо разработка и исследование новых гетероструктурных приборов на основе графена и его модификаций с использованием атомов водорода, фтора и других элементов.

1. Метод и особенности моделирования характеристик графена и его модификаций, входящих в состав гетероструктурных приборов

Моделирование из первых принципов графена и его модификаций, входящих в состав гетероструктурных приборов, было выполнено с помощью программных комплексов Quantum Espresso [3] и EPW [4]. Использовались параметризация Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), обобщенное градиентное приближение вида GGA. Были применены следующие параметры моделирования: энергия отсечки волновой функции составляла величину 50 Ry ($1 \text{ Ry} \approx 13,605 \text{ эВ}$), энергия отсечки плотности заряда и потенциалов – 200 Ry, зона Бриллюэна была представлена с помощью сетки Монкхорста-Пака размером $12 \times 12 \times 1$. Для устранения возможных паразитных осцилляций энергии при выполнении моделирования к рассматриваемой структуре сверху добавлялся слой вакуума толщиной $20 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ м}$). Первоначально с использованием программного комплекса Quantum Espresso были выполнены итерационные процедуры, целью которых было определение параметров элементарной ячейки, использованной для описания исследуемой структуры. В процессе моделирования были уточнены координаты атомов углерода, водорода и фтора, значения постоянной кристаллов и ряд других параметров с помощью подпрограмм `vc-relax.x` и `vc.x`, входящих в программный комплекс “Quantum Espresso”. Этап исследований, связанный с самосогласованным и не самосогласованным моделированием с применением подпрограмм `scf.x` и `nscf.x`, позволил получить зонную диаграмму исследуемого соединения. С помощью программного комплекса EPW были получены зависимости интенсивностей рассеивания носителей заряда для графена и его модификаций с использованием атомов водорода и фтора – C_2H_2 или C_2F_2 [5, 6], которые далее были использованы в программе моделирования выходных характеристик исследованного гетероструктурного прибора.

2. Моделирование выходных характеристик гетероструктурных приборов с использованием графена и его модификаций

Для анализа гетероструктурного прибора, который включал в себя области графена и его модификаций с использованием атомов водорода или фтора, была разработана программа, в которой использовался метод Монте-Карло. Рассматривались следующие основные механизмы рассеивания носителей заряда в графене и его модификациях с использованием атомов водорода и фтора – C_2H_2 или C_2F_2 : на оптических фононах, на примесях, на акустических фононах и электронно-электронное рассеивание [5, 6]. Путем моделирования получены основные выходные характеристики – зависимости выходного тока стока от величины постоянного напряжения на затворе, которые позволяют получить зависимости коэффициента усиления исследуемой гетероструктуры. Моделирование выполнялось для значения температуры $T = 300 \text{ К}$, концентрации электронов в слоях графена и GaAs равном $1 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

Исследованная полупроводниковая структура представлена на рис. 1. На рисунке показаны следующие элементы конструкции: 1 – слой графена, 2 – слой диэлектрика из двуокиси кремния, 3 – затвор, 4 – сток, 5 – слой графена, 6 – подложка из материала GaAs, 7 – область модифицированного графена (гидрированного или

фторированного графена – материалы C_2H_2 или C_2F_2 , соответственно). Общая длина структуры, обозначенная как параметр DX , принималась равной 1×10^{-6} м, длина затвора, обозначенная как параметр DZ , – равной $0,2 \times 10^{-6}$ м. Общая ширина структуры (этот параметр не показан на рис. 1.) составила величину 8×10^{-6} м. Величины параметров DY (высота структуры) и DG (толщина слоя графена) принималась равными 1×10^{-8} м и $0,34 \times 10^{-9}$ м, соответственно. Величины параметров DA и DB , которые характеризуют длину контактных областей истока и стока, принимались равными $0,2 \times 10^{-6}$ м. Величины конструктивных параметров L_0 и L , показанных на рис. 1, равнялись $0,2 \times 10^{-6}$ м и $1,0 \times 10^{-8}$ м, соответственно.

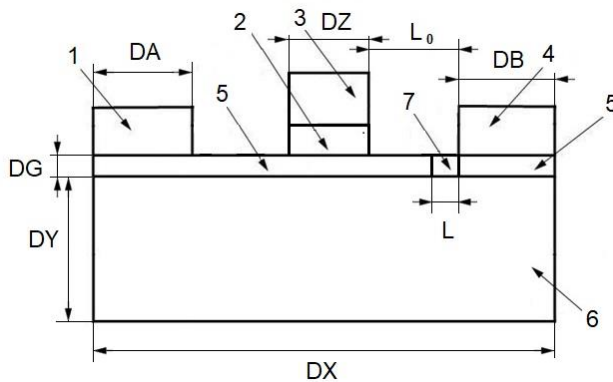


Рис. 1. Структура гетероструктурного прибора, содержащего области графен и его модификации C_2H_2 (C_2F_2)

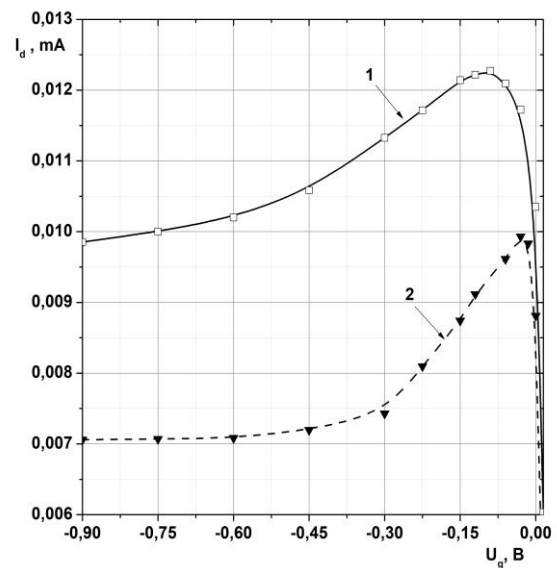


Рис. 2. Зависимости выходного тока стока от величины постоянного напряжения на затворе

На рис. 2 показаны полученные в результате моделирования зависимости выходного тока стока гетероструктурного прибора от величины постоянного напряжения на затворе. Кривая 1 получены для конструкции, представленной на рис. 1, которая содержит область графена (элемент 5) и его модификации с использованием атомов водорода (элемент 7). При этом толщина слоя двуоксида кремния (элемент 2 на рис. 1) составляла величину 10×10^{-9} м. Кривая 2 получена для обычной конструкции, представленной на рис. 1, но при отсутствии областей из материалов графен (элемент 5 на рис. 1), и гидрированный или фторированный графен (элемент 7 на рис. 1). Кривые 1 и 2 на рис. 2 получены при одинаковом напряжении на стоке, равном 0,9 В, а напряжение на затворе изменялось в диапазоне значений от $-0,9$ В до 0,05 В. Общие конструктивные размеры структуры и ряд других параметров, не отмеченных на рис. 1, при расчете кривых 1 и 2, показанных на рис. 2, не менялись. Исследования показали, что замена материала C_2H_2 на C_2F_2 при вы-

бранном значении параметра L не приводит к существенному изменению величины выходного тока стока, и на рис. 2 эта замена не показана в виде дополнительной кривой. Использование рассмотренной конструкции гетероструктурного прибора позволяет получить максимальное значение коэффициента усиления по напряжению, равное приблизительно 32,8 дБ при выборе напряжения на затворе, равного 0,05 В.

Анализ кривых 1 – 2, представленных на рис. 2, и других расчетных данных показывает, что выходной ток гетероструктурного прибора, который содержит области графена и его модификации с использованием атомов водорода и фтора, имеет большую величину по сравнению с конструкцией, которая не имеет графена и гидрированного или фторированного графена. При этом обеспечиваются более высокие значения крутизны выходной характеристики и коэффициента усиления по напряжению.

Заключение

Установлено, что применение графена и его модификаций с использованием атомов водорода или фтора позволяет получить более высокие значения выходного тока гетероструктурного прибора (приблизительно, на 30–50 %), а также высокие значения крутизны выходной характеристики и коэффициента усиления в сравнении с аналогичной структурой, которая не использует графен и его модификации. Эти обстоятельства, учитывая высокую подвижность и скорость носителей заряда в слое графена, должны обеспечить хорошие выходные характеристики и широкий частотный диапазон работы разрабатываемых с использованием графена и его модификаций новых функциональных приборов и устройств.

Библиографические ссылки

1. Electric field effect in atomically thin carbon film / K. S. Novoselov [et al.] // *Science*. 2004. V. 306. P. 666–669.
2. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane / D. C. Elias [et al.] // *Science*, 2009. Vol. 323. P. 610–616.
3. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi [et al.] // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009. V. 21. P. 395502.
4. Poncé S. EPW: electron–phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions / S. Poncé, E. R. Margine, C. Verdi // *Computer Physics Communications*. 2016. Vol. 209. P. 116–133.
5. *Mishchanka V. N.* First-principles modeling of the properties of graphene modified with fluorine atoms. *Doklady BGUIR*. 2023. Vol. 21, iss. 4. P. 71–75.
6. *Murav'ev V. V., Mishchanka V. N.* Ab-initio simulation of hydrogenated graphene properties. // *Doklady BGUIR*. 2021. Vol, 19, iss. 8. P. 5–9.