

И. И. Абрамов, д-р физ.-мат. наук, проф., **Н. В. Коломейцева**, ст. науч. сотр.,
В. А. Лабунов, д-р техн. наук, академик НАНБ, академик РАН, проф., зав. лаб.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, 220013,
Республика Беларусь

E-mail: nanodev@bsuir.edu.by

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ПРИБОРОВ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ. ЧАСТЬ I. МОДЕЛИ

Поступила в редакцию 20.02.2025

Принята в печать 31.03.2025

Предложены модели перспективных приборов на основе 2D-материалов, а именно: квантовая диффузионно-дрейфовая модель полевого транзистора на двухслойном графене, модель резонансно-туннельных структур на основе 2D-материалов с вертикальным транспортом и модель резонансно-туннельных диодов, содержащих GaN, с вертикальным транспортом. С использованием моделей проведены исследования электрических характеристик приборных структур, включающих одно- и двухслойный графен, диоксид молибдена, карбид кремния, диселенид вольфрама, нитрид галлия.

В части I рассмотрены предложенные модели.

Ключевые слова: полевой транзистор, одно- и двухслойный графен, вольт-амперная характеристика, комбинированная модель, моделирование, 2D-материалы, резонансно-туннельные структуры

Введение

В настоящее время проводятся исследования приборных гетероструктур на основе 2D-материалов, в том числе графена и других материалов толщиной от одного до нескольких атомных слоев, как наиболее перспективных при создании приборов нанoeлектроники [1–4], таких как радиочастотные полевые транзисторы (ПТ), сенсоры, резонансно-туннельные диоды (РТД) и др. Как показывают исследования, они обладают преимуществами в быстродействии по сравнению с известными приборами на полупроводниковых материалах. Одним из этапов создания и разработки таких приборных гетероструктур является теоретическое исследование (моделирование) их характеристик с помощью физико-математических моделей, реализуемых в виде программного обеспечения [5–7]. Разработке моделей, предназначенных для моделирования ПТ на двухслойном графене (ДГ), резонансно-туннельных структур (РТС) на основе 2D-материалов с вертикальным транспортом и РТД, содержащих GaN, с вертикальным транспортом посвящена данная работа.

Последнее десятилетие был проведен ряд исследований, посвященных практической реализации ПТ на графене, например работы [8–10]. Различными группами ученых создан ряд моделей ПТ на основе ДГ, например, компактная модель ПТ на ДГ [11], аналитическая модель графенового ПТ, основанная на аппроксимации эффективной массы с учетом баллистического транспорта [12], аналитическая модель ПТ на основе ДГ, позволяющая рассчитывать прямой и переменный токи графенового ПТ [13] и т.д.

В работах [1, 14–18] приведено детальное описание разработанных нами квантовых диффузионно-дрейфовых моделей ПТ на основе однослойного графена [14–16] и ПТ на основе ДГ [1, 17, 18]. В ПТ на ДГ наблюдается ряд существенных отличий от ПТ на однослойном графене. К важнейшим из них относится открытие запрещенной зоны в графеновом канале транзистора при приложении вертикального поля между верхним и нижним затворами исследуемого устройства [19]. Эта особенность учтена в квантовой диффузионно-дрейфовой модели ПТ на ДГ. Графеновый канал в ПТ представляет собой квантовую емкость, нахождение которой осуществляется при самосогласованном расчете электростатического потенциала. Нами получено выражение для нахождения коэффициента квантовой емкости α в ПТ на ДГ, входящего в расчет электростатического потенциала в канале транзистора [17]. В ПТ на однослойном графене этот коэффициент имеет фиксированное значение. В ПТ на ДГ коэффициент квантовой емкости α позволяет учесть открытие запрещенной зоны E_g в графеновом канале исследуемого прибора. Таким образом, при последующем расчете характеристик исследуемого прибора учитывается то, что канал представляет собой двухслойный графен. В работе приведено сравнение рассчитанных характеристик ПТ на однослойном графене и ПТ на ДГ с указанием преимуществ последнего, а также расчеты характеристик ПТ на ДГ с различными подзатворными диэлектриками.

В гетероструктурах на 2D-материалах наблюдается эффект резонансного туннелирования [20, 21]. В нанотехнологиях при разработке современных

электронных устройств изучение механизмов токопереноса, в том числе и эффекта резонансного туннелирования, играет важную роль. Отрицательное дифференциальное сопротивление (ОДС) и возможность работать при терагерцовых частотах являются ключевыми особенностями приборов на эффекте резонансного туннелирования. На вольт-амперных характеристиках (ВАХ) таких приборов наблюдаются пики или ступени.

Одним из самых востребованных 2D-материалов среди дихалькогенидов, таких как, например, MoS_2 , WSe_2 , MoSe_2 , WS_2 , является MoS_2 [22–24]. На практике получены гетероструктуры, содержащие MoS_2 и представляющие интерес для создания новых нанoeлектронных приборов. В частности, в структуре графен/ MoS_2 /графен [25] несколько атомных слоев MoS_2 играют роль потенциального барьера и могут быть использованы в полевых транзисторах. Гетероструктуры на основе $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$, $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$ с вертикальным транспортом можно использовать для создания РТД. Данная работа посвящена теоретическому изучению характеристик гетероструктур на основе $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ с вертикальным транспортом.

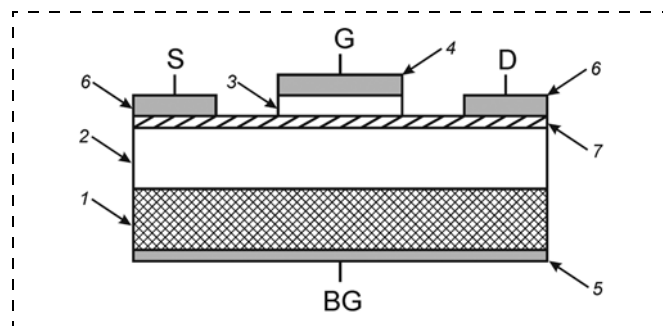
Также нами была предложена модификация модели РТС, предназначенная для моделирования гетероструктур, содержащих 2D-материалы, с вертикальным транспортом [1, 18, 26]. Модель является комбинированной и основана на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. Она позволяет исследовать и анализировать самосогласованный потенциал, коэффициент прохождения, ВАХ приборных структур на основе 2D-материалов с вертикальным транспортом.

Также в работе использована комбинированная модель резонансно-туннельных диодов [27–29], модифицированная на случай учета вертикального транспорта носителей заряда и предназначенная для моделирования гетероструктур, содержащих GaN. С помощью разработанного программного обеспечения промоделированы структуры на основе материальной системы GaN/SiC с учетом различия в задании гетерограниц Ga/Si и Ga/C.

Модели

Модель полевых транзисторов на двухслойном графене. В разделе кратко рассмотрена квантовая диффузионно-дрейфовая модель ПТ на ДГ, которая представляет собой комбинацию физико-топологической и электрической моделей. Особенностью модели является расчет коэффициента квантовой емкости при нахождении самосогласованного потенциала исследуемого прибора. Детальное описание модели ПТ на ДГ приведено в работах [1, 17, 18].

Рассмотрим поперечное сечение ПТ на ДГ (см. рисунок). Исследуемый прибор имеет два затвора. Верхний затвор отделен от канала тонким слоем диэлектрика, а нижний затвор расположен на подложке, отделенной от канала диэлектриком нижнего затвора. Причем толщина верхнего диэлектрика при-



Поперечное сечение двухзатворного ПТ 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

мерно в 10–30 раз меньше толщины диэлектрика нижнего затвора. Поверх канала также расположены сток и исток. Одной из основных проблем в ПТ на однослойном графене было наличие токов утечки в закрытом состоянии ПТ. Для устранения этого недостатка было предложено вместо однослойного графена использовать двухслойный графен в качестве проводящего канала ПТ.

Модель реализована в виде программного обеспечения, предназначенного для расчета выходных и передаточных характеристик ПТ на ДГ. Основной алгоритм модели состоит из следующих блоков.

1. Блок задания исходных данных структуры исследуемого ПТ на ДГ.
2. Расчет емкостей верхнего и нижнего затворов.
3. Расчет вертикальных полей верхнего и нижнего затворов, а также усредненного поля ПТ.
4. Расчет открываемой ширины запрещенной зоны в ДГ осуществляется по формуле [30]:

$$E_g = kD, \quad (1)$$

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

5. Расчет остаточной плотности носителей заряда в канале ПТ на ДГ [31]:

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

где m_{eff}^* — эффективная масса в графене; $\hbar$ — постоянная Планка, деленная на 2π ; k_B — постоянная Больцмана; T — температура окружающей среды; Δ — неоднородность электростатического потенциала в канале.

6. Расчет квантовой емкости без учета коэффициента квантовой емкости α .

7. Самосогласованный расчет электростатического потенциала с учетом коэффициента квантовой емкости α .

Рассмотрим три случая проводимости канала. Самосогласованный электростатический потенциал канала ПТ на ДГ qV рассчитываем согласно [17]:

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

$$\alpha = 1 - \frac{E_g/2 - k_B T}{qV}, \text{ если } qV \geq E_g/2, \quad (3)$$

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

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

где q — заряд электрона; 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.

В первом случае, когда канал ПТ, представляющий собой ДГ, является каналом n -типа, $qV \geq E_g/2$. В этом случае уровень Ферми перекрывает минимум зоны проводимости. Во втором случае, когда канал ПТ является каналом p -типа проводимости, $qV \leq -E_g/2$. В этом случае уровень Ферми перекрывает максимум валентной зоны. В третьем случае, когда канал обладает свойством биполарности, т.е. проводимость канала меняется от p -типа к n -типу, $-E_g/2 < qV < E_g/2$. Расчет реализуется самосогласованно итерационным методом и продолжается до тех пор, пока поправка электростатического потенциала не достигнет определенного значения.

Далее находим следующие величины [1]:

8. Общая плотность листа ДГ [17, 32].

9. Скорость насыщения [32].

10. Эффективная подвижность носителей заряда [1, 33]. Последнюю находим усреднением значений подвижностей электронов и дырок. На завершающем этапе определяем плотность тока с учетом сопротивлений на истоке и стоке в зависимости от напряжения на стоке при фиксированном напряжении на верхнем затворе [1]:

$$I_d = \frac{W \int_0^{V_{ch}} \mu Q dV}{L + \left| \int_0^{V_{ch}} \frac{\mu}{V_{sat}} dV \right|}, \quad (4)$$

где W — ширина канала; μ — эффективная подвижность носителей заряда в ДГ; Q — общая плотность листа заряда листа графена; V_{sat} — скорость насыщения.

Модель реализована в виде двух программ на языке *Compact Visual Fortran* и предназначена для моделирования выходных и передаточных характеристик ПТ на ДГ.

Модель резонансно-туннельных структур на основе 2D-материалов. Модель, использованная в данной работе, является комбинированной и основана на решении уравнений Шредингера и Пуассона [27, 28, 34]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_s \epsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = -q(N_D - n), \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + V\psi = E\psi, \quad (6)$$

где ϵ_s — относительная диэлектрическая проницаемость среды; ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума; Φ — электростатический потенциал; q — заряд электрона; N_D — концентрация ионизированных доноров; n — концентрация электронов; $\hbar$ — приведенная постоянная Планка; m^* — эффективная масса электрона; ψ — волновая функция; E — энергия электрона; V — потенциальная энергия электрона.

Модель адаптирована для приборных структур с вертикальным транспортом на основе различных материальных систем. Прибор состоит из трех видов областей: контактов, приконтактных областей и активной области. Алгоритм модели включает решение уравнения Шредингера в активной области структуры, а также решение уравнения Пуассона в области между контактами. В результате самосогласованного решения данных уравнений находим потенциал. На следующем этапе с учетом найденного на предыдущем этапе самосогласованного потенциала решается только уравнение Шредингера для структуры с произвольным числом барьеров. В результате находятся волновые функции в зоне проводимости. Аппроксимация уравнения Пуассона дана в работе [34]. Рассмотрим подробнее аппроксимацию уравнения Шредингера (6) для внутренних узлов сетки пространственной дискретизации [34], а именно:

$$\psi_{i-1} \left(-\frac{\hbar^2}{h_i(h_i + h_{i+1})m^*} \right) + \psi_i \left(\frac{\hbar^2}{h_i h_{i+1} m^*} + V_i - E \right) + \psi_{i+1} \left(-\frac{\hbar^2}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})m^*} \right) = 0, \quad (7)$$

а также для точек границ раздела:

$$\psi_{i-1} \left(-\frac{\hbar^2}{h_i(h_i m^{*\Gamma-} + h_{i+1} m^{*\Gamma+})} \right) + \psi_i \left(\frac{\hbar^2(h_i + h_{i+1})}{h_i h_{i+1} (h_i m^{*\Gamma-} + h_{i+1} m^{*\Gamma+})} + \frac{h_i V_i^{\Gamma-} m^{*\Gamma-} + h_{i+1} V_i^{\Gamma+} m^{*\Gamma+}}{h_i m^{*\Gamma-} + h_{i+1} m^{*\Gamma+}} - E \right) + \psi_{i+1} \left(-\frac{\hbar^2}{h_{i+1}(h_i m^{*\Gamma-} + h_{i+1} m^{*\Gamma+})} \right) = 0. \quad (8)$$

В данном случае использован следующий вид внутренних граничных условий:

$$\psi_i^{\Gamma-} = \psi_i^{\Gamma+}, \quad \psi_i^{\Gamma-} = \psi_i^{\Gamma+}. \quad (9)$$

Индексами $\Gamma-$ и $\Gamma+$ обозначены значения в граничной точке по разные стороны от границы раздела; ψ — волновая функция; i — номер узла сетки пространственной дискретизации; h — шаг сетки.

Одномерное уравнение Шредингера в стационарном случае является дифференциальным уравнением второго порядка, следовательно, в точках 0 и x_n можно использовать граничное условие общего вида:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} + a\psi = b, \quad (10)$$

где a , b — коэффициенты, которые различны для точек 0 и x_n . На границах области решения волновые функции задаются как комбинация падающей (прошедшей) и отраженной волн. Решение уравнения Шредингера в результате описанной конечно-разностной аппроксимации сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений относительно $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{n-1}$. В модели резонансные уровни энергии находят по коэффициенту прохождения, который вычисляется на основе рассчитанных волновых функций. В результате с учетом найденного коэффициента прохождения определяется плотность тока приборных структур с вертикальным транспортом, включающих 2D-материалы.

Модель резонансно-туннельных диодов с вертикальным транспортом. Реализация предложенной модели РТД, подробное описание которой приведено в работе [35], сочетает в себе полуклассический и квантово-механический подходы с учетом протяженности приконтактных областей исследуемого устройства. Система уравнений Шредингера и Пуассона решается с помощью метода последовательной концепции в целях нахождения самосогласованного потенциала. На основе найденных волновых функций рассчитывается коэффициент прохождения исследуемой гетероструктуры. На завершающем этапе рассчитывается плотность тока РТД с последовательным тунелированием.

Список литературы

1. Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов 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.
2. Ратников П. В., Силян А. П. Двумерная графеновая электроника: современное состояние и перспективы // Успехи физических наук. 2018. Т. 188, № 12. С. 1249—1286.
3. Feijoo P. C., Pasadas F., Bonmann M., Asad M., Yang X., Generalov A., Vorobiev A., Banszerus L., Stampfer C., Otto M., Neumaier D., Stake J., Jimenez D. Does carrier velocity saturation help to enhance $f_{\max}$ in graphene field-effect transistors? // Nano-scale Adv. 2020. Vol. 2. P. 4179—4186.
4. Bonmann M., Asad M., Yang X., Generalov A., Vorobiev A., Banszerus L., Stampfer C., Otto M., Neumaier D., Stake J. Graph-

ene field-effect transistors with high extrinsic f_T and $f_{\max}$ // IEEE Electron Dev. Lett. 2019. Vol. 40, N 1. P. 131—134.

5. Абрамов И. И. Основы моделирования элементов микро- и наноэлектроники, LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2016. 444 с.

6. Абрамов И. И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем микроэлектроники, LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2012. 116 с.

7. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Численное моделирование физических процессов в элементах и фрагментах кремниевых БИС и СБИС // Электронное моделирование. 1992. Т. 14, № 4. С. 49—56.

8. 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. Vol. 164, N 30. P. 435—441.

9. 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. Vol. 529, N 11. P. 1700106-1-9.

10. Lu N., Wang L., Li L., Liu M. A review for compact model of graphene field-effect transistors // Chinese Physics B. 2017. Vol. 26, N 3. Article 036804.

11. Aguirre-Morales D. Characterization and modeling of graphene-based transistors towards high frequency circuit applications. Thesis. University of Bordeaux. Chapter 2. Bilayer GFET compact model. 2016. P. 77—100.

12. Cheli M., Fiori G., Iannaccone G. A semiclassical model of bilayer graphene field-effect transistor // IEEE Trans. on Elect. Dev. 2009. Vol. 56, N. 12. P. 2927—2986.

13. Ryzhii V., Ryzhii M., Satou A., Otsuji T., Kirova N. Device model for graphene bilayer field-effect transistor // J. Appl. Phys. 2009. Vol. 105. P. 104510-1-9.

14. 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. 118—125.

15. 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.

16. Abramov I. I., Labunov V. A., Kolomeitseva 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. Edited by Vladimir F. Lukichev, Konstantin V. Rudenko. 2019. Vol. 110222. P. 1102220F-1-11.

17. Abramov I. I., Labunov V. A., Kalameitseva 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. Ed. by V. F. Lukichev, K. V. Rudenko. 2022. Vol. 12157. P. 121570X-1-6.

18. Абрамов И. И., Лабунов В. А., Коломейцева Н. В., Щербакова И. Ю. Моделирование приборных структур на основе двухслойного графена и 2D-материалов с помощью системы Nanodev // X Международная научная конференция "Материалы и структуры современной электроники", Минск, БГУ. 2022. С. 330—334.

19. Kanayama K., Nagashio K. Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer graphene // Scientific reports. 2015. Vol. 5. P. 15789-1-9.

20. Dragoman M., Dragoman D. 2D Nanoelectronics. Physics and devices of atomically thin materials. NanoScience and Technology. Springer, 2017. 199 p.

21. Ferrari A., Bonaccorso A. C., Fal'ko F., Novoselov V., et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimen-

sional crystals, and hybrid systems // *Nanoscale*. 2015. Vol. 7. P. 4598–4810.

22. **Miro P., M. Audiffred, Heine T.** An atlas of two-dimensional materials // *Chem. Soc. Rev.* 2014. Vol. 43. Article. 6537.

23. **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. Vol. 4, N. 28. P. 1–6.

24. **Чернозатонский Л. А., Артюх А. А.** Квазидвумерные дихалькагениды переходных металлов: структура, синтез, свойства и применение // *Успехи физических наук*. 2018. Т. 188, № 1. С. 3–30.

25. **Larentis S., Tolsma J. R., Dillen D. C., Kim K., MacDonald A. H., Tutuc E.** Band offset and negative compressibility in Graphene-MoS₂ heterostructures // *Nanoletters*. 2014. Vol. 14. P. 2039–2045.

26. **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*. Ed. by V. F. Lukichev, K. V. Rudenko. 2022. Vol. 12157. P. 121570U-1-9.

27. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А., Коломейцева Н. В.** Комбинированная модель резонансно-туннельного диода // *Физика и техника полупроводников* // 2005. Т. 39, № 9. С. 1138–1145.

28. **Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Батура М. П., Ермак В. О.** Инструментарий для расчета характеристик гетероструктур, содержащих GaN, SiC и графен // *СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии*. Вып. 6: Сб. науч. тр., Севастополь, Севастопольский гос. университет, 2024. С. 112–113.

29. **Абрамов И. И., Лабунов В. А., Коломейцева Н. В., Романова И. А., Щербактова И. Ю.** Численное моделирование трехбарьерных резонансно-туннельных диодов на основе графена // *Ural Radio Engineering Journal*. 2019. Т. 3, № 4. С. 343–355.

30. **Zhang Y., Tang T.-T., Girit C., Hao Z., Martin M. C., Zetl A., Crommie M. F., Shen Y. R., Wang F.** Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene // *Nature*. 2009. Vol. 459, N. 7248. P. 820–823.

31. **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. Vol. 80. Article. 35402.

32. **Cantos F. P.** Modelling of field-effect transistors based on 2D materials targeting high-frequency applications, Ph.D. dissertation, Universitat Autònoma de Barcelona, 2017, 165 p.

33. **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.

34. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А.** Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // *Электромагнитные волны и электронные системы*. 2002. Т. 7, № 3. С. 54–60.

35. **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.

I. I. Abramov, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, e-mail: nanodev@bsuir.edu.by

N. V. Kalameitsava, Senior Researcher, **V. A. Labunov**, Dr. Sci. (Tech.), Academician of NASB, Academician of RAS, Professor, Head of Laboratory,

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, 220013, Belarus

Corresponding author:

Abramov Igor I., Dr.Sci., Professor, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, 220013, Belarus, e-mail: nanodev@bsuir.edu.by

Simulation of Perspective Devices of Nanoelectronics. Part I. Models

Received on February 20, 2025

Accepted on March 31, 2025

In the paper models of perspective devices based on 2D-materials such as a quantum drift-diffusion model of field-effect transistors on bilayer graphene, model of resonant tunneling structures based on 2D-materials with vertical transport and model of resonant tunneling diodes including GaN with vertical transport were proposed. Investigations of IV-characteristics of device structures including mono- and bilayer graphene, molybdenum dioxide, carbon silicide, wolfram diselenide, gallium nitride were carried out with the using of proposed models.

In the part I the proposed models have been considered.

Keywords: field-effect transistor, mono- and bilayer graphene, IV-characteristic, combined model, simulation, 2D-materials, resonant tunneling structures

For citation:

Abramov I. I., Kalameitsava N. V., Labunov V. A. Simulation of Perspective Devices of Nanoelectronics. Part I. Models, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika*, 2025, vol. 27, no. 4, pp. 167–172.

DOI: 10.17587/nmst.27.167-172

References

1. Abramov I. I., Kalameitsava N. V., Labunov V. A., Romanova I. A., Shcherbakova I. Y. Simulation of nanoelectronic device structures based on 2D materials, *Journal Nanotechnology: development and applications* — XXI Century, 2023, vol. 15, no. 1, pp. 54–68 (In Russian).
2. Ratnikov P. V., Silin A. P. Two-dimensional graphene electronics: current status and prospects, *Phys. Usp.*, 2018, vol. 188, no. 12, pp. 1249–1286 (In Russian).
3. Feijoo P. C., Pasadas F., Bonmann M., Asad M., Yang X., Generalov A., Vorobiev A., Banszerus L., Stampfer C., 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, vol. 2, pp. 4179–4186.
4. Bonmann M., Asad M., Yang X., Generalov A., Vorobiev A., Banszerus L., Stampfer C., Otto M., Neumaier D., Stake J. Graphene field-effect transistors with high extrinsic f_T and $f_{\max}$, *IEEE Electron Dev. Lett.*, 2019, vol. 40, no. 1, pp. 131–134.
5. Abramov I. I. Bases of micro- and nanoelectronic devices simulation. LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2016, 444 p. (In Russian).
6. Abramov I. I. Lektsii po modelirovaniyu elementov integral'nykh skhem mikroelektroniki. LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2012, 116 p. (In Russian).
7. Abramov I. I., Kharitonov V. V. Chislennoye modelirovaniye fizicheskikh protsessov v elementakh i fragmentakh kremniyevykh BIS i SBIS, *Elektronnoye modelirovaniye*, 1992, vol. 14, no. 4, pp. 49–56 (In Russian).
8. 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, vol. 164, no. 30, pp. 435–441.
9. 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, vol. 529, no. 11, pp. 1700106–19.
10. Lu N., Wang L., Li L., Liu M. A review for compact model of graphene field-effect transistors, *Chinese Physics B*, 2017, vol. 26, no. 3, article 036804.
11. Aguirre-Morales D. Characterization and modeling of graphene-based transistors towards high frequency circuit applications. Thesis. University of Bordeaux. Chapter 2. Bilayer GFET compact model, 2016, pp. 77–100.
12. Cheli M., Fiori G., Iannaccone G. A semiclassical model of bilayer graphene field-effect transistor, *IEEE Trans. on Elect. Dev.*, 2009, vol. 56, no. 12, pp. 2927–2986.
13. Ryzhii V., Ryzhii M., Satou A., Otsuji T., Kirova N. Device model for graphene bilayer field-effect transistor, *J. Appl. Phys.*, 2009, vol. 105, pp. 104510–1-9.
14. Abramov I. I., Kolomeitseva N. V., Labunov V. A., Romanova I. A., Shcherbakova I. Yu. Influence of gate dielectrics of field-effect graphene transistors on current-voltage characteristics, *Russian Microelectronics*, 2021, vol. 50, no. 2, pp. 118–125.
15. Abramov I. I., Kolomeitseva N. V., Labunov V. A., Romanova I. A., Shcherbakova I. Y. Simulation of graphene field-effect transistors with one and two gates in various operation modes, *Nanotechnologies, developing, application: XXI century*, 2018, no. 3, pp. 16–24.
16. Abramov I. I., Labunov V. A., Kolomeitseva 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*, ed. by V. F. Lukichev, K. V. Rudenko, 2019, vol. 110222, pp. 1102220F-1-11.
17. 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*, ed. by V. F. Lukichev, K. V. Rudenko, 2022, vol. 12157, pp. 121570X-1-6.
18. Abramov I. I., Labunov V. A., Kalameitsava N. V., Shcherbakova I. Y. Simulation of device structures based on bilayer graphene and other 2D-materials with the use of system Nanodev. X International science conference "Materials and structures of modern electronics", Minsk, BSU, 2022, pp. 330–334 (In Russian).
19. Kanayama K., Nagashio K. Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer grapheme, *Scientific reports*, 2015, vol. 5, pp. 15789-1-9.
20. Dragoman M., Dragoman D. 2D Nanoelectronics. Physics and devices of atomically thin materials, NanoScience and Technology, Springer, 2017, 199 p.
21. Ferrari A., Bonaccorso A. C., Fal'ko F., Novoselov V., et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems, *Nanoscale*, 2015, vol. 7, pp. 4598–4810.
22. Miro P., M. Audiffred, Heine T. An atlas of two-dimensional materials, *Chem. Soc. Rev.*, 2014, vol. 43, article. 6537.
23. Laturia A., Van de Put M. L., Vandenbergh W. G. Dielectric properties of hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides: from monolayer to bulk, *2D Materials and applications*, 2018, vol. 4, no. 28, pp. 1–6.
24. Chernozatonskii L. A., Artyukh A. A. Quasi-two-dimensional transition metal dichalcogenides: structure, synthesis, properties and applications, *Phys. Usp.*, 2018, vol. 61, pp. 2–28.
25. Larentis S., Tolsma J. R., Dillen D. C., Kim K., MacDonald A. H., Tutuc E. Band offset and negative compressibility in Graphene-MoS₂ heterostructures, *Nanoletters*, 2014, vol. 14, pp. 2039–2045.
26. 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*, ed. by V. F. Lukichev, K. V. Rudenko, 2022, vol. 12157, pp. 121570U-1-9.
27. Abramov I. I., Goncharenko I. A., Kolomeitseva N. V. A combined model of a resonant-tunneling diode, *Semiconductors*, 2005, vol. 39, no. 9, pp. 1102–1109.
28. Abramov I. I., Kalameitsava N. V., Batura M. P., Yermak V. O. Software for calculation of IV-characteristics of heterostructures including GaN, SiC and graphene // 34th International Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology", Russia, Sevastopol, 2024, is. 6, pp. 112–113 (In Russian).
29. Abramov I. I., Labunov V. A., Kolomeitseva N. V., Romanova I. A., Shcherbakova I. Y. Numerical simulation of triple-barrier resonant tunneling diodes based on graphene, *Ural Radio Engineering Journal*, 2019, vol. 3, no. 4, pp. 343–355.
30. 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, vol. 459, no. 7248, pp. 820–823.
31. 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, vol. 80, article 35402.
32. Cantos F. P. Modelling of field-effect transistors based on 2D materials targeting high-frequency applications, Ph.D. dissertation, Universitat Autònoma de Barcelona, 2017, 165 p.
33. 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.
34. Abramov I. I., Goncharenko I. A. Combined numerical model of a resonant-tunneling diode, *Elektromagnitnyye volny i elektronnyye sistemy*, 2002, vol. 7, no. 3, pp. 54–60 (In Russian).
35. Abramov I. I., Goncharenko I. A., Kolomeitseva N. V. Two-band combined model of a resonant-tunneling diode, *Semiconductors*, 2007, vol. 41, no. 11, pp. 1395–1400.