

УДК 621.382

Моделирование электрических характеристик графенового полевого транзистора на основе данных расчетов из первых принципов

Боровик А. М., Баранова М. С., Гвоздовский Д. Ч.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
ул. П. Бровки, 6, Минск, 220013, Республика Беларусь
borovik@bsuir.by*

Получено: 13 мая 2020 г.

Отрецензировано: 20 мая 2020 г.

Принято к публикации: 2 июня 2020 г.

Аннотация: Предложен и апробирован подход к моделированию электрических характеристик приборных структур на основе квазидвумерных пленок, суть которого состоит в определении значений необходимого набора параметров, описывающих электрофизические свойства квазидвумерных пленок и процессы переноса носителей заряда в них, посредством расчетов из первых принципов или экспериментальных измерений и дальнейшем использовании квантовомеханических моделей после необходимой их коррекции в рамках приборно-технологического моделирования. С использованием расчетов из первых принципов установлены значения электрофизических параметров графена с учетом энергетического воздействия контактирующего слоя оксида кремния. С помощью приборно-технологического моделирования с использованием результатов расчетов из первых принципов получены электрические характеристики конденсаторной структуры и полевого транзистора на основе графена.

Ключевые слова: графеновый полевой транзистор, квазидвумерная пленка, расчеты из первых принципов, приборно-технологическое моделирование, квантовомеханические эффекты.

Для цитирования (ГОСТ 7.0.5—2008): Боровик А. М., Баранова М. С., Гвоздовский Д. Ч. Моделирование электрических характеристик графенового полевого транзистора на основе данных расчетов из первых принципов // *Инфокоммуникационные и радиоэлектронные технологии*. 2020. Т. 3, № 1. С. 63—74.

Для цитирования (ГОСТ 7.0.11—2011): Боровик, А. М. Моделирование электрических характеристик графенового полевого транзистора на основе данных расчетов из первых принципов / А. М. Боровик, М. С. Баранова, Д. Ч. Гвоздовский // *Инфокоммуникационные и радиоэлектронные технологии*. — 2020. — Т. 3, № 1. — С. 63—74.

Simulation of the graphene field effect transistor electrical characteristics based on data of first-principles calculations

A. M. Borovik, M. S. Baranova, and D. C. Hvazdousky
Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics
6, P. Brovki Str., Minsk, 220013, Republic of Belarus
borovik@bsuir.by

Received: May 13, 2020
Peer-reviewed: May 20, 2020
Accepted: June 2, 2020

Abstract: *An approach to simulation of the electrical characteristics of device structures based on quasi-two-dimensional films is proposed and tested. The essence of this approach is determining the values of the necessary parameters set, which describe the electrophysical properties of the quasi-two-dimensional films and the processes of charge carriers transfer in them, by first-principles calculations or experimental measurements and further use of quantum-mechanical models after their correction within the framework of device-technological simulation. Using first-principles calculations, the values of the graphene electrophysical parameters are determined taking into account the energy impact of the silicon oxide layer. By device-technological simulation, using the results of first-principles calculations, the electrical characteristics of capacitor structure and graphene-based field effect transistor were obtained.*

Keywords: *graphene field effect transistor, quasi-two-dimensional film, first-principles calculations, device-technological simulation, quantum-mechanical effects.*

For citation(IEEE): A. M. Borovik et al. "Simulation of the graphene field effect transistor electrical characteristics based on data of first-principles calculations," *Infocommunications and Radio Technologies*, vol. 3, no. 1, pp. 63–74, 2020. (In Russ.).

1. Введение

Уникальные электрофизические особенности квазидвумерных пленок, в том числе графена, делают их перспективными для реализации активной области транзисторов [1]. Переход к новым типам полевых транзисторов, сформированным с использованием квазидвумерных пленок, требует обязательного учета некоторых физических эффектов, влияние которых в этих типах приборных структур становится существенным. В таких полевых транзисторах величина потенциальной ямы для электронов опре-

деляется толщиной активной области, образованной квазидвумерной пленкой и составляющей зачастую менее 1 нм. Поскольку потенциальная яма для электронов является настолько узкой, учет квантовомеханической природы электронного газа (эффекта квантового ограничения) является обязательным условием адекватного моделирования рассматриваемых приборных структур [2]. При уменьшении размеров элементов приборных структур существенным становится эффект туннелирования.

Важно отметить значительное различие физических свойств и значений соответствующих параметров, наблюдаемое между новыми, толщиной до нескольких монослоев, материалами и исходными объемными материалами. Помимо этого в условиях реального применения квазидвумерных пленок имеет место их физический контакт с окружающей средой. Графеновый слой, как правило, находится на подложке, может быть покрыт буферным слоем и имеет иные контакты различных типов, которые влияют на электрофизические параметры материала. В целом существует немало факторов, которые оказывают влияние на величину электрофизических параметров графена. Некоторые факторы связаны со структурой самого слоя графена (количество слоев, присутствующие функциональные группы, дефекты), другие факторы связаны с особенностями конкретного применения графена (тип подложки и иных контактирующих слоев, топологические размеры, химическое легирование, ультрафиолетовое и плазменное облучение). Поэтому очень важно иметь представление об особенностях границ раздела металл/графен и диэлектрик/графен, физических процессах там протекающих, а также учитывать это влияние при моделировании приборных структур на основе графена [3—5]. Кроме того, исследование особенностей влияния перечисленных факторов на параметры графена может способствовать обнаружению новых возможностей использования этого материала.

Указанные физические явления оказывают существенное влияние на процессы генерации и переноса свободных носителей заряда в рассматриваемых типах полевых транзисторов, определяя концентрацию и подвижность свободных носителей заряда в канале, а значит, и электрические характеристики приборных структур.

2. Описание подхода к моделированию приборных структур на основе квазидвумерных пленок

Моделирование приборных структур на основе квазидвумерных пленок требует предварительного определения минимального набора параметров квазидвумерного материала, включающего ширину запрещенной

зоны материала, энергию сродства к электрону, плотность состояний для электронов и дырок, диэлектрическую проницаемость материала, эффективную массу и подвижность носителей заряда. Также может быть необходимо определение некоторых параметров рекомбинации носителей заряда. Эти параметры, описывающие физические свойства квазидвумерных пленок, не интегрированы в программные комплексы приборно-технологического моделирования. Высокая степень зависимости электрофизических параметров квазидвумерных пленок от особенностей приборной структуры, контактирующих с квазидвумерным слоем материалов и параметров самого слоя приводит к необходимости учета условий расположения квазидвумерных пленок в конкретной приборной структуре, и прежде всего, возникающих контактов пленок с другими материалами, при определении электрофизических параметров. Получить значения некоторых параметров возможно без привлечения экспериментальных методов, зачастую отличающихся сложностью проведения соответствующих экспериментов, используя вместо них расчеты из первых принципов [6, 7]. Схема реализации подхода к моделированию приборных структур на основе квазидвумерных пленок с привлечением расчетов из первых принципов для получения значений параметров, описывающих электрофизические свойства квазидвумерных пленок и процессы переноса носителей заряда в них, представлена на рис. 1.



Рис. 1. Схема реализации подхода к моделированию электрических характеристик приборных структур на основе квазидвумерных пленок.

Fig. 1. The scheme for implementation of the approach to simulation of the electrical characteristics of device structures based on quasi-two-dimensional films

В соответствии с предложенным подходом определенный посредством расчетов из первых принципов набор параметров используется на этапе моделирования приборной структуры. Описание физических процессов в приборной структуре основано на использовании стандартных

для приборного моделирования уравнений: Пуассона, непрерывности, транспорта носителей заряда (диффузионно-дрейфовая модель, модель энергетического баланса, гидродинамическая модель). При этом многочисленные модели, входящие в состав программных комплексов приборно-технологического моделирования, служат для описания конкретных физических процессов и явлений. Некоторые из них требуют адаптации и калибровки с учетом особенностей физических процессов в рассматриваемых приборных структурах посредством использования методов определения значимости параметров и методов оптимизации.

Важным элементом предлагаемого подхода является выбор способа и соответствующих моделей для учета квантовомеханических эффектов в рамках приборно-технологического моделирования. Существуют два основных подхода к учету квантовомеханических эффектов при моделировании наноразмерных полевых транзисторов: непосредственное квантовомеханическое описание, используя, например, уравнение Шредингера и метод неравновесных функций Грина, и введение необходимой квантовомеханической поправки к базовой, например, диффузионно-дрейфовой модели. Несмотря на все достоинства подхода, основанного на непосредственном квантовомеханическом описании физических процессов в приборной структуре, отсутствие надежности используемых численных методов, высокие требования к вычислительным ресурсам и «простоте» приборной структуры зачастую делают невозможным его применение при моделировании процессов переноса носителей заряда. В этом случае необходим переход к использованию подхода на основе квантовомеханической коррекции базовой модели. Этот переход должен сопровождаться калибровкой моделей, определяющих квантовомеханическую коррекцию, с учетом результатов моделирования вольт-фарадных характеристик с использованием уравнения Шредингера или соответствующих экспериментальных измерений. Это оказывается возможным, поскольку при моделировании вольт-фарадных характеристик большинство указанных недостатков первого подхода не наблюдается.

Существуют, однако, и другие подходы к решению рассматриваемой задачи. В частности, высокую эффективность демонстрируют комбинированные модели полевых графеновых транзисторов на основе уравнений квантовой диффузионно-дрейфовой модели [8, 9].

3. Результаты расчетов из первых принципов

Уникальность графена обусловлена, прежде всего, его энергетическим спектром: линейный характер энергетических зон вблизи точек Ди-

рака обосновывает высокую подвижность носителей заряда. Изменение энергетического спектра, определяющего электрофизические свойства графена, возможно из-за влияния контактирующего материала [10].

Зачастую в приборных структурах графен размещен на пленке SiO_2 . Для адекватного учета влияния диэлектрического слоя на свойства графена прежде всего необходимо определить механизмы адсорбции графена и установить энергетически выгодное пространственное положение квазидвумерной пленки относительно SiO_2 . Решение этих задач возможно посредством моделирования из первых принципов с использованием программного комплекса VASP, в котором реализованы методы моделирования, основанные на теории функционала электронной плотности [11, 12].

Наиболее стабильной полиморфной модификацией SiO_2 является α -кварц, наиболее устойчивая поверхность которого — (001) [13]. Для SiO_2 существуют два основных типа поверхности: поверхность с оборванными связями кремния (Si^{unsat}) и поверхность с оборванными связями кислорода (O^{unsat}). Для каждого типа поверхности выполнялся поиск оптимальных пространственных положений атомов углерода относительно SiO_2 : как положений атомов в плоскости графена, так и расстояния между слоями.

Для устранения влияния волновых функций друг на друга, возникающего из-за особенностей реализации моделирования в программном комплексе VASP — трансляции ячеек, в суперячейках создан вакуумный слой толщиной 20 \AA вдоль кристаллографического направления z . Расчеты проводились без учета спиновой поляризации. Значение энергии обрезания составило 520 эВ . Степень влияния поверхности SiO_2 на структурные и электронные свойства графена оценивалась с помощью рассмотрения механизмов взаимодействия. В качестве критериев оценки принято количественное значение энергии адсорбции: $\sim 100\text{--}400 \text{ кДж/моль}$ для хемосорбции и до 100 кДж/моль для физосорбции, а также значение длины связи. Длина связи при химической адсорбции близка к соответствующей длине связи в обычных химических соединениях.

В результате расчетов из первых принципов для различных типов поверхности (Si^{unsat} и O^{unsat}) установлены значения энергии адсорбции графена на поверхности SiO_2 ($4,11 \text{ кДж/моль}$ и $13,56 \text{ кДж/моль}$ соответственно), величины межслоевого расстояния ($4,32 \text{ \AA}$ и $3,31 \text{ \AA}$ соответственно), а также положение атомов углерода относительно SiO_2 . Такие численные значения энергии адсорбции и межслоевого расстояния соответствуют физической адсорбции, для которой характерно отсутствие химических связей, а также наличие слабых сил Ван-дер-Ваальса, влияющих на устойчивость системы «графен/ SiO_2 ». Анализ результатов позволяет устано-

вить, что адсорбция графена наиболее вероятна на поверхности с оборванными связями кислорода, при межслоевом расстоянии 3,31 Å. Рассчитанные параметры адсорбции используются при последующем определении электрофизических свойств графена, помещенного на SiO₂.

Посредством расчетов из первых принципов исследовались характеристики энергетического спектра графена, расположенного на SiO₂. Для получения энергетического спектра выполнена «развертка» полученных результатов относительно зоны Бриллюэна графена по контуру Г-М-К-Г. Определен вклад атомов углерода в формирование каждого уровня. Энергетические уровни, где этот вклад оказался существенен, составили энергетическую зонную диаграмму графена, расположенного на SiO₂ (рис. 2).

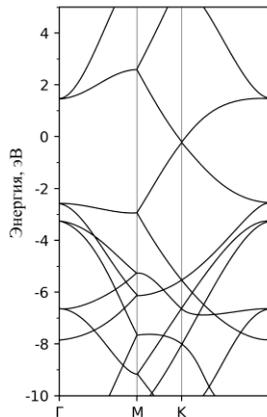


Рис. 2. Зонная структура графена, расположенного на поверхности SiO₂.

Fig. 2. The band structure of graphene disposed on the SiO₂ surface

Расположение зон, соответствующих графену, во многом остается неизменным, в частности расположение и форма σ - и π -зон, ответственных за проводимость. Однако ряд изменений электронных состояний графена под действием приповерхностных атомов SiO₂ наблюдается в непосредственной близости к уровню Ферми. Основное влияние слоя SiO₂ на энергетический спектр графена заключается в появлении энергетического зазора (0,02 эВ) между связывающей и антисвязывающей π -зонами графена. Появление запрещенной зоны связано с неэквивалентным расположением атомов подложки по отношению к атомам углерода графена.

Закон дисперсии отдельно стоящего графена имеет линейный характер. Это значит, что эффективная масса электронов и дырок в графене вблизи точки Дирака равна нулю. В энергетическом спектре графена, расположенного на подложке SiO₂, в точках экстремума вблизи уровня Фер-

ми (интервал энергий от $-1,3$ до $0,7$ эВ) появляется небольшая кривизна, свидетельствующая, что носители заряда приобретают отличную от нуля эффективную массу. С использованием полученной зонной диаграммы графена (рис. 2), с помощью метода конечных разностей (с шагом сетки $0,01$) определена эффективная масса электронов вблизи потолка валентной зоны, которая составила $0,0036m$, где m – масса электрона. По результатам расчетов из первых принципов получены также константа диэлектрической проницаемости графена ($1,39$) и работа выхода из него ($4,3$ эВ).

4. Результаты моделирования электрических характеристик графенового полевого транзистора

С целью исследования эффективности предложенного подхода к моделированию приборных структур на основе квазидвумерных пленок рассматривались конденсаторные структуры и полевые транзисторы на основе графена. Необходимые значения параметров (ширина запрещенной зоны, работа выхода, диэлектрическая проницаемость, эффективная масса носителей заряда, плотность состояний), описывающих электрофизические свойства графена, были получены посредством расчетов из первых принципов с учетом контактирующих с графеном материалов, а также на основании анализа научных публикаций.

С использованием программного комплекса компании Silvaco осуществлено моделирование конденсаторной структуры, образованной последовательным формированием на кремниевой подложке слоев диэлектрика (SiO_2) толщиной 8 нм, графена и металлов (Cr и Au) [14]. Использование в процессе моделирования уравнения Шредингера обеспечило учет квантовомеханических эффектов, проявляющихся при столь малой, порядка единиц ангстрем, толщине графена. Моделирование всех электрических характеристик осуществлялось при комнатной температуре (300 К), что соответствует условиям экспериментальных измерений. Полученные в результате моделирования вольт-фарадные характеристики конденсаторной структуры (рис. 3) находятся в согласии с экспериментальными данными, представленными в работе [14]. Особенности поведения экспериментальной кривой в диапазоне напряжений от $-0,8$ до $0,3$ В объясняются влиянием атмосферы, которое не учитывалось при моделировании.

Приборная структура исследуемого графенового полевого транзистора (рис. 4) отличается относительной простотой с точки зрения моделирования [15]. Монослой графена расположен на поверхности слоя оксида кремния толщиной 300 нм, сформированного на высоколегированной

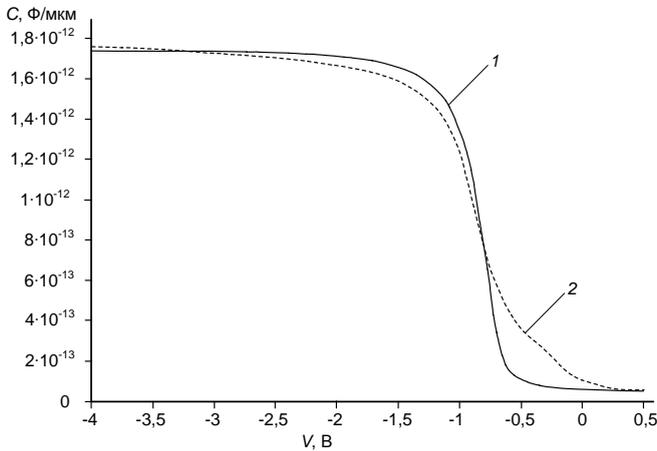


Рис. 3. Сравнение результатов моделирования (кривая 1) вольт-фарадной характеристики конденсаторной структуры с данными экспериментальных измерений (кривая 2) [14].

Fig. 3. Comparison of the simulation results (curve 1) of the capacitance-voltage characteristic of the capacitor structure with experimental data (curve 2) [14]

кремниевой подложке. Кремниевая подложка выступает в роли затвора рассматриваемого транзистора. Металлические контакты к истоку и стоку полевого транзистора, образованные тонким слоем хрома толщиной 2 нм нанесенным поверх толстым слоем золота, формируют ту же конденсаторную структуру, что и описанная выше. При этом графен при моделировании следует рассматривать как набор из трех областей, две из которых соответствуют положению слоя графена между оксидом кремния и металлом, а третья, центральная, находится в контакте с оксидом кремния и окружающей атмосферой. Таким образом, необходимо задавать два набора значений параметров для двух типов указанных гетероструктур, один из которых соответствует описанной выше конденсаторной структуре.

С использованием квантовомеханической поправки (квантовым потенциалом Боба) к базовой, диффузионно-дрейфовой, модели после необходимой ее коррекции получены электрические характеристики графенового полевого транзистора. Выбор диффузионно-дрейфовой модели в качестве базовой при тестировании предложенного подхода обусловлен наличием хорошо организованных математического аппарата модели и методов ее численного решения. Подвижность в данном исследовании подбиралась исходя из имеющихся результатов экспериментальных измерений вольт-амперных характеристик (ВАХ) приборной структуры и оставалась постоянной (3300 см²/(В×с)) во всем анализируемом диапазоне напряжений на электродах. На рис. 5 представлено сравнение результатов

моделирования ВАХ (зависимости тока стока I_C от напряжения затвор-исток $V_{зи}$ при напряжении сток-исток $V_{си} = 0,02$ В), полученной с использованием программного комплекса компании Silvaco, с данными экспериментальных измерений.

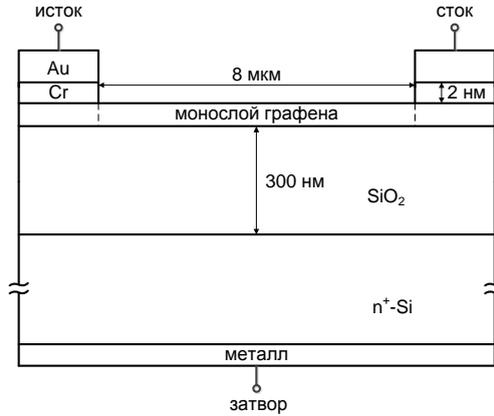


Рис. 4. Приборная структура графенового полевого транзистора.

Fig. 4. Device structure of graphene field effect transistor

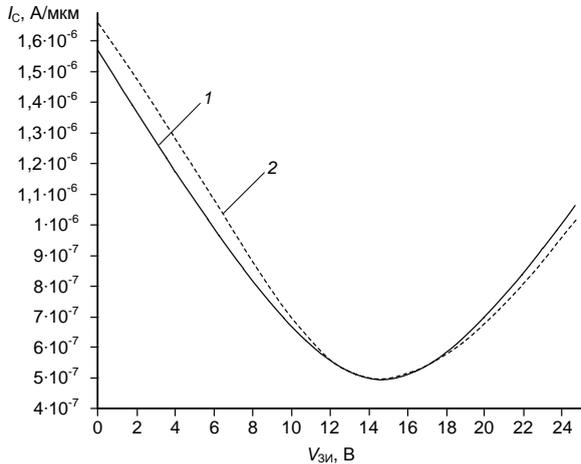


Рис. 5. Сравнение результатов моделирования ВАХ (кривая 1) графенового полевого транзистора с экспериментальными данными (кривая 2) [15]

Fig. 5. Comparison of the simulation results (curve 1) of the current-voltage characteristic of the graphene field effect transistor with experimental data (curve 2) [15]

Результаты моделирования электрических характеристик полевого транзистора на основе графена согласуются в анализируемом диапазоне

напряжений с экспериментальными данными, представленными в работе [15], с относительной погрешностью, не превышающей 9 %.

4. Заключение

Предложен и апробирован подход к моделированию электрических характеристик приборных структур на основе квазидвумерных пленок, суть которого состоит в определении значений необходимого набора параметров, описывающих электрофизические свойства квазидвумерных пленок и процессы переноса носителей заряда в них, посредством расчетов из первых принципов или экспериментальных измерений и дальнейшем использовании квантовомеханических моделей после необходимой их коррекции в рамках приборно-технологического моделирования. Достижение высокой степени соответствия результатов моделирования электрических характеристик графенового полевого транзистора с данными экспериментальных измерений позволяет сделать вывод о возможности эффективного использования предложенного подхода при исследовании и оптимизации новых конструктивных решений полевых транзисторов на основе квазидвумерных пленок.

Список литературы

1. International Technology Roadmap for Semiconductors // [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.itrs2.net/itrs-reports.html> (дата обращения: 27.02.2020).
2. Борисенко В. Е., Воробьева А. И., Данилюк А. Л. и др. Нанoeлектроника: теория и практика. М. : Бином, 2013. 366 с.
3. Yang N., Yang D., Chen L. и др. Design and adjustment of the graphene work function via size, modification, defects, and doping: a first-principle theory study // *Nanoscale Research Letters*. 2017. Т. 12, № 642. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://nanoscalereslett.springeropen.com/track/pdf/10.1186/s11671-017-2375-3> (дата обращения: 27.02.2020).
4. Hwang Ch., Siegel D. A., Sung-Kwan Mo и др. Fermi velocity engineering in graphene by substrate modification // *Scientific Reports*. 2012. Т. 2, № 590. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.nature.com/articles/srep00590.pdf> (дата обращения: 27.02.2020).
5. Santos E. J. G., Kaxiras E. Electric-Field Dependence of the Effective Dielectric Constant in Graphene // *Nano Letters*. 2013. Т. 13, № 3. С. 898—902.
6. Dean C. R., Young A. F., Meric I. и др. Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics // *Nature nanotechnology*. 2010. Т. 5, № 10. С. 722—726.
7. Avouris P. Graphene: Electronic and photonic properties and devices // *Nano Letters*. 2010. Т. 10, № 11. С. 4285—4294.
8. Абрамов И. И. Основы моделирования элементов микро- и нанoeлектроники. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. 444 с.
9. Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов В. А. и др. Моделирование полевых графеновых транзисторов с одним и двумя затворами в различных режимах функционирования // *Нанотехнологии: разработка, применение — XXI век*. 2018. Т. 10, № 3. С. 16—24.

10. Preobrajenski A. B., Ng M. L., Vinogradov A. S. и др. Controlling graphene corrugation on lattice-mismatched substrates // *Physical Review B*. 2008. Т. 78, № 7. С. 073401.
11. Parr R. G., Yang W. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, 1989. 352 p.
12. Blöchl P. E. Projector augmented-wave method // *Physical Review B*. 1994. Т. 50, № 24. С. 17953.
13. Rignanese G-M., De Vita A., Charlier J-C. Density functional theory calculations on graphene/ α -SiO₂(0001) interface // *Physical Review B*. 2000. Т. 61. С. 13250.
14. Song S. M., Park J. K., Sul O. J. и др. Determination of Work Function of Graphene under a Metal Electrode and Its Role in Contact Resistance // *Nano Letters*. 2012. Т. 12, № 8. С. 3887—3892.
15. Tshy K., Fang T., Zhao P. и др. Graphene Transistors // *Physics and Applications of Graphene — Experiments*. InTech, 2011. С. 473—500.

Информация об авторах

Боровик Артур Михайлович, младший научный сотрудник НИЛ 4.4 научно-исследовательской части Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, г. Минск, Республика Беларусь.

Баранова Мария Сергеевна, младший научный сотрудник НИЛ 4.4 научно-исследовательской части Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, г. Минск, Республика Беларусь.

Гвоздовский Дмитрий Чеславович, младший научный сотрудник НИЛ 4.4 научно-исследовательской части Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, г. Минск, Республика Беларусь.

Information about the authors

Artur M. Borovik, junior scientific researcher of the laboratory 4.4 of Research and Development Department of Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus.

Maryia S. Baranova, junior scientific researcher of the laboratory 4.4 of Research and Development Department of Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus.

Dmitryi C. Hvazdousky, junior scientific researcher of the laboratory 4.4 of Research and Development Department of Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus.

Источники финансирования и выражение признательности

Работа выполнена при финансовой поддержке и в рамках решения задач государственной программы научных исследований РБ «Конвергенция» (задание № 3.02).