

Алгоритм и программа, реализующие модель резонансно-туннельных гетероструктур, содержащих 2D-материалы, с вертикальным транспортом

Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Романова И. А., Щербакова И. Ю.

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

Аннотация: Проведено тестирование разработанного программного обеспечения, предназначенного для моделирования резонансно-туннельных гетероструктур с вертикальным транспортом на основе двумерных материалов. Результаты проведенных тестовых расчетов подтвердили адекватность предложенной модели.

1. Введение

Особое внимание ученые уделяют исследованию двумерных материалов, т.е. материалов толщиной в один или несколько атомных слоев. Такие материалы привлекательны тем, что обладают уникальными свойствами и являются одними из наиболее перспективных материалов нанoeлектроники, поэтому разработка приборных гетероструктур на их основе является актуальной задачей. Одним из важных этапов проектирования и разработки нанoeлектронных приборов является моделирование [1].

В данной работе рассматривается модель гетероструктур, содержащих 2D-материалы, с вертикальным транспортом, алгоритм и программа ее реализующие.

2. Модель, алгоритм и программа. Результаты

Было проведено тестирование разработанного программного обеспечения, предназначенного для моделирования гетероструктур, содержащих 2D-материалы, с вертикальным транспортом.

Исследованы двух- и трехбарьерные структуры на основе материальной системы $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$ с использованием предложенной модели. Модель является комбинированной и основана на решении системы уравнений Шредингера и Пуассона [2-6]. Так, в предложенном алгоритме уравнение Шредингера решается в активной области приборной гетероструктуры, а уравнение Пуассона – между контактами (т.е. для всего прибора в целом). В расчетах при тестировании программы использованы параметры материалов из работ [7, 8]. Двух- и трехбарьерные гетероструктуры имеют следующие размеры: ширины потенциальных барьеров – 1,7 нм, ширины квантовых ям – 3,6 нм, ширины приконтактных областей – 20 нм. Проведены расчеты коэффициента прохождения исследуемых гетероструктур. Были получены зависимости коэффициента прохождения двухбарьерной гетероструктуры, содержащей 2D-материалы, с вертикальным транспортом в зависимости от энергии электронов (рис.1).

Расчеты проведены при комнатной температуре при напряжении 0,9 В и 0,5 В и заданном уровне Ферми равном 2,55 эВ. По оси ординат используется логарифмическая шкала для удобства представления результатов расчетов. Пиковые значения коэффициента прохождения при напряжении 0,9 В наблюдаются при следующих энергиях: -0,15 эВ; 0,24 эВ; 0,73 эВ; 1,31 эВ; 1,97 эВ. Показано, что с уменьшением напряжения пиковые значения коэффициента прохождения смещаются в область более высоких энергий. Тестирование показало, что полученный коэффициент прохождения не превышает значения равного единице, что подтверждает адекватность полученных результатов моделирования с помощью предложенной модели. Подчеркнем, что результаты также не противоречат физическим принципам работы устройства.

3. Заключение

В результате проведенных исследований проведено тестирование модели и программы резонансно-туннельных структур с вертикальным транспортом на основе двумерных материалов на примере материальной системы $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$. Исследовано влияние напряжения, приложенного к контактам устройства на коэффициент прохождения исследуемой структуры.

Программа, реализующая модель вертикальных гетероструктур на основе двумерных материалов, включена в систему моделирования нанoeлектронных приборов и устройств NANODEV [9,10].

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

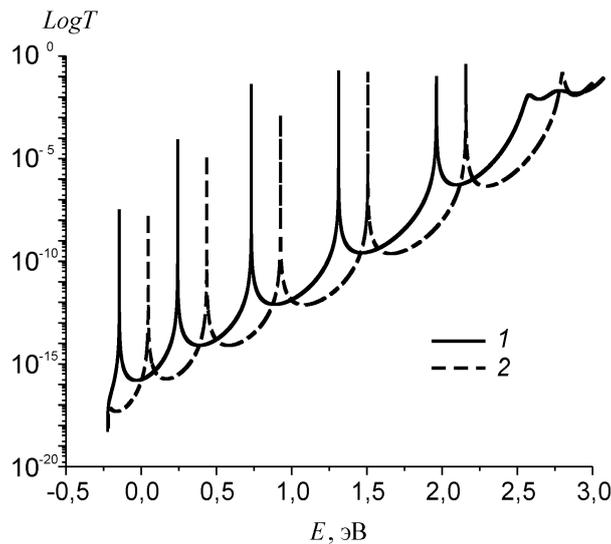


Рис. 1. Зависимость коэффициента прохождения двухбарьерной гетероструктуры $\text{SiO}_2/\text{MoS}_2$ от энергии электрона при различных значениях приложенного напряжения: 1) $V=0,9$ В; 2) $V=0,5$ В

Список литературы

1. Абрамов И. И. Основы моделирования элементов микро- и нанoeлектроники, LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2016. 444 с.
2. Abramov I. I., Labunov V. A., Kolomejtseva N. V., Romanova I. A., Shcherbakova I. Y. Simulation of graphene field-effect transistors and resonant tunneling diodes based on carbon nanomaterials // Proc. of SPIE. 2019. V. 110222. P. 1102220F-1-11.
3. Abramov I. I., Labunov V. A., Kolomejtseva N. V., Romanova I. A. Simulation of field-effect transistors and resonant tunneling diodes based on graphene // Proc. of SPIE. 2016. V. 10224. P. 102240V-1-10.
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. Абрамов И. И., Лабунов В. А., Коломейцева Н. В., Щербакова И. Ю. Моделирование приборных структур на основе двухслойного графена и других 2D-материалов с помощью системы NANODEV // X Международная научная конференция «Материалы и структуры современной электроники» 12-14 октября 2022, Минск, БГУ, С. 330-334.
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. Larentis S., Tolsma J.R., Dillen D.C., Kim K., Tutuc E. Band offset and negative compressibility in Graphene-MoS₂ heterostructures // Nanoletters. 2014. V. 14. P. 2039-2045.
9. 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.
10. Abramov I. I., Goncharenko I. A., Ignatenko S. A., Korolev A. V., Novik E. G., Rogachev A. I. NANODEV: A nanoelectronic-device simulation software system // Russian Microelectronics. 2003. V. 32. N 2. P. 97-104.