

Обзорная статья
УДК 621.382
DOI: <https://doi.org/10.18127/j22250980-202301-05>

Моделирование приборных структур наноэлектроники на основе 2D-материалов

И.И. Абрамов¹, Н.В. Коломейцева², В.А. Лабунув³, И.А. Романова⁴, И.Ю. Щербакова⁵

¹⁻⁵ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
(г. Минск, Республика Беларусь)

^{1, 2, 4, 5} nanodev@bsuir.edu.by, ³ labunov@bsuir.by

Аннотация

Постановка проблемы. Впервые полевой графеновый транзистор (ПГТ) был предложен в 2007 г. Тогда в качестве канала транзистора использовался однослойный графен, в дальнейшем с этой же целью – двухслойный графен. Графен демонстрирует уникальные электронные свойства, которые позволяют надеяться на улучшение ряда характеристик приборов. Многие исследования направлены на реализацию ПГТ в промышленности. Для теоретического исследования и дальнейшего внедрения в практику ПГТ необходима разработка их моделей. Пока не существует модели, обладающей достаточной степенью универсальности, чтобы описать физические процессы, протекающие в приборе, с наибольшей точностью, и при этом отличающейся простотой в использовании. Разработка адекватных моделей приборных структур на основе графена характеризуется высокой степенью сложности.

Цель. Представить обзор исследований по моделированию приборных структур на основе 2D-материалов, проведенных в БГУИР.

Результаты. Дан обзор исследований по моделированию приборных структур наноэлектроники на основе 2D-материалов, проведенных в БГУИР. Результаты получены с использованием разработанных численных комбинированных моделей формализма волновых функций. Приведены новые примеры, иллюстрирующие возможности предложенных моделей. Данный обзор является продолжением и дополнением других обзоров авторов, опубликованных ранее [1–3], посвященных моделированию резонансно-туннельных приборных структур на основе углеродных наноматериалов и графена, а также полевых транзисторов (ПТ) на основе однослойного графена.

Практическая значимость. Исследование эффекта резонансного туннелирования для разработки современных электронных устройств играет заметную роль для применения в нанотехнологиях.

Ключевые слова

Полевой транзистор, двухслойный графен, выходные характеристики, передаточные характеристики, комбинированная модель, диффузионно-дрейфовая модель, моделирование, гетероструктура с вертикальным транспортом, 2D-материал

Работа выполнена в рамках Государственных программ научных исследований "Конвергенция", "Материаловедение, новые материалы и технологии", "Фотоника и электроника для инноваций" Республики Беларусь.

Для цитирования

Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунув В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю. Моделирование приборных структур наноэлектроники на основе 2D-материалов // Нанотехнологии: разработка, применение – XXI век. 2023. Т. 15. № 1. С. 54–68. DOI: <https://doi.org/10.18127/j22250980-202301-05>

A brief version in English is given at the end of the article

Введение

Впервые полевой графеновый транзистор (ПГТ) был предложен в 2007 году [4]. Тогда в качестве канала транзистора был взят однослойный графен, в дальнейшем с этой же целью был использован двухслойный графен. Одним из применений ПГТ является высокочастотная электроника терагерцевого диапазона. При использовании двухслойного графена в качестве канала транзистора наблюдается более низкая подвижность носителей заряда, чем при использовании однослойного графена. Однако полевые транзисторы (ПТ) на двухслойном графене обладают более высоким коэффициентом усиления по напряжению, а также улучшенными значениями токов насыщения [5].

Графен демонстрирует уникальные электронные свойства, которые позволяют надеяться на улучшение ряда характеристик приборов. Многие исследования посвящены реализации ПГТ в промышленности, например [6, 7]. Наиболее важной в этой области проблемой является открытие запрещенной зо-

ны в графене, что позволяет снизить межзонное туннелирование. Существует несколько способов ее решения. Например, открытие запрещенной зоны путем приложения вертикального электрического поля к каналу ПТ на двухслойном графене. Другой способ – легирование графена, однако в этом случае настраиваемость ширины запрещенной зоны трудно достижима.

Разработка моделей ПТ необходима для их теоретического исследования и дальнейшего внедрения в практику. Существует ряд моделей ПТ на двухслойном графене, например, аналитическая модель, основанная на аппроксимации эффективной массы в предположении баллистического транспорта [8], аналитическая модель ПТ на двухслойном графене [9], позволяющая рассчитывать постоянный ток, переменный ток ПТ, компактная модель [10] и др. Пока не существует модели, обладающей достаточной степенью универсальности, чтобы описать физические процессы, протекающие в приборе с наибольшей точностью и при этом отличающейся простотой в использовании. Разработка адекватных моделей приборных структур на основе графена характеризуется высокой степенью сложности.

Ц е л ь р а б о т ы – представить обзор исследований по моделированию приборных структур на основе 2D-материалов, проведенных в БГУИР.

В других работах авторов статьи (например, [2, 11, 12]) была предложена диффузионно-дрейфовая модель ПТ на однослойном графене. В данной статье предложена квантовая диффузионно-дрейфовая модель ПТ на двухслойном графене. Обе модели представляют собой комбинацию электрической и физико-топологической моделей. Главное их отличие друг от друга заключается в расчете квантовой емкости, и, как следствие этого, в расчете ВАХ. Для предложенной модели получена аппроксимация электростатического потенциала в канале транзистора, учитывающая открытие запрещенной зоны в двухслойном графене. Модели также имеют различие в расчете подвижности носителей заряда и остаточной плотности носителей заряда, что необходимо учесть, принимая во внимание исследования [13].

Исследование эффекта резонансного туннелирования для разработки современных электронных устройств играет заметную роль для применения в нанотехнологиях. Среди всех характерных особенностей, связанных с резонансным туннелированием, отрицательное дифференциальное сопротивление (ОДС), нелинейность и способность приборов работать при терагерцевых частотах являются наиболее важными, включая пики или ступени на ВАХ.

На протяжении последних десятилетий резонансно-туннельные приборы на основе GaAs и ряда других материалов доминировали [1] как в области развития физики резонансного туннелирования, так и практического применения. Тем не менее в последние несколько лет наблюдается повышенный интерес к резонансно-туннельным приборам на основе нитридов III группы полупроводников и возможностям их практического применения.

Современные резонансно-туннельные диоды (РТД) являются самыми быстродействующими твердотельными электронными устройствами на сегодняшний день. Они демонстрируют субпикосекундное время туннелирования около 35 фс. Это быстродействие совместно с ОДС, которое является их отличительной чертой, делает такие РТД привлекательными для производства компактных, ультрабыстрых терагерцевых осцилляторов [14]. Семейство нитридов III группы полупроводников к тому же обеспечивает новые возможности с точки зрения мощности и температурной стабильности приборов. Резонансно-туннельные приборы могут увеличивать производительность цепей, в которых требуется высокая скорость переключения и ОДС. В настоящее время РТД на основе GaN, например, обеспечивают бистабильность и улучшают характеристики сверхбыстрой энергонезависимой памяти [15].

Модель ПТ на двухслойном графене

В качестве канала ПТ может быть использован как однослойный, так и двухслойный графен. Предложенная ранее квантовая диффузионно-дрейфовая модель ПТ на основе однослойного графена была описана подробно в [11, 16]. В данной работе будет рассмотрена модель ПТ на основе двухслойного графена [17] и ее отличие от модели ПТ на однослойном графене. В модели предложена аппроксимация электростатического потенциала в канале прибора, учитывающая открытие настраиваемой ширины запрещенной зоны в двухслойном графене под действием приложенного вертикального электрического поля.

Рассмотрим разработанную модель ПТ на основе двухслойного графена. Согласно классификации, приведенной в [18–20], модель может быть отнесена к классу комбинированных моделей. На рис. 1 показано поперечное сечение исследуемого двухзатворного ПТГ.

В двухзатворном ПТ на двухслойном графене кремниевая подложка и диэлектрик выполняют функцию нижнего затвора. Слой диэлектрика располагается сверху графенового канала, формируя верхний затвор в дополнение к нижнему. В качестве диэлектриков используются SiO₂, Al₂O₃, HfO₂, h-BN и др. Под действием смещений, прикладываемых к верхнему и нижнему затворам, возникает вертикальное поле, которое открывает запрещенную зону в двухслойном графене. ПТ представляется в виде электрической схемы, на которой двухслойный графен обозначается квантовой емкостью. В модели ПТ на двухслойном графене квантовая емкость определяется по формуле

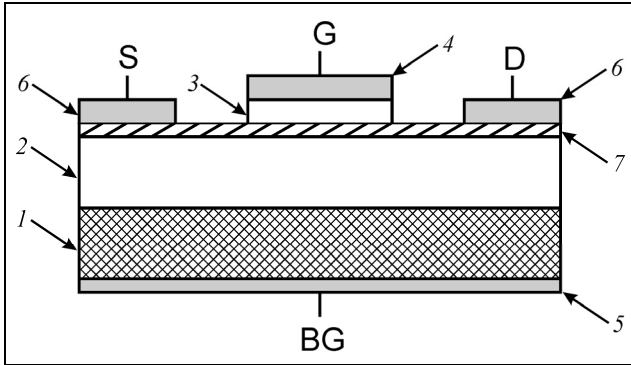


Рис. 1. Поперечное сечение двухзатворного ПТГ на основе графена: S – исток; G – верхний затвор; BG – нижний затвор; D – сток; 1 – подложка; 2 – диэлектрик нижнего затвора; 3 – диэлектрик верхнего затвора; 4 – металл верхнего затвора; 5 – металл нижнего затвора; 6 – металл истока и стока; 7 – одно- или двухслойный графен

Fig. 1. Cross-section of two-gate field-effect transistor (FET) based on graphene: S – source; G – top gate; BG – back gate; D – drain; 1 – substrate; 2 – back gate dielectric; 3 – top gate dielectric; 4 – top gate metal; 5 – back gate metal; 6 – source and drain metal; 7 – mono- or bilayer graphene

где q – заряд электрона; m_{eff}^* – эффективная масса в графене; \hbar – постоянная Планка, деленная на 2π .

$$C_q = \frac{q^2 m_{\text{eff}}^*}{\pi \hbar^2}, \quad (1)$$

Далее емкости затворов находятся по формуле

$$C_g = \frac{C_q C_{\text{in}}}{C_q + C_{\text{in}}}, \quad (2)$$

где C_{in} – емкость, сформированная между затвором и двухслойным графеном.

Расчет настраиваемой ширины запрещенной зоны E_g в двухслойном графене осуществляется

согласно методу, описанному в [21]. Приложение напряжения к верхнему и нижнему затворам позволяет настроить поля D_{top} и D_{back} независимо друг от друга. Согласно [21] запишем выражение

$$E_g = kD, \quad (3)$$

где k – параметр модели ($k = 8,74 \cdot 10^{-11}$ эВ·м/В); D – усредненное поле смещения:

$$D = \frac{D_{\text{top}} + D_{\text{back}}}{2}. \quad (4)$$

Далее с применением итерационного метода рассчитывается самосогласованный электростатический потенциал в канале транзистора [22]:

$$qV = \frac{C_{gt}(V_{\text{teff}} - V_a) + C_{gb}(V_{\text{beff}} - V_a)}{C_{gt} + C_{gb} + \alpha C_q},$$

$$\alpha = 1 + \frac{E_g/2 - k_B T}{qV}, \text{ если } qV \leq -E_g/2,$$

$$\alpha = 1 - \frac{E_g/2 - k_B T}{qV}, \text{ если } qV \geq E_g/2,$$

$$\alpha = 0, \text{ если } -E_g/2 < qV < E_g/2,$$
(5)

где C_{gt} , C_{gb} – емкости верхнего и нижнего затворов; α – коэффициент квантовой емкости; V_{teff} – эффективное напряжение на верхнем затворе; V_{beff} – эффективное напряжение на нижнем затворе; qV – электростатический потенциал канала; V_a изменяется в диапазоне от 0 до V_{ch} , где V_{ch} – полное падение напряжения в канале; L – длина канала; k_B – постоянная Больцмана; T – температура окружающей среды. Расчет осуществляется самосогласованно так, чтобы поправка электростатического потенциала стала меньше заданной величины.

Эффективную подвижность μ_{eff} в канале ПТ на основе двухслойного графена, учитывающую подвижности электронов и дырок, можно получить из общего соотношения [5]:

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{Q_n \mu_n + Q_p \mu_p + n_{\text{pud}} h}{Q_n + Q_p + n_{\text{pud}}}, \quad (6)$$

где Q_n , Q_p – заряды электронов и дырок; μ_n , μ_p – подвижности электронов и дырок; h – согласующий параметр модели; n_{pud} – остаточная плотность носителей заряда.

Рассмотрим *три случая* для вычисления эффективной подвижности носителей заряда:

1) при $qV \leq -E_g/2$ носителями заряда являются только дырки:

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{Q_p \mu_p + n_{\text{pud}} h q}{Q_p + n_{\text{pud}}}; \quad (7)$$

2) при $qV \geq E_g/2$ носителями заряда являются только электроны:

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{Q_n \mu_n + n_{\text{pud}} h}{Q_n + n_{\text{pud}}}; \quad (8)$$

3) при $-E_g/2 < qV < E_g/2$ носителями заряда являются как электроны, так и дырки (соотношение (6)).

В двухслойном графене остаточную плотность носителей заряда в электронном и дырочном слоях, включая эффект открытия запрещенной зоны, можно записать в виде

$$n_{\text{pud}} = \frac{2m_{\text{eff}}^*}{\pi \hbar^2} k_B T \left\{ \ln \left[1 + \exp \left(\frac{-E_g/2 + \Delta}{k_B T} \right) \right] + \ln \left[1 + \exp \left(\frac{-E_g/2 - \Delta}{k_B T} \right) \right] \right\}, \quad (9)$$

где Δ – неоднородность электростатического потенциала в канале; n_{pud} показывает прямую зависимость энергии запрещенной зоны от смещения на верхнем и нижнем затворах ПТТ.

Для вычисления тока стока I_d применяется формула, выведенная из квантовой диффузионно-дрейфовой модели:

$$I_d = \frac{W \int_0^{V_{ch}} \mu Q dV}{L + \left| \int_0^{V_{ch}} \frac{\mu}{V_{\text{sat}}} dV \right|}, \quad (10)$$

где W – ширина канала; V_{sat} – скорость насыщения; Q – общая плотность носителей заряда листа графена.

В случае расчета выходных ВАХ после нахождения тока стока I_d перерасчитывается напряжение стока V_d с учетом падений напряжений на сопротивлениях стока R_d и истока R_s по формуле

$$V_d = V_{ch} + (R_d + R_s)I_d. \quad (11)$$

В общем случае $R_d \neq R_s$ и не равны 0.

При расчете передаточных характеристик необходимо находить ток стока I_d при заданном напряжении стока V_d . В случае, когда R_d и R_s не равны 0, для учета падений напряжений на этих сопротивлениях необходимо применять оптимизационный метод, т.е. перерасчитывать ток стока I_d , для того чтобы получить приблизительно постоянное и заданное напряжение на стоке V_d . В предложенной модели для решения этой задачи использован метод дихотомии [2].

Комбинированная модель РТД на основе GaN

Были исследованы перспективные подходы построения моделей приборов на основе гетероструктур, содержащих GaN, с вертикальным транспортом, и показано, что для построения достаточно адекватных моделей необходим учет влияния как активных, так и пассивных областей прибора [18, 23], а также разработан принцип построения численных комбинированных физико-топологических моделей на основе формализма волновых функций и полуклассического подхода с учетом особенностей конструкций исследуемых приборов [24–26].

Преимущество формализма волновых функций заключается в его экономичности, что делает возможным его применение для расчетов на ПЭВМ. Уравнения Шредингера и Пуассона были выбраны в качестве исходных уравнений для построения моделей приборов на основе гетероструктур с вертикальным транспортом.

В частности, была предложена комбинированная модель приборов на основе гетероструктур, содержащих GaN, с вертикальным транспортом. Модель основана на численном самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. Эта модель была адаптирована для приборов как с вертикальным, так и с горизонтальным транспортом [16]. Она позволяет рассчитать электрические характеристики таких структур с учетом влияния протяженных приконтактных (пассивных) областей. Сформулирована соответствующая система уравнений, описывающих используемую модель.

В используемой модифицированной численной модели прибор представляется состоящим из трех видов областей: контактов, приконтактных областей и активной области. Влияние контактов описывается с помощью контактной разности потенциалов. В приконтактных областях, включающих и спейсерные слои, используется больцмановская аппроксимация статистики Ферми–Дирака. В активной области самосогласованно решаются уравнения Пуассона и Шредингера.

Разработаны системы уравнений комбинированной физико-математической модели приборов на основе гетероструктур, содержащих GaN, SiC, Si и графен, с вертикальным транспортом, позволяющие проводить расчеты электрических характеристик указанных приборов.

В модели для нахождения самосогласованного потенциала решается система уравнений Шредингера и Пуассона:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) + U \psi = E \psi, \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_S \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = -q(N_D - n), \quad (13)$$

где x – пространственная координата; ψ – волновая (огibaющая) функция; U – потенциальная энергия электрона; E – энергия электрона; ε_S – относительная диэлектрическая проницаемость среды; ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума; Φ – электростатический потенциал; q – величина заряда электрона; N_D – концентрация ионизированных доноров; n – концентрация электронов.

Сформулированы внутренние и внешние граничные условия, проведена аппроксимация исходных уравнений модели приборов на основе гетероструктур, содержащих GaN, SiC, Si и графен, с вертикальным

транспортом. Границы раздела областей проходят через узлы сетки пространственной дискретизации. Внутренние граничные условия включают в себя непрерывность волновой функции и ее производной на границах барьеров и квантовой ямы. Конечно-разностная аппроксимация уравнения Шредингера осуществляется с применением интегро-интерполяционного подхода Тихонова–Самарского. Учет внешних граничных условий осуществляется по методу внутренних граничных условий. Метод аппроксимации внешних граничных условий проводится на равномерной сетке пространственной дискретизации.

Затем решается система уравнений Шредингера в активной области прибора. В результате решения находятся волновые функции, затем коэффициент прохождения и плотность тока для определенной ширины квантовой ямы.

Результаты моделирования

С применением описанной квантовой диффузионно-дрейфовой модели проводился расчет электрических характеристик двухзатворных ПТ на двухслойном графене (рис. 1). Расчеты осуществлялись при температуре $T = 300$ К. На графиках приводятся результаты для плотности тока стока (в дальнейшем просто ВАХ).

Расчеты проведены для двухзатворного ПТТ1 с длиной и шириной канала, равными 4 мкм [27] при температуре 300 К. Верхним подзатворным диэлектриком является Al_2O_3 толщиной 8 нм (диэлектрическая проницаемость $9,1\epsilon_0$), нижним подзатворным диэлектриком – SiO_2 толщиной 90 нм (диэлектрическая проницаемость $3,9\epsilon_0$). Эффективная масса носителей заряда в двухслойном графене задавалась равной $0,0311m_0$, подвижность электронов – $0,026 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, подвижность дырок – $0,0397 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, неоднородность электростатического потенциала в двухслойном графене $31 \cdot 10^{-3}$ эВ [13], другие параметры для расчетов приведены в [27].

Квантовая емкость двухслойного графена без учета коэффициента α равна $2,08 \cdot 10^{-2}$ Кл/В. Коэффициент α изменяется в диапазоне от нуля до единицы. На рис. 2 показан график зависимости квантовой емкости с учетом коэффициента α от приложенного смещения между стоком и истоком при фиксированном напряжении на нижнем затворе, равном -60 В, и при различных напряжениях на верхнем затворе. Кривая 1 соответствует напряжению $-1,5$ В, при котором открытие запрещенной зоны в графене равно 161 мэВ, кривая 2 – напряжению -1 В, при котором открытие запрещенной зоны в графене равно 186 мэВ.

На рис. 3 показаны результаты расчетов выходных характеристик исследуемого прибора, полученные с помощью предложенной модели при фиксированном напряжении на нижнем затворе -60 В при

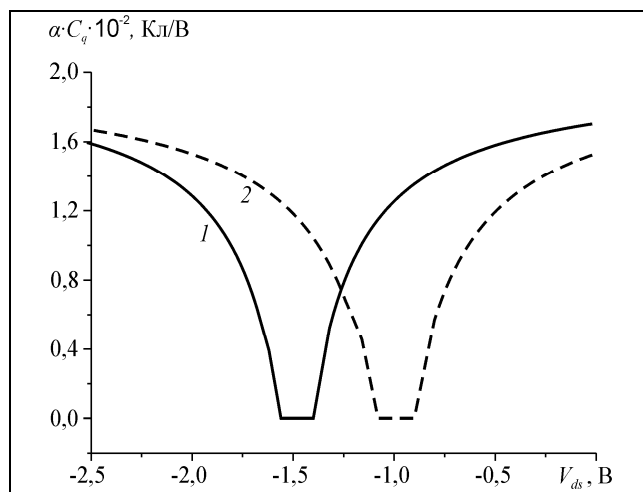


Рис. 2. Графики зависимости квантовой емкости с учетом коэффициента α от приложенного смещения между стоком и истоком V_{ds} при фиксированных напряжениях на нижнем затворе, равном -60 В, при различных напряжениях на верхнем затворе

Fig. 2. Quantum capacitance versus applied voltage between drain and source V_{ds} with taking into account coefficient α for fixed back gate voltage $V_{bg} = -60$ В and different top gate voltages

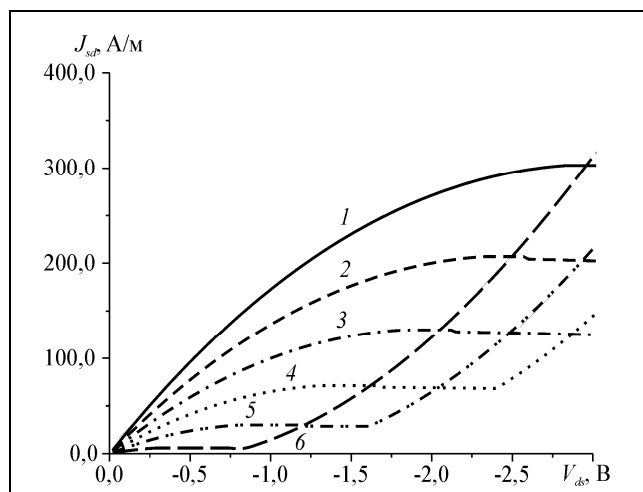


Рис. 3. Графическое представление ВАХ ПТ1 на двухслойном графене при различных напряжениях на верхнем затворе

Fig. 3. IV-characteristics of FET1 based on bilayer graphene for different top gate voltages: 1 – $V_{tg} = -3$ В; 2 – $V_{tg} = -2,5$ В; 3 – $V_{tg} = -2,0$ В; 4 – $V_{tg} = -1,5$ В; 5 – $V_{tg} = -1,0$ В; 6 – $V_{tg} = -0,5$ В

различных напряжениях на верхнем затворе. Кривая 1 соответствует значению $V_{tg} = -3$ В; кривая 2 – $V_{tg} = -2,5$ В; кривая 3 – $V_{tg} = -2,0$ В; кривая 4 – $V_{tg} = -1,5$ В; кривая 5 – $V_{tg} = -1,0$ В; кривая 6 – $V_{tg} = -0,5$ В. Приложение вертикального напряжения между верхним и нижним затворами транзистора приводит к открытию запрещенной зоны в двухслойном графене и улучшению тока насыщения на характеристиках прибора. Например, открытие запрещенной зоны в графене равно $E_g = 86$ мэВ при напряжении на верхнем затворе $V_{tg} = -3$ В, $E_g = 111$ мэВ при $V_{tg} = -2,5$ В, $E_g = 136$ мэВ при $V_{tg} = -2$ В, $E_g = 161$ мэВ при $V_{tg} = -1,5$ В, $E_g = 186$ мэВ при $V_{tg} = -1$ В, $E_g = 210$ мэВ при $V_{tg} = -0,5$ В.

Были также проведены расчеты передаточных характеристик двухзатворного ПГТ1 с учетом сопротивлений на стоке $R_d = 100$ Ом и истоке $R_s = 100$ Ом.

Проведен расчет выходных характеристик ПГТ2 на двухслойном графене [7]. 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 диэлектрическая проницаемость $9,1\epsilon_0$, толщина нижнего подзатворного диэлектрика 85 нм (SiO_2) и его диэлектрическая проницаемость $3,9\epsilon_0$, сопротивление на стоке 200 Ом, сопротивление на истоке 200 Ом, температура окружающей среды 300 К.

На рис. 5 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 согласуются с результатами экспериментальных данных работы [7].

На основе полученных результатов моделирования двух ПТ на двухслойном графене можно сделать следующие выводы. В обоих случаях полученные результаты согласуются качественно и количественно (по порядку полученных величин) с результатами экспериментальных данных. Однако для ПГТ1 получены хорошие результаты по току насыщения, в то время как ПГТ2 показывает просто непрерывное нарастание тока стока. Следовательно, предложенная модель ПТ на двухслойном графене позволит предсказать ВАХ прибора до проведения эксперимента на основе задания конструктивных параметров прибора, условий окружающей среды и приложенных смещений. Неточности в расчетах могут возникать вследствие приблизительного задания некоторых согласующих параметров, а именно: подвижностей носителей заряда, сопротивлений стока и истока, а также напряжений Дирака на верхнем и нижнем затворах.

В экспериментальных работах отмечены недостатки имеющихся образцов:

1) при приложении слишком высоких напряжений к затворам ПТ происходит растрескивание подзатворных диэлектриков [28];

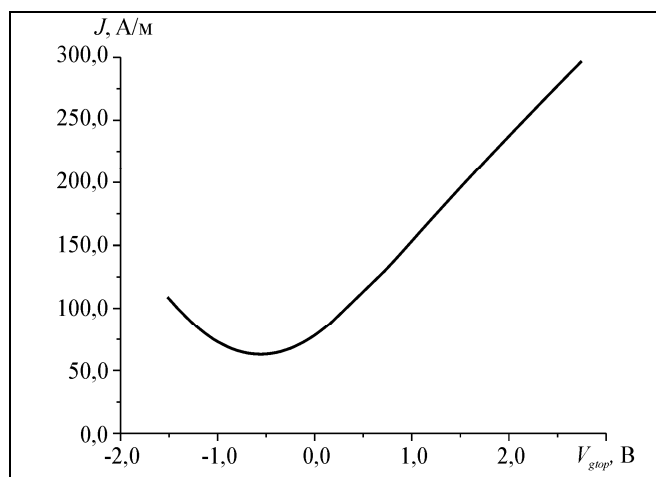


Рис. 4. Графическое представление передаточных ВАХ двухзатворного ПГТ1

Fig. 4. Transfer IV-characteristic of two-gate graphene FET1

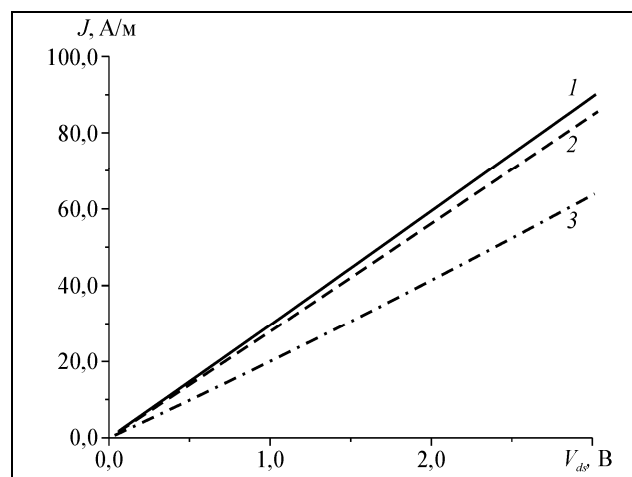


Рис. 5. Графическое представление выходные характеристики ПГТ2 на основе двухслойного графена при различных напряжениях на нижнем затворе

Fig. 5. Output characteristics of FET2 based on bilayer graphene for different back gate voltages

- 2) наличие больших токов утечки [29];
- 3) отличия характеристик, вызванные различиями в укладке слоев графена (лучшие образцы получены при использовании так называемой укладки Бернулли) [30];
- 4) эффекты разогрева, влияющие на рабочие характеристики прибора [31].

В предложенной модели расчет открытия запрещенной зоны в двухслойном графене предполагает использование двухслойного графена с укладкой Бернулли. Предложенная модель может облегчить экспериментальные поиски наилучшего решения поставленной задачи.

В работе также были исследованы резонансно-туннельные структуры, как с горизонтальным, так и с вертикальным транспортом, на основе различных материальных систем, а именно: РТД на двухслойном графене на подложке SiO_2 с горизонтальным транспортом, РТД на гетероструктурах с вертикальным транспортом на основе материальной системы $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$, гетероструктур на основе графен/hBN с вертикальным транспортом, РТД на основе GaN/AlGaN с вертикальным транспортом. Проведена модификация модели, основанной на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона [32] с учетом различия исходных данных о гетероструктурах. Подробно модель описана в предыдущих работах авторов для РТД с горизонтальным транспортом [33, 34], а для случая РТД на GaN/AlGaN с вертикальным транспортом – ранее в разделе «Комбинированная модель РТД на основе GaN».

Проведено исследование влияния ширин потенциальных барьеров на ВАХ (точнее зависимости плотности тока от напряжения) четырехбарьерных РТД на основе графена на подложке SiO_2 . Моделирование проводилось при следующих основных параметрах: высота барьеров $H_b = 3,58$ эВ, эффективная масса двухслойного графена – $0,041m_0$ (m_0 – масса покоя электрона), ширины квантовых ям – 3,4 нм, ширины приконтактных областей – 17 нм, концентрация примеси в приконтактных областях $N_D = 7,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$, температура окружающей среды задавалась равной 300 К.

В качестве примера на рис. 6 показано влияние ширин барьеров на ВАХ четырехбарьерных РТД на двухслойном графене на подложке SiO_2 для трех случаев, когда ширины барьеров равны 1,2 нм (кривая 1), 1,3 нм (кривая 2) и 1,4 нм (кривая 3). Остальные параметры моделирования соответствуют приведенным в [35–39]. Как следует из рис. 6, увеличение ширин барьеров четырехбарьерных структур на основе графена на подложке SiO_2 приводит к уменьшению плотностей пиковых токов для первого пика, но при этом для второго и третьего пиков значения плотностей токов увеличиваются.

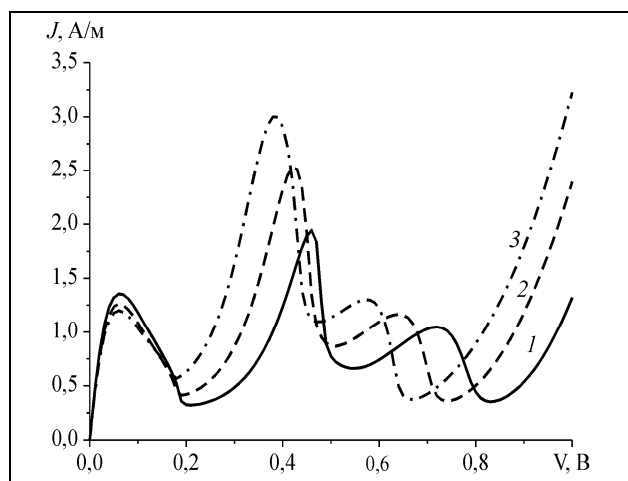


Рис. 6. Графическое представление ВАХ четырехбарьерного РТД на основе гетероструктуры графен/ SiO_2 для различных ширин барьеров

Fig. 6. IV-characteristics of four-barrier RTD based on heterostructure graphene/ SiO_2 for different barrier widths

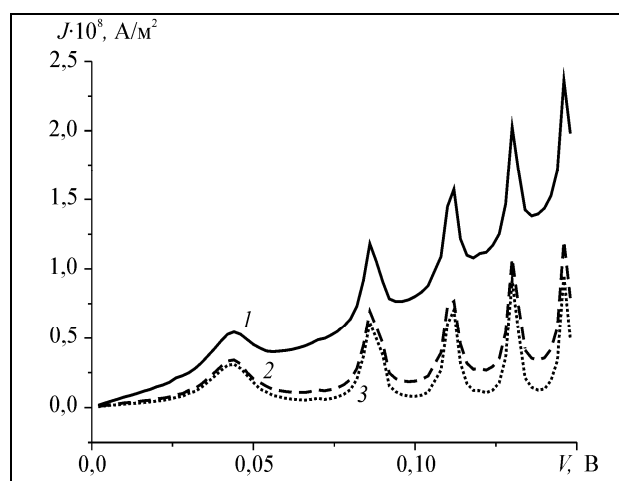


Рис. 7. Графическое представление ВАХ двухбарьерной резонансно-туннельной гетероструктуры $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$ с вертикальным транспортом при различных значениях уровня Ферми

Fig. 7. IV-characteristics of resonant tunneling heterostructure $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$ with the vertical transport for different values of Fermi level

Далее проведены расчеты ВАХ РТД на гетероструктурах с вертикальным транспортом на основе материальной системы $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$. При расчетах были заданы следующие параметры: высота потенци-

альных барьеров в исследуемой структуре 3,3 эВ (SiO_2) [40], ширина барьеров 1,7 нм, ширина квантовой ямы (MoS_2) 3,6 нм, что соответствует шести слоям MoS_2 [41], диэлектрическая проницаемость SiO_2 $3,9\epsilon_0$, диэлектрическая проницаемость MoS_2 $7,2\epsilon_0$. Приконтактные области MoS_2 протяженностью 20,0 нм легированы донорной примесью. В расчетах использована эффективная энергия оптических фононов $\hbar\Omega = 55$ мэВ. На рис. 7 показаны ВАХ РТД на гетероструктуре $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$, рассчитанные с помощью модели [1, 3], модифицированной для случая РТД на гетероструктурах с вертикальным транспортом при различных значениях уровня Ферми. 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.

Для реализации модели с учетом свойств двумерных материалов было адаптировано разработанное ранее программное обеспечение, предназначенное для моделирования резонансно-туннельных структур на основе углеродных наноматериалов [1, 42]. В исследуемых гетероструктурах диэлектрическая проницаемость материалов, ширина потенциальных барьеров и квантовых ям зависят от числа слоев [41]. Были проведены расчеты характеристик гетероструктур с вертикальным транспортом на основе материальной системы графен/hBN при различных положениях границ раздела «сшивки» решения уравнений Шредингера и Пуассона.

Показано, что расширение границ раздела «сшивки» за пределы активной области, включающей потенциальные барьеры и квантовые ямы, приводит к незначительному увеличению пикового тока и уменьшению пикового напряжения (рис. 8).

Возможности модели продемонстрированы на примере моделирования двухбарьерной гетероструктуры h-BN/графен с барьерами шириной 1,0 нм и расположенной между ними квантовой ямой шириной 2,7 нм. Другие параметры даны в [32]. На рис. 9 показаны ВАХ исследуемой структуры при различных значениях уровня Ферми. Кривая 1 соответствует значению уровня Ферми $E_F = 1,4$ эВ, кривая 2 – $E_F = 1,42$ эВ, кривая 3 – $E_F = 1,45$ эВ.

При увеличении уровня Ферми пиковые токи увеличиваются, пиковые напряжения смещаются в область более высоких значений, а область отрицательной дифференциальной проводимости становится менее выраженной вплоть до ее полного исчезновения при дальнейшем увеличении E_F , т.е. носители заряда обладают достаточной энергией для преодоления потенциальных барьеров.

Двухбарьерные РТД являются простейшими приборами, в которых может быть исследован резонансно-туннельный транспорт. На основе разработанной модели был проведен расчет ВАХ РТД на

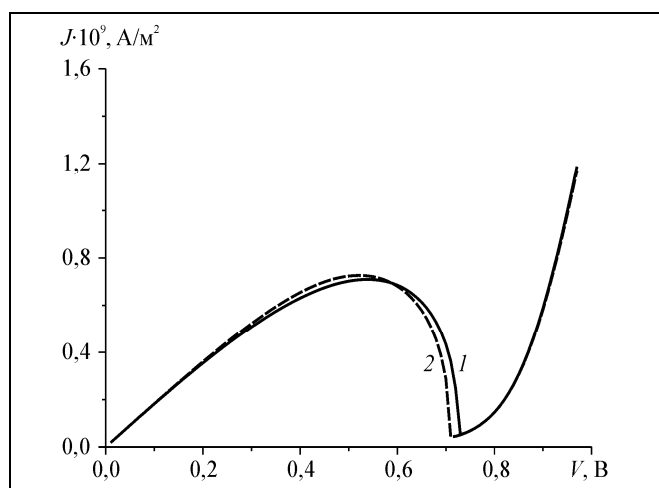


Рис. 8. Графическое представление ВАХ гетероструктуры с вертикальным транспортом на основе графен/hBN при различных положениях границ раздела «сшивки»: 1 – $L=2$ Å; 2 – $L=50$ Å

Fig. 8. IV-characteristics of heterostructure based on graphene/hBN with the vertical transport for different positions of lacing boundary: 1 – $L=2$ Å; 2 – $L=50$ Å

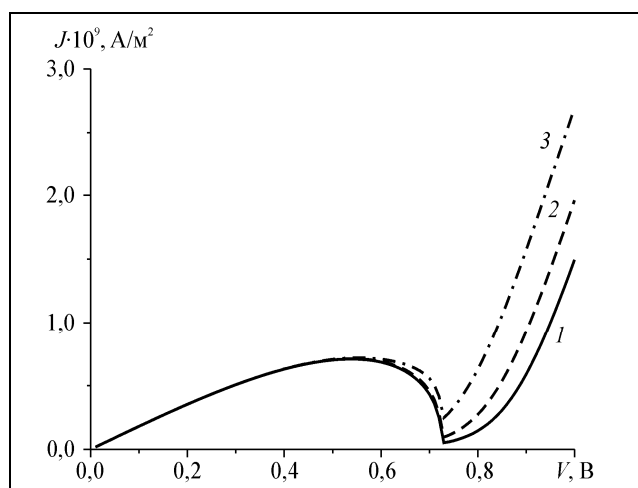


Рис. 9. Графическое представление ВАХ исследуемой структуры при различных значениях уровня Ферми

Fig. 9. IV-characteristics of investigated structures for different values of Fermi level

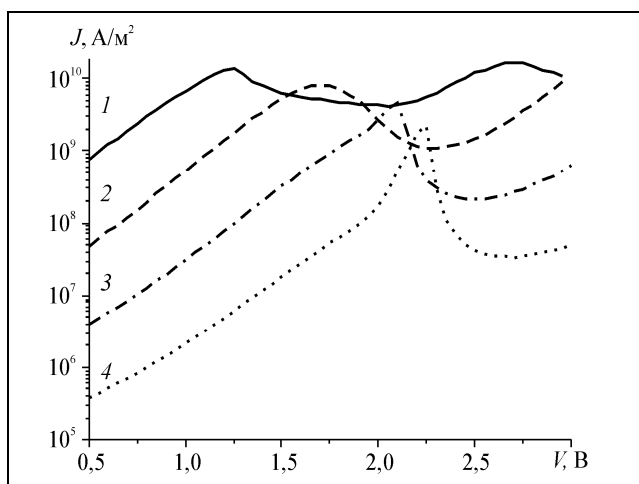


Рис. 10. Графики зависимости плотности тока от напряжения для двухбарьерного РТД на основе GaN/Al_xGa_{1-x}N: 1 – x = 0,2; 2 – x = 0,4; 3 – x = 0,6; 4 – x = 0,8

Fig. 10. Current density versus voltage for double-barrier RTD based on GaN/Al_xGa_{1-x}N: 1 – x = 0.2; 2 – x = 0.4; 3 – x = 0.6; 4 – x = 0.8

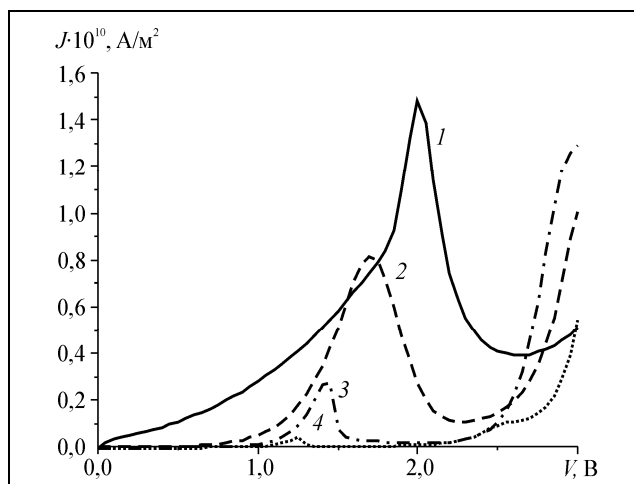


Рис. 11. Графическое представление результатов расчета ВАХ РТД на гетероструктуре GaN/Al_{0.4}Ga_{0.6}N для случаев с различной шириной потенциальных барьеров: 1 – BW = 0,5 нм; 2 – BW = 1,0 нм; 3 – BW = 1,5 нм; 4 – BW = 2,0 нм

Fig. 11. IV-characteristics of RTD based on heterostructure GaN/Al_{0.4}Ga_{0.6}N for different potential barrier widths: 1 – BW = 0.5 nm; 2 – BW = 1.0 nm; 3 – BW = 1.5 nm; 4 – BW = 2.0 nm

основе GaN/AlGaN с наноразмерными активными областями с вертикальным транспортом. Исследуемый прибор представляет собой активную область квантовой ямы из нелегированного GaN, ограниченную барьерами Al_xGa_{1-x}N. Проведены расчеты ВАХ РТД для случаев различных значений мольной доли алюминия (x) в барьерах (для x = 0,2; x = 0,4; x = 0,6; x = 0,8). Гетероструктура отделена от легированных контактных слоев n⁺-GaN спейсерными слоями из нелегированного GaN. В ходе моделирования исследовалось влияние концентрации алюминия в барьерах на характеристики прибора.

В результате показано, что значение пиковых плотностей тока снижается, в то время как контрастность ВАХ и значение приложенного напряжения резонанса увеличиваются с повышением содержания алюминия в барьерах (рис. 10).

Также 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. 11 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.

Далее 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. 12 показывают, что плотности тока пика и долины уменьшаются, а контрастность ВАХ увеличивается по мере увеличения ширины квантовой ямы.

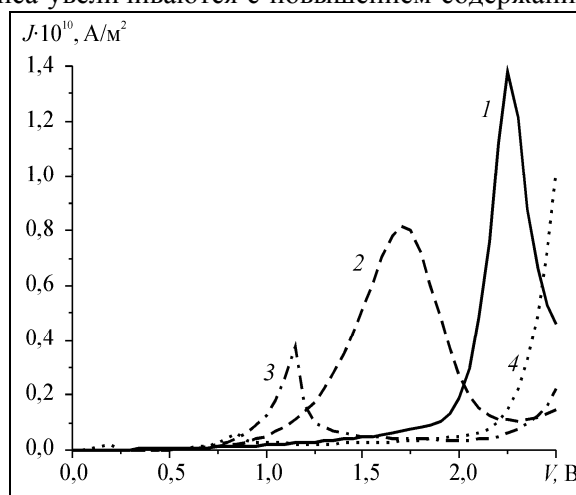


Рис. 12. Графическое представление результатов расчета ВАХ РТД на гетероструктуре GaN/Al_{0.4}Ga_{0.6}N для случаев с различной шириной квантовой ямы: 1 – QW = 0,5 нм; 2 – QW = 1,0 нм; 3 – QW = 1,5 нм; 4 – QW = 2,0 нм

Fig. 12. Calculation results of JV-characteristics of RTD based on heterostructure GaN/Al_{0.4}Ga_{0.6}N for different quantum well widths: 1 – QW = 0.5 nm; 2 – QW = 1.0 nm; 3 – QW = 1.5 nm; 4 – QW = 2.0 nm

Заключение

Дан обзор исследований по моделированию приборных структур на основе 2D-материалов, проведенных в БГУИР. В частности, разработан метод расчета квантовой емкости в двухзатворном ПТ на двухслойном графене. Модель позволяет определить энергию запрещенной зоны в двухслойном графене и рассчитать величину квантовой емкости в приборе в зависимости от приложенных смещений к верхнему и нижнему затворам транзистора. Предложенная модель ПТ 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 ВАХ двухзатворного ПТ на двухслойном графене.

С помощью программы, реализующей модель РТД на вертикальных гетероструктурах на основе двумерных материалов, проведено моделирование РТД на материальной системе $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$. Также проведено исследование влияния различных факторов на характеристики РТД на основе GaN/AlGaN [43]. 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.

Также рассмотрено моделирование гетероструктур на основе 2D-материалов с вертикальным транспортом с использованием модели, основанной на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. Проведено исследование влияния уровня Ферми на ВАХ РТД на двухбарьерной гетероструктуре $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$. Проведено исследование влияния уровня Ферми на электрические характеристики гетероструктуры $\text{h-BN}/\text{графен}$ с вертикальным транспортом.

На основе представленных расчетов можно сделать вывод, что при помощи изменения содержания Al в барьерах, а также управления размерами активных областей прибора можно влиять на его рабочие характеристики. Таким образом, может быть осуществлен подбор оптимальной структуры прибора для заданных требований.

Программы, реализующие модель РТД и модель ПТ, включены в систему моделирования нанoeлектронных устройств NANODEV [44, 45], разрабатываемую в БГУИР с 1995 года для ПЭВМ.

Список источников

1. *Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов В. А., Романова И. А.* Моделирование резонансно-туннельных приборных структур на основе углеродных наноматериалов // Нанотехнологии, разработка, применение – XXI век. 2017. Т. 9. № 3. С. 3–11.
2. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Моделирование полевых графеновых транзисторов с одним и двумя затворами в различных режимах функционирования // Нанотехнологии, разработка, применение – XXI век. 2018. № 3. С. 16–24.
3. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А.* Моделирование резонансно-туннельных приборных структур на основе углеродных наноматериалов // Нанотехнологии, разработка, применение – XXI век. 2022. Т. 14. № 2. С. 61–68.
4. *Lemme M.C., Echtermeyer T.J., Baus M., Kurz H.* A graphene field-effect device. IEEE Electron Device Letters. 2007. V. 28. № 4. P. 282–284.
5. *Tian J.* Theory modeling and implementation of graphene field-effect transistor. Ph.D. dissertation, School of Electronic Engineering and Computer Science, Queen Mary University of London, London, United Kingdom. 2017. 52 p.
6. *He Z., Yu C., Liu Q., Song X., Gao X., Guo J., Zhou C., Cai S., Feng Z.* High temperature RF performances of epitaxial bilayer graphene field-effect transistors on SiC substrate. Carbon. 2020. V. 164. № 30. P. 435–441.
7. *Pandey H., Aguirre-Morales J.-D., Kataria S., Fregonese S., Passi V., Iannazzo M., Zimmer T., Alarcon E., Lemme M. C.* Enhanced intrinsic voltage gain in artificially stacked bilayer CVD graphene field effect transistors. Ann. Phys. (Berlin). 2017. V. 529. № 11. P. 1700106-1–9.
8. *Cheli M., Fiori G., Iannaccone G.* A semiclassical model of bilayer graphene field-effect transistor. IEEE Trans. on elect. Dev. 2009. V. 56. № 12. P. 2927–2986.
9. *Ryzhii V., Ryzhii M., Satou A., Otsuji T., Kirova N.* Device model for graphene bilayer field-effect transistor. J. Appl. Phys. 2009. V. 105. P. 104510-1–9.
10. *Aguirre-Morales D.* Characterization and modeling of graphene-based transistors towards high frequency circuit applications. Thesis. University of Bordeaux. 2016. Chapter 2. Bilayer GFET compact model. P. 77–100.

11. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Влияние диэлектриков затворов полевых графеновых транзисторов на вольт-амперные характеристики // Микроэлектроника. 2021. Т. 50. № 2. С. 127–134.
12. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А.* Моделирование полевых графеновых транзисторов с одним и двумя затворами // Нано- и микросистемная техника. 2017. Т. 19. № 12. Р. 714–721.
13. *Zhu W., Perebeinos V., Freitag M., Avouris P.* Carrier scattering, mobilities and electrostatic potential in mono-, bi- and tri-layer graphenes. *Phys. Rev. B.* 2009. V. 80. P. 35402.
14. *High-Frequency GaN Electronic Devices / Edited by P. Fay, D. Jena, P. Maki.* Springer. 2019. 309 p.
15. *Singh M.M., Siddiqui M.J., Saxena A.* Comparative simulation of GaAs and GaN based double barriers-resonant tunneling diode. *Procedia Computer Science.* 2016. V. 85. P. 581–587.
16. *Abramov I.I., Labunov V.A., Kolomeitseva N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu.* Simulation of graphene field-effect transistors and resonant tunneling diodes based on carbon nanomaterials. *Proc. SPIE.* 2019. V. 11022. P. 110220F-1–11.
17. *Abramov I.I., Labunov V.A., Kalameitseva N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu.* Quantum drift-diffusion models for dual-gate field-effect transistors based on mono- and bilayer graphene. *Proc. of SPIE.* 2022. V. 12157. P. 121570X-1–6.
18. *Абрамов И.И.* Основы моделирования элементов микро- и нанoeлектроники. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2016. 444 с.
19. *Абрамов И.И.* Лекции по моделированию элементов интегральных схем. М. – Ижевск: НИЦ РХД. 2005. 152 с.
20. *Абрамов И.И.* Лекции по моделированию элементов интегральных схем микроэлектроники. Учеб. пособие. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2012. 116 с.
21. *Zhang Y., Tang T.-T., Girit C., Hao Z., Martin M. C., Zettl A., Crommie M.F., Shen Y. R., Wang F.* Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene. *Nature.* 2009. V. 459. № 7248. P. 820–823.
22. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Метод расчета квантовой емкости в модели полевых транзисторов на двухслойном графене // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо2022. Вып. 4: Сб. науч. тр. 32-й Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 11–17 сентября 2022 / Севастопольский гос. университет. С. 175–176.
23. *Абрамов И.И.* Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. Часть I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34–37.
24. *Абрамов И.И., Гончаренко И.А.* Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Электромагнитные волны и электронные системы. 2002. Т. 7. № 3. С. 54–60.
25. *Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Коломейцева Н.В.* Комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39. № 6. С. 1138–1145.
26. *Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Коломейцева Н.В.* Комбинированная двухзонная модель резонансно-туннельного диода // Физика и техника полупроводников. 2007. Т. 41. № 11. С. 1395–1400.
27. *Szafrank B.N., Fiori G., Schall D., Neumaier D., Kurz H.* Current saturation and voltage gain in bilayer graphene field effect transistors. *Nano Lett.* 2012. V. 12. № 8. P. 1324–1328.
28. *Xia F., Farmer D. B., Lin Y.-M., Avouris P.* Graphene field-effect transistors with high on/off current ratio and large transport band gap at room temperature. *NanoLett.* 2010. V. 10. P. 715–718.
29. *Kanayama K., Nagashio K.* Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer grapheme. *Scientific reports.* 2015. V. 5. P.15789-1–9.
30. *Pandey H., Kataria S., Passi V., Iannazzo M., Alarcon E., Lemme M.C.* Improved voltage gain in mechanically stacked bilayer graphene field effect transistors. *Eurosci-ULIS.* 2016. P. 143–146.
31. *Feijoo P.C., Pasadas F., Bonmann M., Otto M., Neumaier D., Stake J., Jimenez D.* Does carrier velocity saturation help to enhance f_{max} in graphene field-effect transistors? *Nanoscale Adv.* 2020. V. 2. P. 4179–4186.
32. *Abramov I.I., Labunov V.A., Kalameitseva N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu.* Simulation of various nanoelectronic devices based on 2D materials. *Proc. of SPIE.* 2022. V. 12157. P. 121570U-1–9.
33. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Численное моделирование трехбарьерных резонансно-туннельных диодов на основе графена // Ural Radio Engineering Journal. 2019. Т. 3. № 4. С. 343–355.
34. *Абрамов И.И., Лабунов В.А., Коломейцева Н.В., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Теоретическое исследование полевых транзисторов и резонансно-туннельных диодов на основе графена // Материалы VIII Междунар. науч. конф. «Материалы и структуры современной электроники», Минск, 10–12 октября 2018. С. 219–222.
35. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Численное моделирование трехбарьерных резонансно-туннельных диодов на основе графена // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо2019. Вып. 1: Сб. науч. тр. 29-й Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 8–14 сентября 2019. Севастополь: Севастопольский гос. ун-т. С. 328.
36. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Численное моделирование резонансно-туннельных диодов на основе двумерных материалов // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо2020. Вып. 2: Сб. науч. тр. 30-й Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 6–12 сентября 2020. Севастополь: Севастопольский гос. ун-т. С. 281.
37. *Абрамов И.И., Лабунов В.А., Коломейцева Н.В., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Моделирование приборных структур на графене с применением системы NANODEV // Материалы и структуры современной электроники: материалы IX Междунар. науч. конф., Минск, Беларусь, 14–16 октября, 2020. С. 256–260.

38. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Численная модель гетероструктур с вертикальным транспортом на основе двумерных материалов // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо2021. Вып. 3: Сб. науч. тр. 31-й Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 5–11 сентября 2021. Севастополь: Севастопольский гос. ун-т, С. 263.
39. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Моделирование резонансно-туннельных диодов на основе GaN/AlGaN с вертикальным транспортом // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо2021. Вып. 3: Сб. науч. тр. 31-й Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 5–11 сентября 2021. Севастополь: Севастопольский гос. ун-т, С. 264.
40. *Larentis S., Tolsma J. R., Fallahzad B., Dillen D. C., Kim K., MacDonald A. H., Tutuc E.* Band offset and negative compressibility in Graphene-MoS₂ heterostructures. *Nanoletters*. 2014. V. 14. P. 2039–2045.
41. *Laturia A., Van de Put M. L., Vandenberghe W. G.* Dielectric properties of hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides: from monolayer to bulk. *Nature. 2D Materials and Applications*. 2018. V. 4. № 28. P. 1–6.
42. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Моделирование вертикальных гетероструктур на основе 2D материалов // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо2022. Вып. 4: Сб. науч. тр. 32-й Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 11–17 сентября 2022. Севастополь: Севастопольский гос. ун-т, С. 169.
43. *Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунов В.А., Романова И.А., Щербакова И.Ю.* Моделирование характеристик РТД на основе GaN/AlGaN с вертикальным транспортом // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: КрыМиКо2022. Вып. 4: Сб. науч. тр. 32-й Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 11–17 сентября 2022. Севастополь: Севастопольский гос. ун-т, С. 177.
44. *Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Игнатенко С.А., Королёв А.В., Новик Е.Г., Рогачёв А.И.* Система моделирования нанoeлектронных приборов – NANODEV // *Микроэлектроника*. 2003. Т. 32. № 2. С. 124–133.
45. *Abramov I.I., Baranoff A.L., Goncharenko I.A., Kolomejtseva N.V., Bely Y.L., Shcherbakova I.Y.* A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities. *Proc. of SPIE*. 2010. V. 7521. P. 75211E1-1–11.

Информация об авторах

Игорь Иванович Абрамов – д. ф.-м.н., профессор

SPIN-код: 3634-8475

Наталья Владимировна Коломейцева – ст. науч. сотрудник

SPIN-код: 3440-2718

Владимир Архипович Лабунов – д.т.н., академик НАНБ, академик РАН, профессор, зав. лабораторией

SPIN-код: не представлен

Ирина Анатольевна Романова – науч. сотрудник

SPIN-код: не представлен

Ирина Юрьевна Щербакова – науч. сотрудник

SPIN-код: не представлен

Статья поступила в редакцию 01.02.2023

Одобрена после рецензирования 14.02.2023

Принята к публикации 20.02.2023

Simulation of nanoelectronic device structures based on 2D materials

I.I. Abramov¹, N.V. Kalameitsava², V.A. Labunov³, I.A. Romanova⁴, I.Yu. Shcherbakova⁵

^{1–5} Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Belarus)

^{1, 2, 4, 5} nanodev@bsuir.edu.by, ³ labunov@bsuir.by

Abstract

A review of studies on the simulation of nanoelectronics device structures based on 2D materials carried out at BSUIR is given. The proposed review is a continuation and supplement of our previous reviews devoted to the simulation of resonant tunneling device structures based on carbon nanomaterials and graphene, as well as field-effect transistors (FETs) based on single-layer graphene, published earlier [1–3].

In particular, models of FETs based on bilayer graphene and heterostructures based on 2D materials with vertical and horizontal transport are described. The proposed models make it possible to calculate the electrical characteristics of the structures under study, taking into account environmental conditions, structures, and applied bias. Studies on the calculation of the electrostatic potential in the channel of a double-gate graphene field-effect transistor have been carried out, the quantum capacitance values have been calculated depending on the band gap energy in bilayer graphene when a vertical bias is applied to the transistor gates, as well as the current-voltage characteristics (IV-characteristics) of the device.

The model of resonant tunneling structures has been modified according to the possibility of heterostructures containing 2D materials with vertical transport simulation. Several structures based on graphene/hBN, SiO₂/MoS₂ material systems have been simulated. The influence of various parameters on the IV-characteristics of the studied device structures is shown.

Keywords

Field-effect transistor, bilayer graphene, output characteristics, transfer characteristics, combined model, drift-diffusion model, simulation, heterostructures with vertical transport, 2D-material

For citation

Abramov I.I., Kalameitsava N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Simulation of nanoelectronic device structures based on 2D materials. *Nanotechnology: development and applications – XXI century*. 2023. V. 15. № 1. P. 54–68. DOI: <https://doi.org/10.18127/j22250980-202301-05> (in Russian)

References

- Abramov I. I., Kolomejceva N. V., Labunov V. A., Romanova I. A. Modelirovanie rezonansno-tunnel'nyh pribornyh struktur na osnove uglerodnyh nanomaterialov. *Nanotekhnologii, razrabotka, primeneniye – XXI vek*. 2017. T. 9. № 3. C. 3–11 (in Russian).
- Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Modelirovanie polevyh grafenovyh tranzistorov s odnim i dvumya zatvorami v razlichnyh rezhimakh funkcionirovaniya. *Nanotekhnologii, razrabotka, primeneniye – XXI vek*. 2018. № 3. C. 16–24 (in Russian).
- Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A. Modelirovanie rezonansno-tunnel'nyh pribornyh struktur na osnove uglerodnyh nanomaterialov. *Nanotekhnologii, razrabotka, primeneniye – XXI vek*. 2022. T. 14. № 2. C. 61–68 (in Russian).
- Lemme M.C., Echtermeyer T.J., Baus M., Kurz H. A graphene field-effect device. *IEEE Electron Device Letters*. 2007. V. 28. № 4. P. 282–284.
- Tian J. Theory modeling and implementation of graphene field-effect transistor. Ph.D. dissertation, School of Electronic Engineering and Computer Science, Queen Mary University of London, London, United Kingdom. 2017. 52 p.
- He Z., Yu C., Liu Q., Song X., Gao X., Guo J., Zhou C., Cai S., Feng Z. High temperature RF performances of epitaxial bilayer graphene field-effect transistors on SiC substrate. *Carbon*. 2020. V. 164. № 30. P. 435–441.
- Pandey H., Aguirre-Morales J.-D., Kataria S., Fregonese S., Passi V., Iannazzo M., Zimmer T., Alarcon E., Lemme M. C. Enhanced intrinsic voltage gain in artificially stacked bilayer CVD graphene field effect transistors. *Ann. Phys. (Berlin)*. 2017. V. 529. № 11. P. 1700106–1–9.
- Cheli M., Fiori G., Iannaccone G. A semiclassical model of bilayer graphene field-effect transistor. *IEEE Trans. on elect. Dev.* 2009. V. 56. № 12. P. 2927–2986.
- Ryzhii V., Ryzhii M., Satou A., Otsuji T., Kirova N. Device model for graphene bilayer field-effect transistor. *J. Appl. Phys.* 2009. V. 105. P. 104510–1–9.
- Aguirre-Morales D. Characterization and modeling of graphene-based transistors towards high frequency circuit applications. Thesis. University of Bordeaux. 2016. Chapter 2. Bilayer GFET compact model. P. 77–100.
- Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Vliyaniye dielektrikov zatvorov polevyh grafenovyh tranzistorov na vol't-ampernyye harakteristiki. *Mikroelektronika*. 2021. T. 50. № 2. C. 127–134 (in Russian).
- Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A. Modelirovanie polevyh grafenovyh tranzistorov s odnim i dvumya zatvorami. *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika*. 2017. T. 19. № 12. P. 714–721 (in Russian).
- Zhu W., Perebeinos V., Freitag M., Avouris P. Carrier scattering, mobilities and electrostatic potential in mono-, bi- and tri-layer graphenes. *Phys. Rev. B*. 2009. V. 80. P. 35402.
- High-Frequency GaN Electronic Devices. Edited by P. Fay, D. Jena, P. Maki. Springer. 2019. 309 p.
- Singh M.M., Siddiqui M.J., Saxena A. Comparative simulation of GaAs and GaN based double barriers-resonant tunneling diode. *Procedia Computer Science*. 2016. V. 85. P. 581–587.
- Abramov I.I., Labunov V.A., Kolomejceva N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Simulation of graphene field-effect transistors and resonant tunneling diodes based on carbon nanomaterials. *Proc. SPIE*. 2019. V. 11022. P. 110220F–1–11.
- Abramov I.I., Labunov V.A., Kalameitsava N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Quantum drift-diffusion models for dual-gate field-effect transistors based on mono- and bilayer graphene. *Proc. of SPIE*. 2022. V. 12157. P. 121570X–1–6.
- Abramov I.I. *Osnovy modelirovaniya elementov mikro- i nanoelektroniki*. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2016. 444 c. (in Russian).

19. Abramov I.I. Lekcii po modelirovaniyu elementov integral'nyh skhem. M. – Izhevsk: NIC RHD. 2005. 152 s. (in Russian).
20. Abramov I.I. Lekcii po modelirovaniyu elementov integral'nyh skhem mikroelektroniki. Uchebnoe posobie. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2012. 116 c. (in Russian).
21. Zhang Y., Tang T.-T., Girit C., Hao Z., Martin M. C., Zettl A., Crommie M.F., Shen Y. R., Wang F. Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene. *Nature*. 2009. V. 459. № 7248. P. 820–823.
22. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Metod rascheta kvantovoj emkosti v modeli polevyh tranzistorov na dvuslojnom grafene. SVCh-tehnika i telekommunikacionnye tekhnologii: KryMiKo2022. Vyp. 4: Sb. nauch. tr. 32-j Mezhdunar. nauch.-tehn. konf., Sevastopol', 11–17 sentyabrya 2022. Sevastopol'skij gos. universitet. S. 175–176 (in Russian).
23. Abramov I.I. Problemy i principy fiziki i modelirovaniya pribornyh struktur mikro- i nanoelektroniki. Chast' I. Osnovnye polozheniya. Nano-i mikrosistemnaya tekhnika. 2006. № 8. S. 34–37 (in Russian).
24. Abramov I.I., Goncharenko I.A. Chislennaya kombinirovannaya model' rezonansno-tunnel'nogo dioda. Elektromagnitnye volny i elektronnyye sistemy. 2002. T. 7. № 3. C. 54–60 (in Russian).
25. Abramov I.I., Goncharenko I.A., Kolomejceva N.V. Kombinirovannaya model' rezonansno-tunnel'nogo dioda. Fizika i tekhnika poluprovodnikov. 2005. T. 39. № 6. S. 1138–1145 (in Russian).
26. Abramov I.I., Goncharenko I.A., Kolomejceva N.V. Kombinirovannaya dvuhzonnaya model' rezonansno-tunnel'nogo dioda. Fizika i tekhnika poluprovodnikov. 2007. T. 41. № 11. S. 1395–1400 (in Russian).
27. Szafranek B.N., Fiori G., Schall D., Neumaier D., Kurz H. Current saturation and voltage gain in bilayer graphene field effect transistors. *Nano Lett.* 2012. V. 12. № 3. P. 1324–1328.
28. Xia F., Farmer D. B., Lin Y.-M., Avouris P. Graphene field-effect transistors with high on/off current ratio and large transport band gap at room temperature. *NanoLett.* 2010. V. 10. P. 715–718.
29. Kanayama K., Nagashio K. Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer graphene. *Scientific reports*. 2015. V. 5. P. 15789-1–9.
30. Pandey H., Kataria S., Passi V., Iannazzo M., Alarcon E., Lemme M.C. Improved voltage gain in mechanically stacked bilayer graphene field effect transistors. *Eurosol-ULIS*. 2016. P. 143–146.
31. Feijoo P.C., Pasadas F., Bonmann M., Otto M., Newmaier D., Stake J., Jimenez D. Does carrier velocity saturation help to enhance f_{max} in graphene field-effect transistors? *Nanoscale Adv.* 2020. V. 2. P. 4179–4186.
32. Abramov I.I., Labunov V.A., Kalameitsava N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Simulation of various nanoelectronic devices based on 2D materials. *Proc. of SPIE*. 2022. V. 12157. P. 121570U-1–9.
33. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Chislennoe modelirovanie trekhbar'nyh rezonansno-tunnel'nyh diodov na osnove grafena. *Ural Radio Engineering Journal*. 2019. T. 3. № 4. C. 343–355 (in Russian).
34. Abramov I.I., Labunov V.A., Kolomejceva N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Teoreticheskoe issledovanie polevyh tranzistorov i rezonansno-tunnel'nyh diodov na osnove grafena. *Materialy VIII Mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii «Materialy i struktury sovremennoj elektroniki»*, Minsk, 10–12 oktyabrya 2018. S. 219–222 (in Russian).
35. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Chislennoe modelirovanie trekhbar'nyh rezonansno-tunnel'nyh diodov na osnove grafena. SVCh-tehnika i telekommunikacionnye tekhnologii: KryMiKo2019. Vyp. 1: Sb. nauch. tr. 29-j Mezhdunar. nauch.-tehn. konf., Sevastopol', 8–14 sentyabrya 2019. Sevastopol': Sevastopol'skij gos. un-t. S. 328 (in Russian).
36. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Chislennoe modelirovanie rezonansno-tunnel'nyh diodov na osnove dvumernyh materialov. SVCh-tehnika i telekommunikacionnye tekhnologii: KryMiKo2020. Vyp. 2: Sb. nauch. tr. 30-j Mezhdunar. nauch.-tehn. konf., Sevastopol', 6–12 sentyabrya 2020. Sevastopol': Sevastopol'skij gos. un-t. S. 281 (in Russian).
37. Abramov I.I., Labunov V.A., Kolomejceva N.V., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Modelirovanie pribornyh struktur na grafene s primeneniem sistemy NANODEV. *Materialy i struktury sovremennoj elektroniki: materialy IX Mezhdunar. nauch. konf., Minsk, Belarus'*, 14–16 oktyabrya, 2020. S. 256–260 (in Russian).
38. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Chislennaya model' geterostruktur s vertikal'nym transportom na osnove dvumernyh materialov. SVCh-tehnika i telekommunikacionnye tekhnologii: KryMiKo2021. Vyp. 3: Sb. nauch. tr. 31-j Mezhdunar. nauch.-tehn. konf., Sevastopol', 5–11 sentyabrya 2021. Sevastopol': Sevastopol'skij gos. un-t. S. 263 (in Russian).
39. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Modelirovanie rezonansno-tunnel'nyh diodov na osnove GaN/AlGaIn c vertikal'nym transportom. SVCh-tehnika i telekommunikacionnye tekhnologii: KryMiKo2021. Vyp. 3: Sb. nauch. tr. 31-j Mezhdunar. nauch.-tehn. konf., Sevastopol', 5–11 sentyabrya 2021. Sevastopol': Sevastopol'skij gos. un-t, S. 264 (in Russian).
40. Larentis S., Tolsma J. R., Fallahzad B., Dillen D. C., Kim K., MacDonald A. H., Tutuc E. Band offset and negative compressibility in Graphene-MoS₂ heterostructures. *Nanoletters*. 2014. V. 14. P. 2039–2045.
41. Laturia A., Van de Put M. L., Vandenberghe W. G. Dielectric properties of hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides: from monolayer to bulk. *Nature. 2D Materials and Applications*. 2018. V. 4. № 28. P. 1–6.
42. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Modelirovanie vertikal'nyh geterostruktur na osnove 2D materialov. SVCh-tehnika i telekommunikacionnye tekhnologii: KryMiKo2022. Vyp. 4: Sb. nauch. tr. 32-j Mezhdunar. nauch.-tehn. konf., Sevastopol', 11–17 sentyabrya 2022. Sevastopol': Sevastopol'skij gos. un-t, S. 169 (in Russian).
43. Abramov I.I., Kolomejceva N.V., Labunov V.A., Romanova I.A., Shcherbakova I.Yu. Modelirovanie harakteristik RTD na osnove GaN/AlGaIn c vertikal'nym transportom. SVCh-tehnika i telekommunikacionnye tekhnologii: KryMiKo2022. Vyp. 4: Sb. nauch. tr. 32-j Mezhdunar. nauch.-tehn. konf., Sevastopol', 11–17 sentyabrya 2022. Sevastopol': Sevastopol'skij gos. un-t. S. 177 (in Russian).
44. Abramov I.I., Goncharenko I.A., Ignatenko S.A., Korolev A.V., Novik E.G., Rogachev A.I. Sistema modelirovaniya nanoelektronnyh priborov – NANODEV. *Mikroelektronika*. 2003. T. 32. № 2. S. 124–133 (in Russian).
45. Abramov I.I., Baranoff A.L., Goncharenko I.A., Kolomejtseva N.V., Bely Y.L., Shcherbakova I.Y. A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities. *Proc. of SPIE*. 2010. V. 7521. P. 75211E1-1–11.

Information about the authors

Igor I. Abramov – Dr. Sc. (Phys.-Math.), Professor

Natalia V. Kalameitsava – Senior Research Scientist

Vladimir A. Labunov – Academician of NASB, Academician of RAS, Dr. Sc. (Eng.), Professor, Head of Laboratory

Irina A. Romanova – Research Scientist

Irina Yu. Shcherbakova – Research Scientist

The article was submitted 01.02.2023

Approved after reviewing 14.02.2023

Accepted for publication 20.02.2023