Моделирование характеристик трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур, включающих 2D-области, на основе $MoS_2/MoTe_2$ с вертикальным транспортом

Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Ермак В.О., Батура М.П.

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

Аннотация: *В статье рассмотрено моделирование вольт-амперных характеристик (ВАХ) трехбарьерных гетероструктур на основе $MoS_2/MoTe_2$ с вертикальным транспортом. Моделирование выполнено с помощью программного обеспечения, реализующего комбинированную модель, основанную на решении уравнений Шредингера и Пуассона, и разработанную в научно-исследовательской лаборатории «Физика приборов микро- и наноэлектроники». Проведено теоретическое исследование влияния ширины потенциальных барьеров на электрические характеристики исследуемых гетероструктур.*

1. Введение

Перспективным направлением современной наноэлектроники является разработка приборов на основе 2D-материалов. Одним из важных этапов разработки наноэлектронных приборов является моделирование [1]. Анализу структур на основе $MoS_2/MoTe_2$ посвящена данная работа.

2. Модель. Результаты моделирования

Исследование проведено с помощью модели резонансно-туннельных гетероструктур, основанной на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона, и позволяющей учитывать влияние приконтактных областей на характеристики прибора. Ее подробное описание изложено в [2,3]. Модель включена в систему моделирования наноэлектронных приборов NANODEV[4].

Рассмотрим трехбарьерную гетероструктуру на основе 2D-материалов, в частности дихалькогенидов, таких как MoS_2, $MoTe_2$. К активной области исследуемой гетероструктуры на основе $MoS_2/MoTe_2$ с вертикальным транспортом относятся области барьеров с ширинами $w_{b1} = w_{b2} = w_{b3}$ =1,4 нм, что соответствует двум слоям $MoTe_2$ [5] ,и высотой $H_b = 0,47$ эВ [6], а также квантовые ямы между ними с ширинами w_{d1} и w_{d2}, равными 4 слоям MoS_2. Пассивными областями для структуры являются приконтактные области MoS_2 со стороны эмиттера и коллектора протяженностью 20 нм каждая легированные донорной примесью с концентацией $N_D=2,0\cdot10^{24}$ м$^{-3}$. Эффективная масса для $MoTe_2$ задавалась равной $0,64m_0$, где m_0 – масса покоя электрона [7]. В работах различных авторов встречаются различные значения параметров 2D-материалов, в частности, в работе [8] эффективная масса носителей заряда в MoS_2 равна $0,45m_0$, а в статье [7] при задании исходных данных было использовано значение эффективной массы электронов равное $0,56m_0$. Был также проведен расчет характеристик трехбарьерных гетероструктур на основе $MoS_2/MoTe_2$ с вертикальным транспортом при различных значениях этого важного параметра (рис. 1).

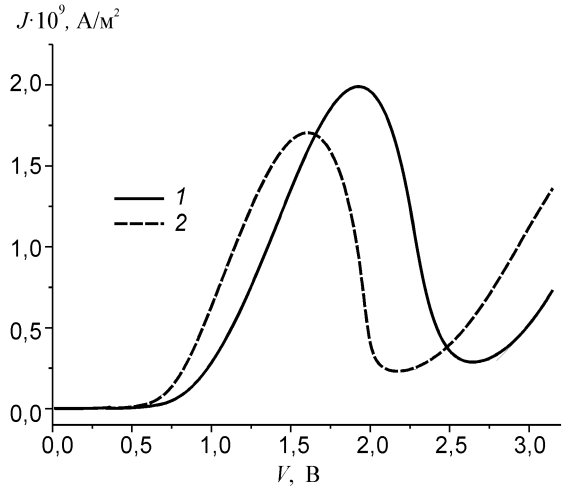
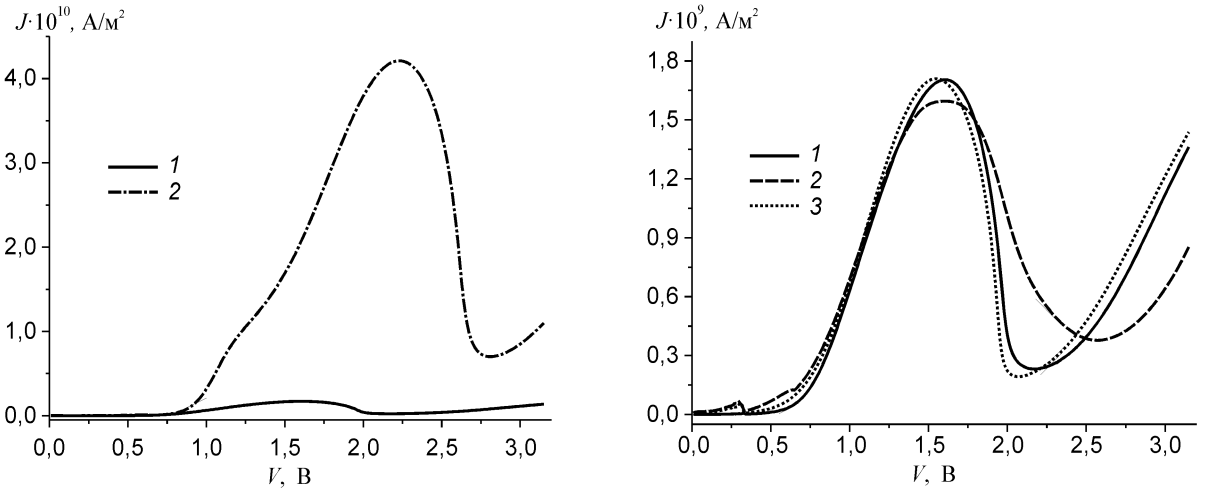


Рис. 1. ВАХ трехбарьерной резонансно-туннельной гетероструктуры на основе $MoS_2/MoTe_2$ с различной эффективной массой: 1) $m^*=0,45m_0$; 2) $m^*=0,56m_0$.

Установлено, что пиковые токи увеличиваются с уменьшением значения эффективной массы, а пиковые напряжения смещаются в область более высоких значений. Дальнейшие расчеты проводились при $m^*=0{,}56m_0$ и температуре окружающей среды равной 300 К. Варьировались ширины потенциальных барьеров исследуемой гетероструктуры на основе $MoS_2/MoTe_2$ с вертикальным транспортом. На рис. 2 приведены результаты моделирования для четырех случаев, а именно: 1) ширины всех трех барьеров составляют 2 слоя (рис. 2а и рис.2б, кривая 1); 2) ширина первого барьера составляет 1 слой, а ширина второго и третьего барьеров равна 2 слоям (рис. 2а, кривая 2); 3) ширина первого и третьего барьеров равна 2 слоям, а ширина второго барьера – одному слою (рис. 2б, кривая 2); 4) ширина первого и второго барьера равна 2 слоям, а ширина третьего барьера – 1 слою (рис.2б, кривая 3). Установлено, что уменьшение ширины первого барьера до 1 слоя оказывает наибольшее влияние на ВАХ исследуемой гетероструктуры. При этом наблюдается значительное увеличение плотности тока (более чем на порядок) и смещение пикового напряжения в область более высоких значений. В целом все полученные ВАХ характеризуются высоким значением контрастности, что говорит о перспективности данной гетероструктуры для изготовления резонансно-туннельных диодов на данной системе материалов.



а)
1) $w_{b1}= w_{b2}= w_{b3}$=1,4 нм;
2) w_{b1}= 0,7 нм; $w_{b2}= w_{b3}$=1,4 нм.

б)
1) $w_{b1}= w_{b2}= w_{b3}$=1,4 нм; 2) $w_{b1}= w_{b3}$=1,4 нм; w_{b2}= 0,7 нм;
3) $w_{b1}= w_{b2}$=1,4 нм; w_{b3}= 0,7 нм.

Рис. 2. ВАХ трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктур на основе $MoS_2/MoTe_2$ с различной шириной потенциальных барьеров $MoTe_2$

3. Заключение

В докладе с использованием предложенной комбинированной модели исследовано влияние ширины потенциальных барьеров на электрические характеристики трехбарьерных гетероструктур на основе $MoS_2/MoTe_2$ с вертикальным транспортом.

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

Список литературы

1. Абрамов И. И. Основы моделирования элементов микро- и наноэлектроники. – Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. 444 с.
2. Абрамов И. И., Коломейцева Н. В., Лабунов В. А. Моделирование перспективных приборов наноэлектроники. Часть I. Модели // Нано- и микросистеманя техника. 2025. Т. 27. № 4. С. 167-172 .
3. Abramov I. I., Labunov V. A., Kalameitsava N. V. Simulation of field-effect transistors based on bilayer graphene and resonant-tunneling heterostructures based on 2D-materials with vertical transport // Russian Microelectronics. 2025. V. 54. N 8. P. 953-957.
4. 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.
5. 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.
6. Kang J. , Tongay S., Zhou J., Li J., Wu J. Band offsets and heterostructures of two-dimensional semiconductors // Appl. Phys. Lett. 2013. V. 102. P. 012111-1-5.
7. Gholipour M., Chen Y.-Y., Chen D. Compact modeling to device- and circuit-level evaluation of flexible TMD field-effect transistors // IEEE Trans. on CAD of IC and Systems. 2017. DOI 10.1109/TCAD.2017.2729460.
8. Dragoman M., Dragoman D. 2D Nanoelectronics. Physics and devices of atomically thin materials. 2017. NanoScience and Technology. Springer. 199 p.