

# Теоретическое исследование трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ с вертикальным транспортом

Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунюк В. А.

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

**Аннотация:** Проведено моделирование трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с вертикальным транспортом с потенциальными барьерами  $\text{WSe}_2$  и различными по ширине квантовыми ямами  $\text{MoS}_2$  с использованием разработанного программного обеспечения, предназначенного для моделирования резонансно-туннельных гетероструктур с вертикальным транспортом на основе двумерных материалов.

## 1. Введение

Одним из самых востребованных 2D-материалов среди дихалькогенидов является  $\text{MoS}_2$ . На практике получены гетероструктуры, содержащие  $\text{MoS}_2$  и представляющие интерес для создания новых нанoeлектронных приборов. В частности, в структуре графен/ $\text{MoS}_2$ /графен [1] несколько атомных слоев  $\text{MoS}_2$  играют роль потенциального барьера и могут использоваться в полевых транзисторах. Гетероструктуры на основе  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ ,  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  с вертикальным транспортом могут использоваться для создания резонансно-туннельных диодов.

В данной работе рассматривается моделирование гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с вертикальным транспортом с использованием предложенной самосогласованной модели.

## 2. Модель. Результаты моделирования

В работе предложена модификация модели резонансно-туннельных структур, предназначенная для моделирования гетероструктур, содержащих 2D-материалы, с вертикальным транспортом. Модель является комбинированной и основана на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона [2-6]. Она позволяет рассчитывать самосогласованный потенциал, коэффициент прохождения, вольт-амперные характеристики исследуемых приборных структур.

В данной работе исследованы трехбарьерные гетероструктуры на основе  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ . При расчетах данных гетероструктур необходимо учитывать различные нюансы при задании параметров материалов. В связи с тем, что структуры обладают размерами толщиной в несколько атомных слоев, важно учитывать, что диэлектрическая проницаемость материала, ширина запрещенной зоны зависит от числа слоев в материале. А также то, что для каждого 2D-материала толщина одного атомного слоя различна [7].

Рассмотрим подробнее трехбарьерные гетероструктуры с чередованием барьеров  $\text{WSe}_2$  с расположенными между ними квантовыми ямами, состоящими из нескольких слоев  $\text{MoS}_2$ . С помощью комбинированной модели резонансно-туннельных диодов, модифицированной на случай учета вертикального транспорта, было проведено моделирование приборных гетероструктур, состоящих из барьеров толщиной в 3 атомных слоя  $\text{WSe}_2$  и квантовых ям из слоев  $\text{MoS}_2$  с приконтактными областями  $\text{MoS}_2$  толщиной в 20 нм, легированными донорной примесью  $2 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$ . Построены графики зависимости плотности тока от напряжения при комнатной температуре. На рис.1 и рис.2 показаны вольт-амперные характеристики исследованных гетероструктур с различными ширинами квантовых ям толщиной от 3 до 6 слоев  $\text{MoS}_2$ . Исследования показали, что данные гетероструктуры обладают ярко выраженной областью отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП) в тех случаях, когда квантовая яма состоит из 3 слоев  $\text{MoS}_2$  (рис.1, кривая 1), 4 слоев  $\text{MoS}_2$  (рис.1, кривая 2) и 5 слоев  $\text{MoS}_2$  (рис.2, кривая 1). При увеличении размера квантовых ям до 6 слоев (рис.2, кривая 2) с теми же прочими параметрами гетероструктуры область ОДП практически исчезает, т.е. характеристика показывает нарастание плотности тока. Получены следующие соотношения пикового тока к току долины: 1) 1,29 для гетероструктуры с трехслойной квантовой ямой; 2) 3,05 для гетероструктуры с четырехслойной квантовой ямой; 3) 2,0 для гетероструктуры с пятислойной квантовой ямой. Наилучшим соотношением обладает гетероструктура  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с четырехслойной квантовой ямой.

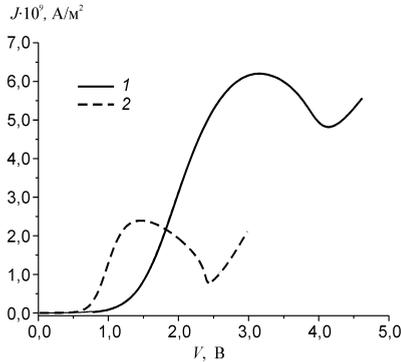


Рис. 1. Вольт-амперные характеристики трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с различными ширинами квантовой ямы: 1) 3 слоя  $\text{MoS}_2$ ; 2) 4 слоя  $\text{MoS}_2$

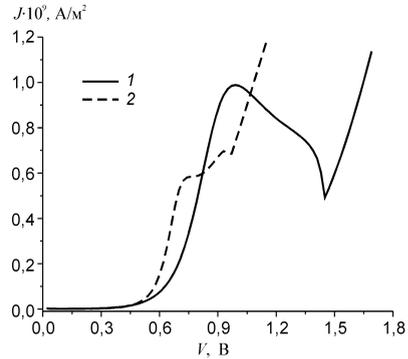


Рис. 2. Вольт-амперные характеристики трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с различными ширинами квантовой ямы: 1) 5 слоев  $\text{MoS}_2$ ; 2) 6 слоев  $\text{MoS}_2$

### 3. Заключение

В результате с использованием предложенной модели проведено исследование трехбарьерных гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  с вертикальным транспортом. Проанализирована область ОДП на вольт-амперных характеристиках данных гетероструктур. Установлено, что наилучшим соотношением пикового тока к току долины равным 3,05 обладает трехбарьерная гетероструктура  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ , состоящая из трехслойных барьеров  $\text{WSe}_2$  и четырехслойных квантовых ям  $\text{MoS}_2$ , а в случае шестислойных квантовых ям область ОДП мало выражена.

Использованная в исследованиях модель вертикальных гетероструктур на основе двумерных материалов, включена в систему моделирования нанoeлектронных приборов и устройств NANODEV [5,8].

Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований "Материаловедение, новые материалы и технологии" Республики Беларусь.

### Список литературы

1. Ратников П.В., Силин А.П. Двумерная графеновая электроника: современное состояние и перспективы // Успехи физических наук. 2018. Т. 188. № 12. С. 1249-1286.
2. Абрамов И. И. Основы моделирования элементов микро- и нанoeлектроники, LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2016. 444 с.
3. Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов В. А., Романова И. А., Щербакова И. Ю. Моделирование приборных структур нанoeлектроники на основе 2D материалов // Нанотехнологии, разработка, применение: XXI век. 2023. Т. 15. № 1. С. 54-68.
4. 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.
5. Abramov I. I., Labunov V. A., Kalameitsava N. V., Romanova I. A., Shcherbakova I. Y. Simulation of various nanoelectronic devices based on 2D materials // Proc. of SPIE. 2022. V. 12157. P. 121570U-1-9.
6. Abramov I. I., Labunov V. A., Kalameitsava N. V., Romanova I. A., Shcherbakova I. Y. 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.
7. Laturia A., Van de Put M. L., Vandenberghe W. G. Dielectric properties of hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides: from monolayer to bulk // 2D Materials and applications. 2018. V. 4. N 28. P. 1-6. <https://doi.org/10.1038/s41699-020-00163-3>.
8. Abramov I. I., Baranoff A. L., Goncharenko I. A., Kolomeitseva 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.