Компьютерное моделирование вертикальных резонансно-туннельных гетероструктур, содержащих GaN, SiC и графен

Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Ермак В.О.

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

Аннотация: В статье рассмотрено теоретическое исследование характеристик гетероструктур, содержащих GaN, SiC и графен с вертикальным транспортом, полученных с использованием комбинированной модели, модифицированной на случай вертикального транспорта.

1. Введение

Актуальность моделирования наноэлектронных приборов на основе гетероструктур, включающих GaN, SiC и графен, подтверждена рядом исследований [1,2]. Теоретическое исследование резонансно-туннельных гетероструктур может проводится с помощью различных физико-математических моделей, основанных на различных методах, например с использованием комбинированных моделей, учитывающих влияние как активных, так и пассивных областей устройства, прилегающих к контактам [1].

2. Модель. Результаты моделирования

Разработанная модель резонансно-туннельных структур, модифицированная на случай вертикального транспорта была использована при моделировании характеристик приборных структур, включающих GaN, SiC и графен. Модель позволяет осуществлять выбор оптимальных параметров рассчитываемых приборных структур. Описание основных уравнений Шредингера и Пуассона, использованных при ее построении, а также программная реализация модели описаны в [3].

С использованием предложенной модели проведены расчеты вольт-амперных (BAX) двух- и трехбарьерных гетероструктур на основе материальной системы GaN/SiC/графен при комнатной температуре (рис. 1 и рис. 2). Исследуемые гетероструктуры состоят из следующих областей: 1) приконтактные области GaN протяженностью 20 нм; 2) спейсерные области GaN протяженностью 5 нм; 3) активная область, состоящая из потенциальных барьеров SiC протяженностью 1 нм и трехслойных графеновых квантовых ям. Исследовано влияние точности

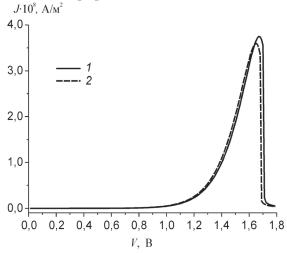


Рис. 1. Вольт-амперные характеристики двухбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур GaN/SiC/графен, рассчитанные при различном количестве шагов сетки пространственной дискретизации:1) NStep = 530; 2) NStep = 1060

расчетов на ВАХ данных гетероструктур. Показано, что в обоих случаях повышение точности расчетов приводит к уточнению значений пиковых токов и пиковых напряжений. Уточненные значения с шагом 0,5 ангстрем немного ниже полученных первоначально с шагом 1 ангстрем, традиционно используемом при расчете наноразмерных структур. При использовании материалов

толщиной в несколько атомных слоев предпочтительно использовать сетку пространственной дискретизации с меньших шагом, как показано на рис. 1 и рис. 2. Кривая 1 соответствует значению 530 шагов равномерной сетки пространственной дискретизации, кривая 2 — значению 1060, как показано на рис. 1. Аналогично на рис. 2 кривая 1 соответствует значению NStep= 550, кривая 2 — NStep = 1100. При расчете двухбарьерных гетероструктур получены достаточные пиковые значения плотностей токов для использования данных структур в качестве резонансно-туннельных диодов. Однако значения контрастности слишком низкие. В случае трехбарьерных структур, заметно улучшены токи долины, но значения пиковых токов ниже на три порядка по сравнению с двухбарьерными гетероструктурами. Таким образом, качественно предпочтительнее ВАХ трехбарьерных структур, а количественно — ВАХ двухбарьерных гетероструктур.

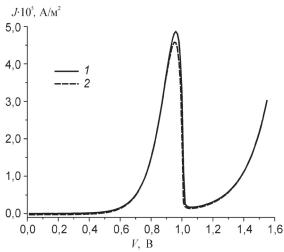


Рис. 2. Вольт-амперные характеристики трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур GaN/SiC/графен, рассчитанные при различном количестве шагов сетки пространственной дискретизации:1) NStep = 550; 2) NStep = 1100.

3. Заключение

В работе с помощью разработанного программного обеспечения, реализующего комбинированнную модель резонансно-туннельных гетероструктур, исследованы двух- и трехбарьерные гетероструктуры на основе GaN/SiC/графен с вертикальным транспортом с учетом различного количества шагов сетки пространственной дискретизации. Установлено, что для данных гетероструктур достаточным является шаг равномерной сетки равный 0,5 ангстрем.

Разработанная модель включена в систему моделирования наноэлектронных приборов NANODEV[4-6].

Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований "Фотоника и электроника для инноваций", подпрограмма "Микро- и наноэлектроника" Республики Беларусь.

Список литературы

- 1. Абрамов И. И. Основы моделирования элементов микро- и наноэлектроники. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. 444 с.
- 2. Барыкин Д. А., Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Мухин И. С. Численное моделирование туннельного эффекта в гетероструктуре нитрида галлия на кремнии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3.
- 3. 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.
- 4. 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.
- 5. 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.
- 6. Abramov I. I., Labunov V. A., Kolomejtseva N. V., Romanova I. A., Shcherbakova I. Y. Influence of gate dielectrics of field-effect graphene transistors on current-voltage characteristics // Russian Microelectronics. 2021. V. 50. N 2. P. 118-125.