

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Сумський державний університет

Класичний фаховий коледж

(повна назва інституту/факультету)

(повна назва кафедри)

«До захисту допущено»

(підпис)

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

20__ р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня бакалавр

(бакалавр / магістр)

зі спеціальності 171Електроніка

(код та назва)

освітньо-професійної програми Електронні інформаційні системи

(освітньо-професійної / освітньо-наукової)

(назва програми)

на тему: Чисельне моделювання структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів

Здобувача групи ЕІс-91к

(шифр групи)

Бугая Владислава Євгенійовича

(прізвище, ім'я, по батькові)

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

(підпис)

Владислав Бугай

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник викладач, к.ф.-м.н., доцент, Іван Бурик

(посада, науковий ступінь, вчене звання, ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

Консультант¹⁾

(посада, науковий ступінь, вчене звання ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

АНОТАЦІЯ

Обґрунтуванням актуальності теми є потенціал застосування двовимірних наноматеріалів в електроніці через їх унікальні фізичні властивості.

Мета роботи полягає у вивченні та застосуванні чисельних методів для моделювання структури та електронних характеристик транзисторів із каналом на основі двовимірних наноматеріалів.

Відповідно до мети, вирішувалися такі задачі:

- вивчення моделей, які враховують особливості транспорту носіїв у 2D-матеріалах;
- аналіз потенційних застосувань 2D-матеріалів у приладобудуванні

При виконанні даної роботи 2D-матеріалів використовувалися методи чисельного моделювання структури та характеристик польових транзисторів із каналами на основі двовимірних наноматеріалів.

Результати дослідження показали, що транзистори із каналом на основі молібден сульфідів та інших мають великий потенціал для поліпшення робочих характеристик порівняно з традиційними транзисторами. Вони відзначаються високою швидкістю роботи, низькою енергоспоживанням та великими коефіцієнтами підсилення. Отримані результати є важливим внеском у розуміння та розвиток нових технологій транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів.

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні процеси в польових транзисторах на основі двовимірних наноматеріалів.

Предмет досліджень комп'ютерне моделювання структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів.

Робота викладена на 32 сторінках, у тому числі включає 7 рисунків, список цитованої літератури із 36 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: двовимірні наноматеріали, транзистори, чисельне моделювання, електронні характеристики, молібден сульфідів

ЗМІСТ

	С.
ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1 ТРАНЗИСТОРИ ІЗ КАНАЛАМИ У ВИГЛЯДІ ДВОВИМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ	5
1.1. Огляд двовимірних наноматеріалів та їх властивостей.....	5
1.2. Роль двовимірних наноматеріалів у сучасній електроніці.....	7
1.3. Параметри двовимірних польових транзисторів.....	9
РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ	12
2.1. Моделювання транспорту носіїв у двовимірних транзисторах.....	12
2.2. Балістичні моделі для нанорозмірних транзисторів	15
2.3. Визначення характеристик транзисторів.....	19
РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ	21
3.1. Характеристики польових транзисторів із каналом на основі молібден сульфіду.....	21
3.2. Виявлення ключових факторів, що впливають на характеристики двовимірних транзисторів.....	24
ВИСНОВКИ	27
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	28
ДОДАТОК А. СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ	32

ВСТУП

Ця робота присвячена чисельному моделюванню структури та характеристик транзисторів, які виготовлені на основі двовимірних наноматеріалів. Двовимірні наноматеріали, такі як графеноподібні матеріали або молекулярні шари, мають унікальні електронні властивості, що дозволяють їх використовувати для створення нових типів транзисторів з покращеними характеристиками.

У цій роботі була розглянута чисельна модель, яка дозволяє досліджувати вплив різних параметрів на структуру та електронні характеристики таких транзисторів. Класичні моделі базуються на рівняннях Пуассона та транспорту електронів у напівпровідникових матеріалах, вони були розроблені з використанням чисельних методів.

За допомогою класичних та квантових моделей, були проведені чисельні експерименти для аналізу впливу різних параметрів на ефективність і швидкість роботи транзисторів на основі 2D-матеріалів. Ключовими залишаються такі параметри, як товщина каналу, концентрація носіїв заряду та висота бар'єрів.

Отримані результати вказують на те, що транзистори на основі двовимірних наноматеріалів можуть мати покращені електронні характеристики порівняно з традиційними транзисторами. Вони демонструють високу швидкість комутації та низьку енергетичну споживання, що робить їх привабливими для застосувань в електроніці та інших сферах.

Ця робота вносить важливий внесок у розуміння структури та електронних характеристик транзисторів на основі 2D-матеріалів та може послужити основою для подальших досліджень і розвитку нових технологій в області напівпровідникових приладів.

РОЗДІЛ 1

ТРАНЗИСТОРІ ІЗ КАНАЛАМИ У ВИГЛЯДІ ДВОВИМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ

1.1. Огляд двовимірних наноматеріалів та їх властивостей

Двовимірні наноматеріали є класом матеріалів, які мають структуру та властивості, залежні від двох просторових координат. Вони представляють собою матеріали, які мають вкладену атомну або молекулярну структуру в двох вимірах, при цьому їх товщина відносно незначна у порівнянні з іншими розмірами [1-5]. Як приклад на рис.1.1 приведена діаграма, що відображає бібліотеку двовимірних матеріалів. BSCCO – це оксид вісмуту, стронцію, кальцію і міді, а BCN або боркарбонітрид – це суміш бору, вуглецю та азоту.

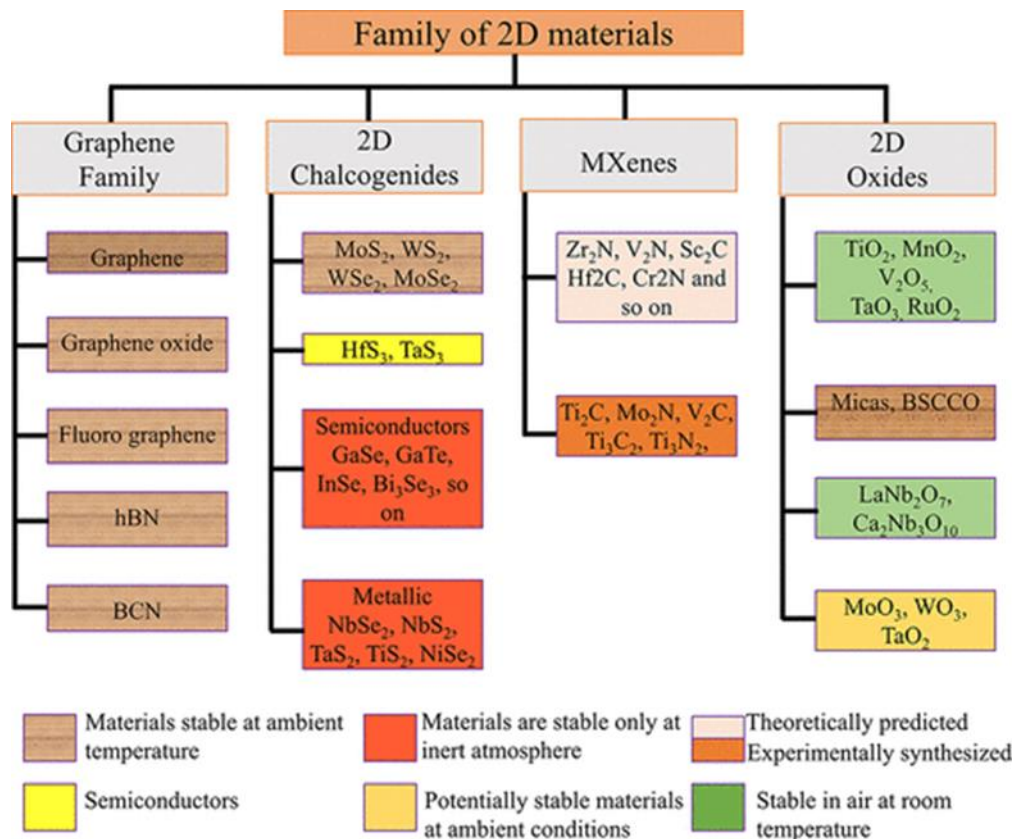


Рис.1.1. Бібліотека двовимірних матеріалів [2]

Одним з найвідоміших двовимірних наноматеріалів є графен. Графен є одношаровим кристалічним вуглецем, утвореним з атомів вуглецю, що утворюють шестикутний гексагональний шар (рис.1.2). Він має унікальні властивості, такі як висока електропровідність, висока механічна міцність і прозорість.

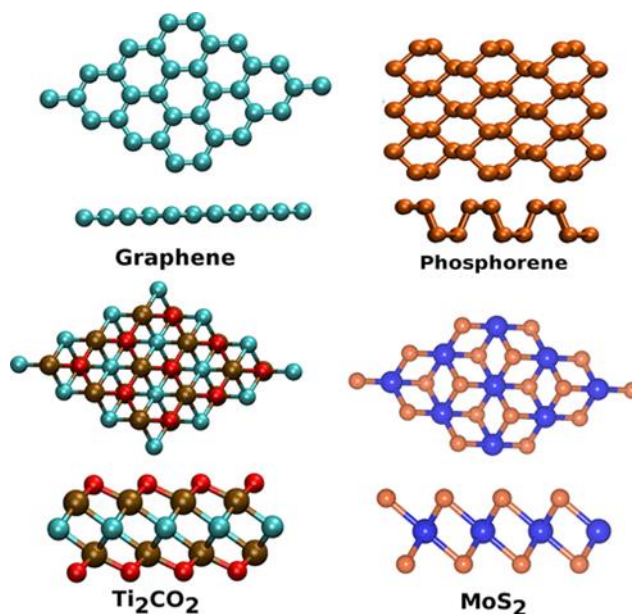


Рис.1.2. Структура двовимірних матеріалів [2]

Крім графену, існує також багато інших двовимірних наноматеріалів, які мають властивості, що відрізняються від багатовимірних форм тих самих матеріалів. Як приклад молекулярні стрічки представляють собою двовимірні структури, утворені з однієї або декількох молекул, які мають властивості, залежні від їх хімічного складу та конфігурації. Вони можуть мати різні властивості, такі як напівпровідникова поведінка або феромагнетизм.

Перовськітові матеріали – клас нанокристалічних матеріалів, які мають кристалічну структуру, схожу на структуру мінералу перовськіту. Вони мають широкий спектр застосувань у фотоелектриці, оптоелектроніці та каталізі.

Моношари двоковалентних матеріалів – двовимірні матеріали, які складаються з одного шару атомів одного хімічного елемента.

На рис.1.2 приведено також структуру моношарів на основі перехідних металів, таких як молібден (MoS_2) та вольфрам (WS_2), що мають унікальні електронні та оптичні властивості.

1.2. Роль двовимірних наноматеріалів у сучасній електроніці

З моменту відкриття графену в 2004 році спостерігається значний прогрес у дослідженнях двовимірних матеріалів [1-4], яких на сьогодні отримано велику кількість. Поряд з цим можна виділити окремий великий клас шаруватих структур, складених з халькогенідів (S, Se, Te) та перехідних металів (Mo, W, Cr, Zr, V, Ti, Nb, Hf, Ta, Pd, Pt) за формулою MeX_2 . Через характерну субнанометрову товщину та листоподібну структуру їх електронні, оптоелектронні, фізичні та хімічні властивості надзвичайно привабливі та викликають дослідницький інтерес [2-5]. Транспорт носіїв (електрон/дірка), фононів і фотонів сильно обмежений зовнішніми поверхнями двовимірних матеріалів. Під впливом розмірного ефекту фіксуються зміни їх електронних, теплових та оптичних властивостей. Це відмічається в ряді робіт [2-9] присвячених цим питанням

Слід відмітити, що двовимірні матеріали демонструють незначну зміну рухливості носіїв заряду зі зменшенням товщини [2-5]. Поряд з цим багат шарові структури не конкурують з об'ємними (такими як Si або GaAs), тоді як двовимірні матеріали часто демонструють очевидні переваги в діапазні суб-3 нм товщин, що є суттєвим для продовження масштабування транзистора. Згідно авторів [2] рухливість Si швидко зменшується з товщиною в інтервалі нижче 5 нм, тоді як рухливість двовимірних матеріалів мало залежить від товщини і значно вища в цьому випадку.

Двовимірні транзистори також демонструють набагато менше підпорогове коливання, що важливо для постійного масштабування довжини затвора до режиму нижче 10 нм. Зберігаючи високу електронну провідність на кінцевому рівні обмеження (<1 нм) може дозволити використовувати транзистори з довжиною затвора менше 10 нм, зберігаючи при цьому досить невелике підпорого-

ве коливання та низький струм витоку, що важко досягти за допомогою кремнієвої електроніки, навіть якщо використовуються передові конструкції FinFET. Таким чином, застосування атомарно двовимірних матеріалів забезпечують шлях до вузлів із 5 нм технологією [2-5].

1.3. Параметри двовимірних польових транзисторів

Двовимірні польові транзистори мають особливу структуру, яка відрізняється від традиційних тривимірних MOSFET-транзисторів. Двовимірні польові транзистори базуються на тонких шарах матеріалу, таких як графен, перовскітні матеріали або інші двовимірні матеріали. Основною структурою двовимірних польових транзисторів є транзистор з графену (Graphene Field-Effect Transistor, GFET), тому наведу опис саме цієї структури.

В основі GFET знаходиться один або кілька шарів графену. Графен - це моношаровий шар вуглецю, який має унікальні електронні властивості, такі як висока мобільність електронів. Під графеновим шаром зазвичай знаходиться підкладка або ізоляційний шар, який забезпечує опору для формування каналу транзистора. Верхній шар структури - це гейт (затвор), який використовується для керування струмом в каналі графену. Гейт зазвичай складається з металу або діелектрика. Під графеновим шаром знаходяться витік і стік - електроди, через які проходить струм. Джерело постачає електрони, а стік приймає електрони після проходження через канал.

Змінна напруги, яка застосовується до гейту, дозволяє керувати електронною провідністю каналу. Коли напруга на гейті змінюється, змінюється електронна концентрація в каналі, що призводить до зміни струму, що протікає через транзистор.

Варіації двовимірних польових транзисторів можуть включати різні структури і конфігурації, залежно від матеріалу, який використовується, і конкретного дизайну пристрою [3]. Однак, загальна ідея полягає в створенні каналу у тонкому шарі матеріалу і використанні гейта для керування провідністю цього

каналу. На рис 1.3 наведені типові параметри двовимірного польового транзистора. Структура польового транзистора складається з металевого затвору, напівпровідникового каналу між витоком та стоком, ізолюючим оксидом затвора (бар'єр між каналом і затвором). Струм в каналі напівпровідника (струм стоку, I_D) визначається напругою джерело-стік (V_{DS}) і модулюється прикладеною напругою затвора (V_{GS}) шляхом зміни провідності каналу.

Двовимірні польові транзистори, такі як транзистори на основі графену або транзистори на основі перовскітних матеріалів, мають деякі основні параметри, які визначають їхню ефективність і функціональні можливості. Ось деякі з найважливіших параметрів двовимірних польових транзисторів [1-3]:

- транзисторний коефіцієнт підсилення (Transconductance, g_m) вказує на залежність вихідного струму транзистора від вхідного напруги; велике значення транзисторного коефіцієнта підсилення означає більшу ефективність транзистора;
- ефективна довжина каналу (Effective Channel Length, L_{eff}) – відстань вздовж каналу, де відбувається перенесення заряду; менша ефективна довжина каналу дозволяє досягти вищої швидкодії транзистора;
- насичена напруга стоку (Saturation Drain Voltage, V_{dsat}) – це напруга між стоком і джерелом транзистора, при якій канал досягає насиченого стану; чим вище насичена напруга стоку, тим більша можлива вихідна потужність транзистора;
- максимальна густина струму (Maximum Current Density) – максимальна густина струму, яку транзистор може переносити через свій канал; велика максимальна струмова густина дозволяє транзистору працювати при високих потужностях;
- опір каналу (Channel Resistance) – опір каналу транзистора, який впливає на втрати потужності та ефективність пристрою; менший опір каналу означає менші втрати потужності і кращу ефективність;
- порогова напруга (Threshold Voltage, V_{th}) – це напруга, яка необхідна для ввімкнення транзистора і початку провідності у каналі; цей параметр визначає вольт-амперну характеристику транзистора;

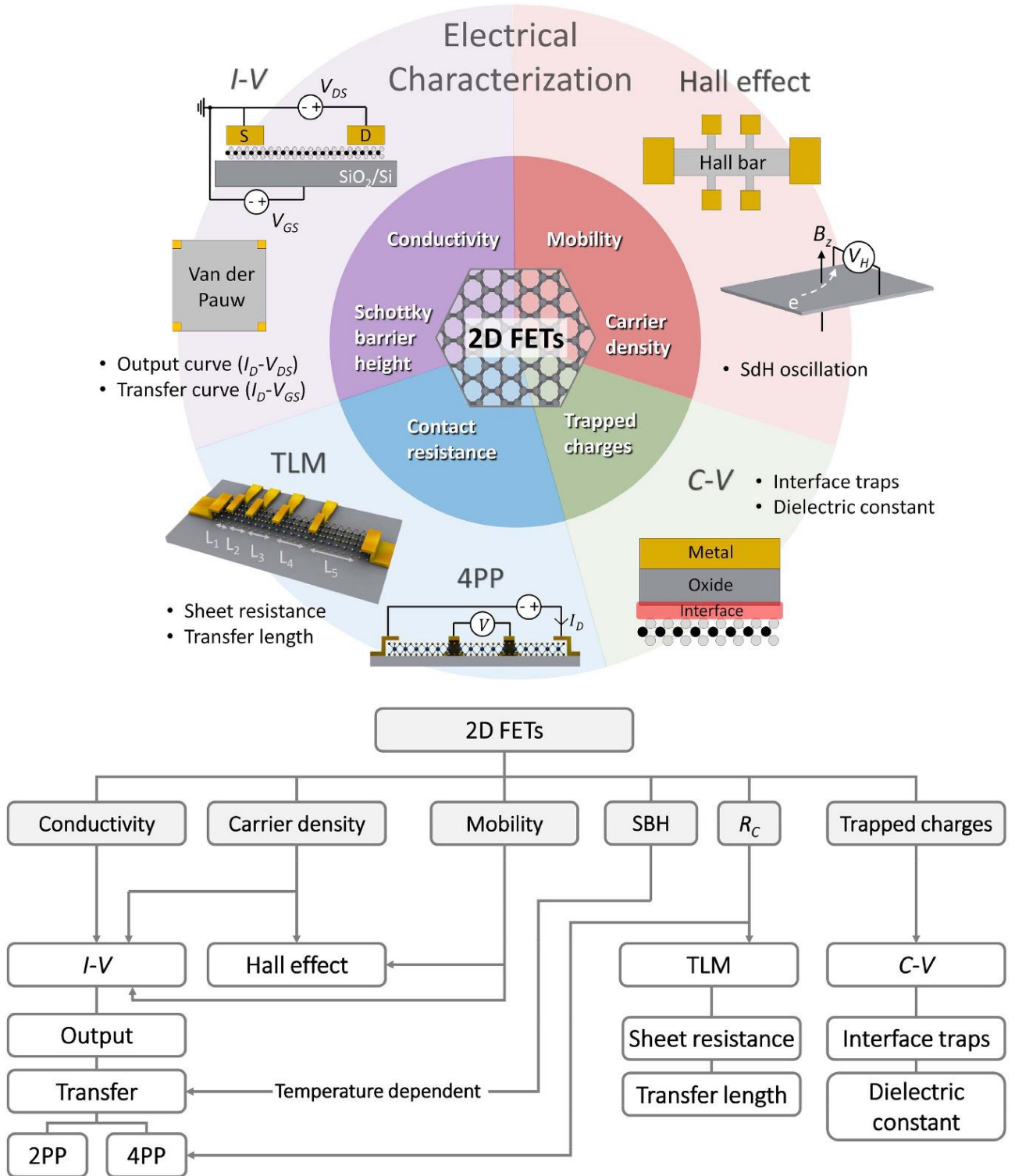


Рис.1.3. Параметри двовимірних польових транзисторів і відповідні методи визначення електричних характеристик [3]

- розміри каналу і геометрія транзистора також впливають на його характеристики і функціональні можливості; наприклад, ширина каналу, довжина каналу і ширина гейта можуть впливати на швидкодію, споживання енергії та інші параметри;
- швидкодія транзистора визначається часом відкриття та закриття каналу; більша швидкодія дозволяє транзистору працювати на високих частотах;
- споживана потужність (Power Consumption) визначає енергетичну ефективність транзистора; низьке споживання енергії дозволяє зменшити витрати та підвищити ефективність пристрою

Двовимірні наноматеріали відкривають широкі можливості для розвитку нових технологій та пристроїв у різних сферах, таких як електроніка, фотоніка, сенсорика, енергетика та біомедицина. Вивчення їх структури та властивостей за допомогою чисельного моделювання допомагає розуміти їх потенціал та сприяє розробці нових пристроїв з покращеними характеристиками.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Моделювання транспорту носіїв у двовимірних транзисторах

Транспорт носіїв заряду в двовимірних польових транзисторах відбувається в тонкому каналі, який складається з двовимірного матеріалу, такого як графен, перовскітні матеріали або інші двовимірні матеріали [9-13]. Транспорт носіїв заряду в таких транзисторах може бути описаний наступними основними механізмами:

- у двовимірних польових транзисторах носії заряду можуть дифундувати вздовж каналу від витоків до стоку під впливом градієнта концентрації; цей механізм транспорту є схожим на дифузію в тривимірних транзисторах;
- взаємодія носіїв заряду з розсіювачами (наприклад, фононами або дефектами в матеріалі) призводить до втрати енергії і зміни напрямку руху носіїв; розсіювання може обмежувати швидкість транспорту в транзисторі;
- у двовимірних системах можуть спостерігатися квантові ефекти, такі як квантова точка, квантова провідність і тунелювання; ці ефекти можуть впливати на транспорт носіїв заряду і використовуються для спеціальних додаткових функцій і пристроїв;
- у двовимірних польових транзисторах електростатичне поле, створене напругою на гейті, впливає на концентрацію носіїв заряду і, отже, на їхній транспорт вздовж каналу; зміна напруги на гейті дозволяє керувати електронною провідністю каналу.

Ці механізми взаємодіють між собою і можуть бути регульовані різними параметрами, такими як напруга на гейті, конфігурація транзистора і властивості матеріалу; всі ці фактори впливають на транспорт носіїв заряду в двовимірних польових транзисторах і визначають їхні характеристики та функціональні можливості

Для опису транспорту носіїв заряду в двовимірних польових транзисторах використовуються різні транспортні моделі. Розглянемо деякі з найпоширеніших моделей [12,13].

Дрейф-дифузійна модель базується на комбінації дрейфу носіїв заряду під дією електричного поля та їх дифузії через градієнт концентрації. Вона використовує рівняння неперервності для опису зміни концентрації носіїв заряду в каналі транзистора.

$$J_n = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla \psi - \mu_n n (kT \nabla (\ln n_{ie})), \quad (1.1)$$

$$J_p = -qD_p \nabla p - qp\mu_p \nabla \psi + \mu_p p (kT \nabla (\ln n_{ie})), \quad (1.2)$$

де q – заряд електрона; k – стала Больцмана; T – температура Дебая; D_n та D_p – коефіцієнти дифузії носіїв; n та p – концентрації носіїв; μ_n та μ_p – рухливість носіїв; ψ – хвильова функція; n_{ie} – ефективна внутрішня концентрація

Модель Болцмана та енергетичних зон: Ця модель використовує статистичну механіку та розподіл Болцмана для опису розподілу електронів та дірок у енергетичних зонах матеріалу. Вона враховує ефекти розсіювання та взаємодію з дефектами та фононами [12,13].

Згідно статистики Больцмана коефіцієнт дифузії визначається за співвідношенням:

$$D = \frac{kT_L}{q} m, \quad (1.2)$$

де k , T_L – постійна Больцмана, температура решітки

Поряд з цим згідно статистики Фермі-Дірака (ФД) для електронів (F_α , ϵ_c , ϵ_{Fn} , ϕ_n та n_{ie} – інтеграл ФД порядку α , енергія зони провідності, квазірівень Фермі, квазіпотенціал Фермі та ефективна концентрація власних носіїв) :

$$D = \frac{\left(\frac{kT_L}{q} m_n\right) F_{1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} [e_{Fn} - e_c] \right\}}{F_{-1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} [e_{Fn} - e_c] \right\}} \quad (1.3)$$

$$e_{F_n} = -q\phi_n = -\frac{kT_L}{q} \ln\left(\frac{n}{n_{ie}}\right), \quad (1.4)$$

Модель Ландавера-Буттікера використовує теорію тунелювання для опису транспорту носіїв заряду через бар'єрні структури, такі як підкладка або діелектричний шар. Вона враховує квантові ефекти та ефекти тунелювання через бар'єри.

$$I_{DS}(V_{DS}, V_{GS}) = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \{T(E, V_{DS}, V_{GS}) [f_S(E - E_{FS})] - [E - E_{FD}]\} dE, \quad (1.5)$$

де E_{FS} та E_{FD} – рівні Фермі відповідно витoku та стоку, $f_S(E, E_{FS})$ and $f_S(E, E_{FD})$ – функції Фірма-Дірака відповідно витoku та стоку, $T(E, V_{DS}, V_{GS})$ – транспортний коефіцієнт.

Модель дискретних модель використовує квантову механіку для опису транспорту носіїв заряду через дискретні енергетичні рівні в двовимірних матеріалах. Вона враховує квантові ефекти, такі як квантова точка і квантова провідність.

Ці моделі дозволяють враховувати різні фізичні ефекти та властивості матеріалів у двовимірних польових транзисторах і допомагають в розумінні їхньої роботи та проектуванні. Вибір конкретної моделі залежить від конкретної ситуації та особливостей досліджуваного транзистора.

У класичній теорії рівняння Пуассона та рівняння безперервності використовуються як основні параметри для визначення таких параметрів, як густина струму носія, коефіцієнт генерації та рекомбінація. Дифузійно-дрейфові транспортні моделі зі статистикою Больцмана або Фермі-Дірака можна використовувати для прогнозування робочих характеристик польових транзисторів [12,13]. Враховуючи квантовий потенціал Бома, можна подолати проблему короткоканальних ефектів.

Слід зазначити, що так звані балістичні транзистори мають характерні моди енергетичних рівнів з контрольованими потенційними бар'єрами. Він має невелику область (вікно Фермі) з балістичною провідністю. Струм у транзисторі

визначається за концепцією Ландауера. Завдяки відсутності зворотного розсіювання (довжина вільного пробігу збільшується до лінійного розміру каналу) такі транзистори можуть мати відмінні характеристики. Також між металевим електродом і каналом утворюється бар'єр Шоттки. Це довгий час перешкоджало створенню балістичних транзисторів. Проте застосування паладію як матеріалу електродів дозволило нівелювати цю перешкоду.

2.2. Балістичні моделі для нанорозмірних транзисторів

Як приклад застосування моделі із врахуванням квантових явищ розглянемо двопараметричну квазібалістичну транспортну модель. Вона описує електронний транспорт у нанорозмірних транзисторах з урахуванням квантових ефектів. Ця модель дозволяє врахувати вплив розмірів транзистора та квантових ефектів, таких як квантування енергії і квантування руху електронів.

Основні параметри, що використовуються в двопараметричній квазібалістичній транспортній моделі [14,31]:

- енергетична діаграма, яка відображає енергетичну структуру матеріалів у транзисторі; вона використовується для визначення доступних енергетичних рівнів для електронів у матеріалі;
- тунельний ефект - явище, коли електрони можуть проходити через потенціальні бар'єри навіть тоді, коли їх енергія нижче за енергію бар'єру; тунельний ефект враховується в моделі для опису передачі електронів через потенціальні бар'єри в нанорозмірних транзисторах

Застосування двопараметричної квазібалістичної транспортної моделі дозволяє досліджувати і прогнозувати поведінку нанорозмірних транзисторів у відповідь на різні вхідні сигнали та параметри. Ця модель допомагає розуміти електронний транспорт у нанорозмірних транзисторах та використовується для проектування більш ефективних та функціональних електронних пристроїв.

У нанорозмірних провідниках, які мають довжину каналу, порівнянну з довжиною вільного пробігу носіїв, транспорт наближається до балістичної

межі. Балістична модель також повинна описувати транспортні властивості розроблених МОП-транзисторів з довжиною каналів, що наближається до середньої довжини розсіювання λ або є меншою. З іншого боку, існує помітна різниця між ВАХ з чисто балістичної моделі, такої як запропонована Наторі [14], та експериментальними даними. На рис. 2.1 використано наступне з $L = 60$ нм, $W = 1$ мкм n-MOSFET, де напруга затвора змінюється від 0 до 1,2 В через 0,3 В. Модель Наторі (квадрати) з $T < 1$ використовується для оцінки експериментальних даних пристрою (суцільна лінія). Модель Наторі передбачає нереально низький R_{ON} при низькому зміщенні стоку.

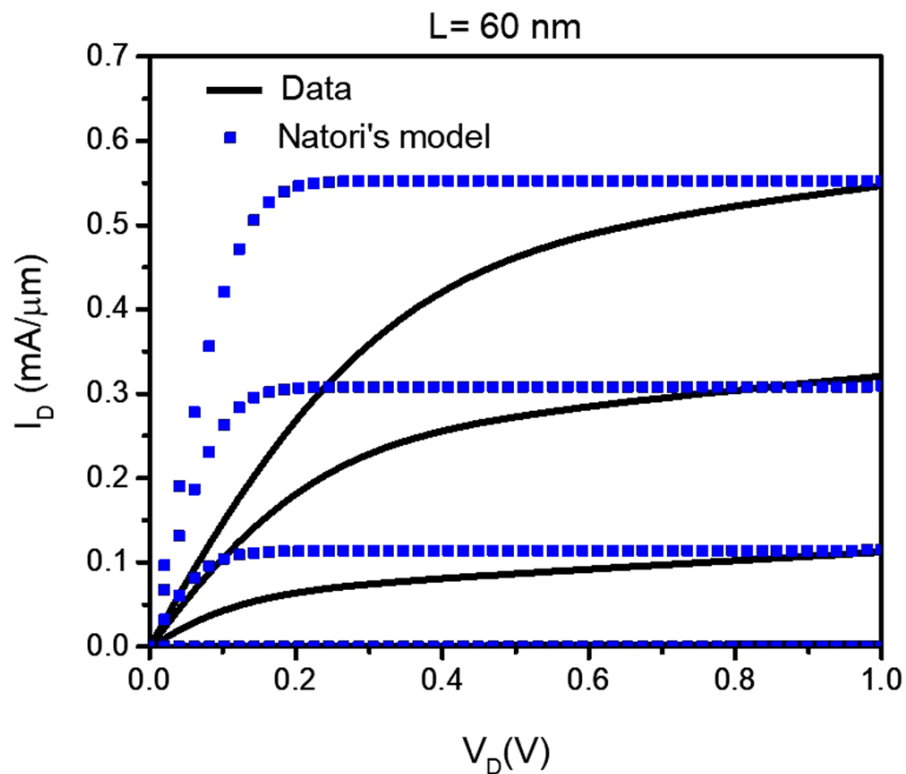


Рис. 2.1. Вольт-амперна характеристика балістичного транзистора [14]

Хоча складні моделі можуть більш точно відповідати експериментальним даним, бажана простота моделі з меншою кількістю параметрів, заснованої на формалізмі балістичного транспорту. У моделі Наторі для балістичних транзисторів MOSFET співвідношення для ВАХ виведено на основі формули Ландауера для струму через балістичний провідник. Авторами роботи [14] розширено цю транспортну модель, включаючи два фізично значущі параметри

для точного прогнозування даних пристрою. Це ймовірність передачі T і параметр сполучення у каналі Δ . Останній фіксує вплив поздовжнього електричного поля в каналі та являє собою частку рівня Фермі стоку, яка з'являється на кінці джерела. Включення Δ дозволяє узгодити експериментальний опір увімкнення (R_{ON}) у режимі малого зміщення, що є центральним результатом роботи [14]. Автори останньої надають фізичні обґрунтування цих параметрів.

Крім того, порогову напругу (U_T) було отримано з методів визначення характеристик пристрою, або дозволено змінюватися для врахування U_T зміна довжини пристрою. Тут ми використовуємо підгонку за двома параметрами, шляхом фіксації U_T , або підгонка за трьома параметрами, де всі три параметри можуть змінюватися, щоб охарактеризувати експериментальні дані. Варіюванням U_T , ми можемо врахувати, наприклад, вплив домішки на довжину каналу. Можна послабити цю вимогу при порівнянні пристроїв у вузькому діапазоні довжини, де U_T варіація невелика.

Для підтримки моделі автори [14] виготовили n-канальні MOSFET з довжиною затвора діапазоні від 50 нм до 3 μ m. Ними наведено детальну залежність від довжини досліджуваних нами параметрів, в т.ч T і Δ . Використовуючи ці параметри, було спрогнозовано мінімальний опір увімкнення, що теоретично може бути досягнуто встановленням $T=1$. Це значення є суттєво вищим, ніж прогнозоване за допомогою суто балістичної моделі. Також було змодельовані дані за допомогою найпростішої довгоканальної моделі. Порівнюючи дві моделі, було обчислено довжину розмежування, на якій одна модель стає більш прийнятною за іншу. Було встановлено, що параметр T можна вважати незалежним від зміщення стоку. Незалежність параметру T суперечить висновкам моделі віртуального джерела, яка була успішною при моделюванні нанорозмірних MOSFET [31]. Також було обґрунтовано використання фіксованого T і обговорено припущення, використані в кожній моделі, які визначають відповідні значення для T .

У нанорозмірних транзисторах, де довжина каналу стає порівнянною або

меншою за довжину вільного пробігу носіїв, ми входимо в квазібалістичний або чисто балістичний режим транспортування. Тут такі параметри, як рухливість і середній вільний пробіг, починають втрачати фізичне значення, яке вони мали в режимі дифузійного транспорту. У балістичному транзисторі події розсіювання ідеально дорівнюють нулю. Ландауер підкреслював роль контактів у визначенні струму через такий провідник. Максимальна провідність, в цьому випадку, обмежена контактами і задана за режим провідності, $G_c = 2q^2/h$, де q - елементарний заряд та h - стала Планка. Як приклад на рис.2.2 приведено енергетичні діаграми для квазібалістичного транзистора. Співвідношення повної дисперсії у верхній частині енергетичної зони (рис.2.2.б), яке показує, що відбиті носії мають однакові стани з передавальними носіями, що означає, що $1-T$ є незалежним параметром.

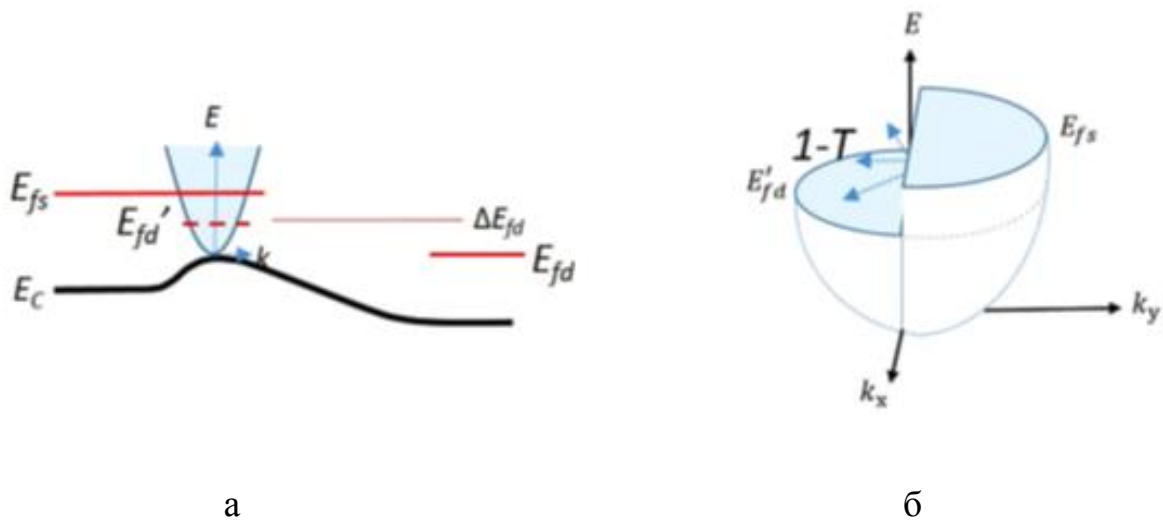


Рис. 2.2. Профіль енергетичної зони вздовж каналу квазібалістичного транзистора, що зображує ефективний квазірівень Фермі E'_{fd} для електронів (а), фактор Δ вимірює частку E_{fd} який відображається у верхній частині джерела та повна дисперсія у верхній частині енергетичної зони (б) [14]

Таким чином, опір є кінцевим, навіть якщо в провіднику немає розсіювання. Мінімальний опір виникає через те, що струм переноситься багатьма поперечними модами в контактах, але лише кількома модами або піддіапазонами всередині провідника. Це вимагає перерозподілу струму між

модами струму на межі розділу, що призводить до кінцевого контактного опору [12-14,31]. Це також можна розглядати як енергетичний штраф, який електрон повинен заплатити, щоб потрапити у вузький канал від контактів, які є порівняно широкими. Тут ми розрізняємо контактний опір, внутрішній параметр, який встановлює граничний опір балістичного пристрою, і послідовний опір, зовнішній ефект, який виникає через фізичний розмір і характер контакту з областями витоку/ стоку MOSFET.

2.4. Визначення характеристик транзисторів

Визначення характеристик транзисторів, таких як струм-напруга та фактор підсилення, засноване на чисельних розрахунках використовується для моделювання та аналізу роботи транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів. Для цього використовуються різні чисельні методи та алгоритми. Основні характеристики транзисторів, які можуть бути визначені чисельними розрахунками, включають [12,13]:

- ВАХ відображає залежність струму, що протікає через транзистор, від прикладеної до нього напруги; чисельні розрахунки дозволяють встановити точну залежність струму від напруги та виявити нелінійні ефекти, такі як насичення струму або тунельний пробій;
- фактор підсилення відображає співвідношення між вхідним і вихідним струмами транзистора; він використовується для визначення підсилення сигналу в транзисторних схемах; чисельні розрахунки дозволяють встановити значення фактора підсилення в залежності від різних параметрів транзистора, таких як розмір каналу, концентрація носіїв заряду тощо;
- провідність відображає величину і підсилюючу здатність транзистора. Він характеризує залежність вихідного струму від вхідного сигналу; чисельні розрахунки дозволяють встановити значення паралельної провідності в залежності від параметрів транзистора та умов роботи;
- коефіцієнт передачі відображає співвідношення вхідної та вихідної

потужності в транзисторі. Він характеризує ефективність підсилення сигналу; чисельні розрахунки дозволяють визначити значення коефіцієнта передачі потужності в залежності від параметрів транзистора та умов роботи

Ці характеристики визначаються за допомогою чисельних методів, таких як метод скінченних елементів (МСЕ), метод скінченних різниць (МСР) або метод молекулярної динаміки (ММД), які дозволяють вирішувати рівняння, що описують поведінку електронів та носіїв заряду в транзисторі. Ці чисельні розрахунки допомагають встановити взаємозв'язки між різними параметрами транзистора та його характеристиками, що дозволяє оптимізувати його проектування та вдосконалити його ефективність.

На цьому етапі роботи були проведені [15] чисельні експерименти для аналізу впливу різних параметрів на характеристики транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів. Досліджувалися такі параметри, як геометрія структури, концентрація носіїв заряду, ступінь дотримання однорідності матеріалу та інші. За допомогою отриманих результатів, було встановлено оптимальні значення цих параметрів для досягнення найкращих електронних характеристик транзисторів.

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Характеристики польових транзисторів із каналом на основі молібден сульфїду

NanoHUB [16] — онлайн-ресурс для вивчення нанорозмірних транзисторних структур із каналами на основі сульфїду молібдену. Моделювання базується на розв'язуванні рівнянь Пуассона та Шредінгера в рамках нерівноважної функції Гріна. Задача 3D використовується для вирішення рівняння Пуассона, що зв'язує заряд і потенціал в каналі пристрою. У цьому випадку сітка будується навколо кожного елемента (атома, іона) структури. Двовимірною моделлю Шредінгера визначає ймовірність знаходження носіїв заряду в поперечному перерізі каналу, тоді як сам транспорт розглядається одновимірним рівнянням [12,13].

Поведінка перемикачів типового тонкоплівкового польового транзистора визначається електростатикою в трьохконтактному пристрої. У цій роботі були використані наступні вхідні дані: у двовимірному каналі на основі сульфїду молібдену потік електронів рухається від стоку до стоку та контролюється третім електродом затвора довжиною 20 нм. Гейт оточує канал з обох сторін, розділений ізоляційним шаром товщиною 3,0 нм і з діелектричною проникністю 20. Температуру середовища встановили 300 К. Порогова напруга становить 0,3 В, а напруга зміщення змінюється від 0 до 0,5 В на керуючому електроді. Для моделювання використовувалася транспортна модель з розсіюванням носія та без нього (балістичний транспорт).

Як приклад на рис. 3.1 та рис. 3.2 наведено вихідну та передавальну вольт-амперні характеристики (ВАХ) нанорозмірної транзисторної структури з каналом на основі MoS_2 відповідно.

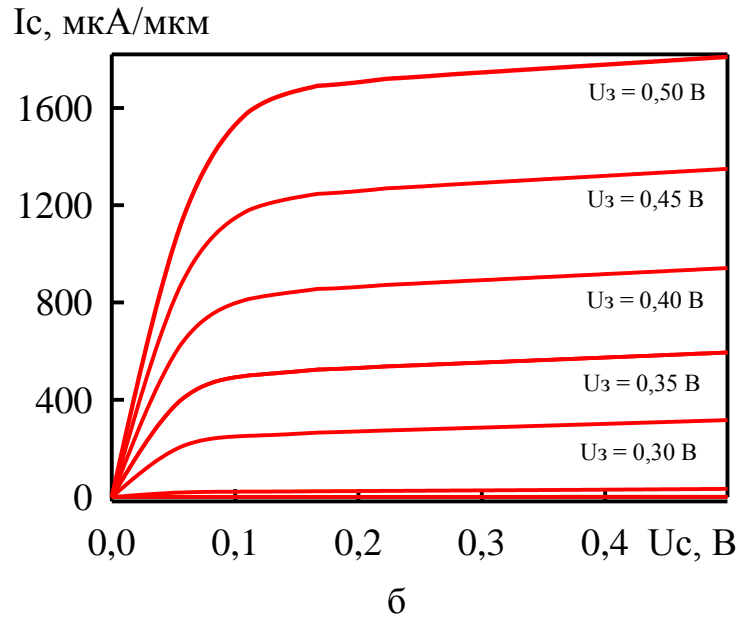
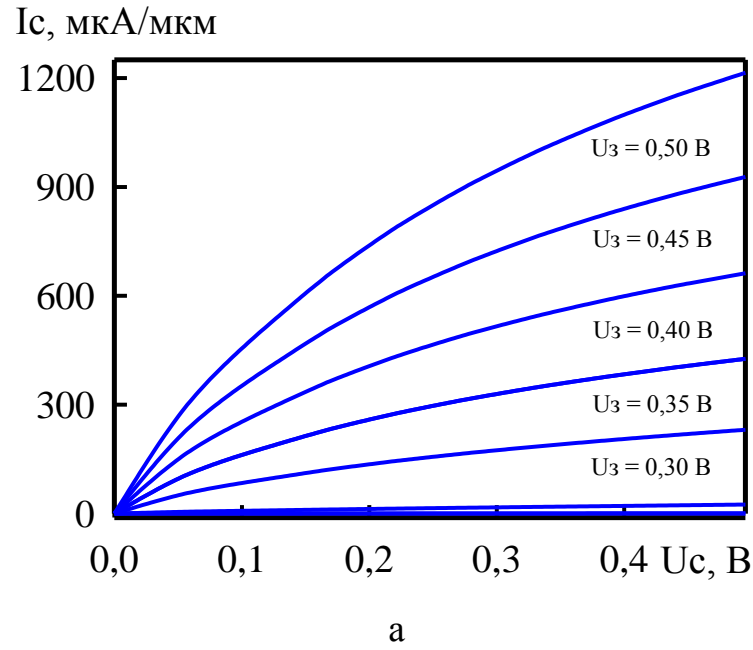
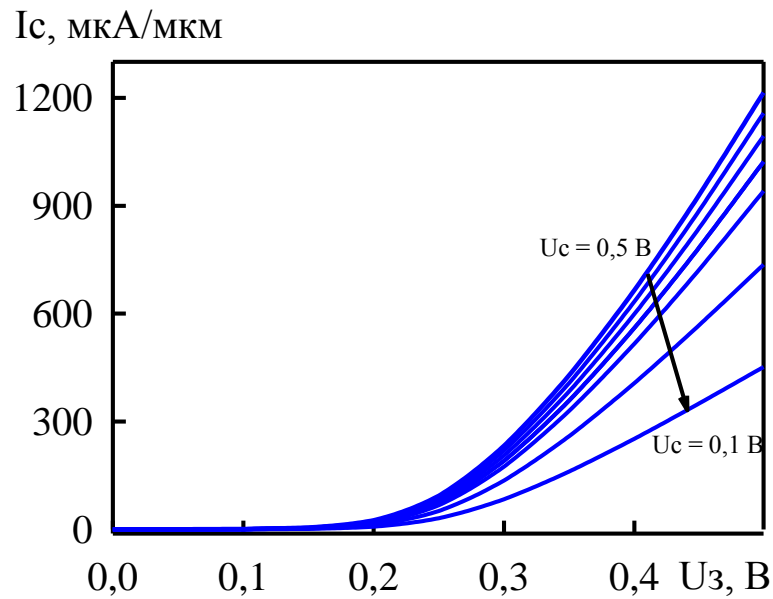
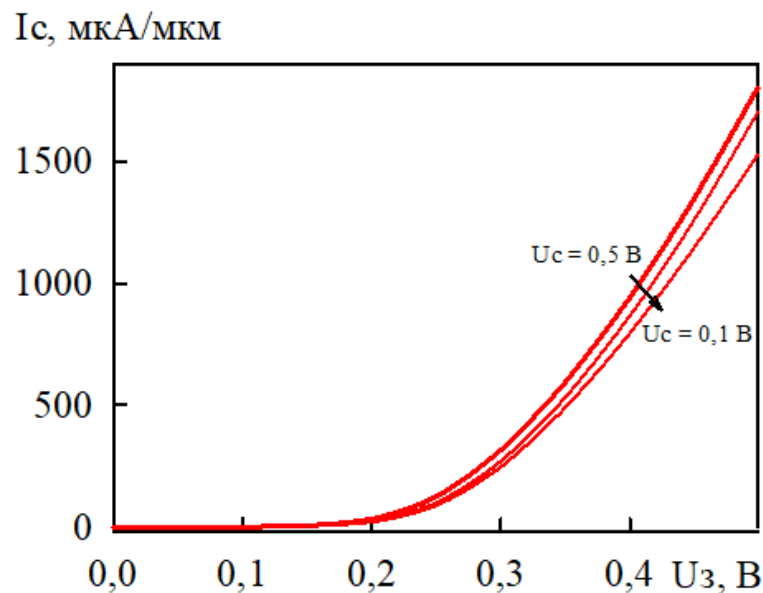


Рис.3.1. Вихідні ВАХ транзистора з каналом на основі MoS_2 , отримані в моделі з розсіюванням носіїв (а) і балістичним транспортом (б) [15]



а



б

Рис.3.2. Передавальні ВАХ транзистора з каналом на основі MoS_2 , отримані в моделі з розсіюванням носіїв (а) і балістичним транспортом (б) [15]

Отримані результати, особливо в логарифмічних координатах, дозволяють визначати електричні параметри в рамках транспортних моделей відповідно з і без розсіювання носіїв: величини допорогового розкиду становлять 78,7 мВ/декаду та 69,2 мВ/декаду; сила струм у відкритому стані $1,2 \cdot 10^3$ мкА/мкм та $1,9 \cdot 10^3$ мкА/мкм та сила струму витоку 0,1 мкА/мкм та 0,2 мкА/мкм; коефіцієнт

підсилення за струмом $\sim 10^4$; величини зниження бар'єру, індуковані стоком 43,3 мВ/В та 30,1 мВ/В.

Отримані результати моделювання вказують на більш високу ефективність спроектованих структур польових транзисторів із каналом на основі молібден сульфїду, ніж структур польових транзисторів із каналом у вигляді вуглецевих нанотрубок [17-23] або нанодродів [24-27]. Це дуже важливо для цифрового проектування, оскільки є визначальним параметром швидкості та потужності як окремого елемента так і схеми в цілому. Чим вище коефіцієнт, тим краща їх продуктивність [28-36].

У попередніх роботах використовувалися різні підходи для підвищення мобільності 2D-матеріалів, такі як легування, інженерія деформацій, створення гетероструктур або багат шарових систем, але жоден із матеріалів не зміг досягти показників мобільності, порівнянних із кремнієм для пристроїв. Наприклад, експериментально виміряна рухливість моношарового носія сульфїду молібдену набагато менша, ніж теоретично передбачена ($410 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) [2], через розсіювання фононів ґратки, викликане міжфазними фононами, зарядженими домішками та високим k діелектричного середовища.

Розсіювання носіїв заряду може відбуватися на фононах ґратки через змінні стани. Розсіювання фононів залежить від температури i , таким чином, збільшується з підвищенням температури. На основі розрахунків перших принципів, заснованих на розсіюванні акустичних/поляричних фононів і екрануванні моношару MoS_2 , повідомляється, що їх рухливість досяжна величини $17410 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ [2]; однак ці розрахунки не враховують ефект екранування вільних носіїв і діелектричної невідповідності.

У той же час, присутність діелектриків з високою k -діелектричною проникністю (матеріал підкладки) призводила до домінування фононного розсіювання і зменшення рухливості носіїв у 2D-матеріалах при кімнатній температурі. У сполуках сульфїду молібдену дипольні моменти між катіонами та аніонами обумовлені полярністю хімічних зв'язків. Електричне поле, створене збуренням дипольного моменту полярного фонона, взаємодіє з носіями у 2D-матеріалах,

що призводить до зниження рухливості останніх. Цей процес відомий як полярне оптичне розсіювання фононів або взаємодія Фреліха [5]. Якщо полярний режим спільного поширення підтримується діелектричним шаром, то носії можуть збуджувати фонони. Такі фонони мають віддалений інтерфейс, тому їх називають поверхневі оптичні фонони. Розсіювання на поверхневих оптичних фононах при кімнатній температурі є домінуючим у середовищах з високою діелектричною проникністю порівняно з діелектричними шарами з низькою діелектричною проникністю [5-7]. Крім того, на додаток до кулонівського і фононного розсіювання, структурні дефекти також відіграють важливу роль у зменшенні рухливості носіїв. Наприклад, іонні вакансії, присутні в зразках низької якості, можуть бути джерелом сильного розсіювання.

В роботі [3] досліджено властивості польових транзисторів з каналами у вигляді моношарів чорного фосфору (BP FET). Через високу анізотропію ефективної маси струмові властивості залежать від напрямку транспорту. У порівнянні з аналогічними моношаровими приладами з каналами MoS_2 і UTB Si саме BP FET досягають більш високих струмів в напрямку «крісла» завдяки високим швидкостям інжекції і високій густині станів. В ортогональному напрямку BP FETs досягають порівнянних результатів. У статті [3] висвітлено потенціал польових транзисторів BP FETs як високопродуктивних пристроїв і важливість визначення орієнтації матеріалу для оптимальної продуктивності.

3.2. Виявлення ключових факторів, що впливають на характеристики двовимірних транзисторів

Виявлення ключових факторів, що впливають на характеристики транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів, є важливим завданням для розуміння та вдосконалення їх ефективності. Деякі з цих ключових факторів включають [12-14]:

– вибір двовимірного наноматеріалу, такого як халькогенід перехідного металу, чорний фосфор, графен, молекулярні стрічки або перовськітові матеріали, має

великий вплив на характеристики транзисторів; кожен матеріал має унікальні електронні, оптичні та механічні властивості, які визначають його можливості для транзисторних застосувань;

– дизайн транзистора на основі двовимірних наноматеріалів, такий як розміри та форма каналу, довжина та ширина гейтової структури, впливає на його ефективність та характеристики; оптимізація геометрії може покращити каналну провідність, електронну мобільність та інші важливі параметри транзистора;

– у двовимірних наноматеріалах можуть існувати границі зерен та дефекти, що впливають на їхні електронні властивості; вивчення та управління цими границями та дефектами можуть бути важливими для покращення якості транзисторів;

– для транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів важливо враховувати взаємодію з діелектриками та металами, що оточують графен або інші наноматеріали; ця взаємодія може впливати на ефективність транзисторів та їхні електронні властивості;

– ефективність транзистора на основі двовимірних наноматеріалів може бути регульована за допомогою електричного поля та напруги затвора; дослідження впливу цих параметрів на поведінку транзистора можуть допомогти в оптимізації його роботи

Вивчення цих ключових факторів вимагає використання чисельного моделювання, яке дозволяє аналізувати взаємодію між структурою, властивостями матеріалу та електронною характеристикою транзистора. Такі моделі можуть бути використані для оптимізації дизайну та розробки нових транзисторних структур на основі двовимірних наноматеріалів.

Дана робота внесла важливий внесок у розуміння структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів. Вона створила основу для подальших досліджень і розвитку нових технологій в області напівпровідникових пристроїв на основі двовимірних матеріалів.

ВИСНОВКИ

1. Чисельне моделювання структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів є ефективним інструментом для дослідження їхнього функціонування та визначення оптимальних параметрів для досягнення кращих характеристик; використання двовимірних наноматеріалів у транзисторах дозволяє поліпшити електронні характеристики, такі як швидкість комутації та коефіцієнт підсилення.

2. Досліджувані чисельні моделі забезпечують достатню точність для вивчення різних фізичних процесів, які відбуваються у транзисторах на основі двовимірних наноматеріалів, включаючи електронний перенос, зарядову інжекцію, рекомбінацію та розсіювання.

3. Результати чисельних експериментів показали, що оптимальні параметри транзисторів із каналом сульфід молібдену можуть бути визначені для досягнення кращої ефективності та швидкості роботи. Такі транзистори виявляються перспективними для застосувань в електроніці та інших галузях, де важливо досягти високих швидкостей та енергоефективності.

4. Дослідження підтвердили високий потенціал транзисторів із каналом сульфід молібдену та інших 2D-матеріалів і їхню можливість стати основою для створення нових поколінь електронних пристроїв з покращеними характеристиками та функціональністю.

Загальною висновком є те, що чисельне моделювання структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів є важливим інструментом для дослідження та розвитку нових напівпровідникових пристроїв.

Література :

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Hu C. Modern semiconductor devices for integrated circuits / C. Hu. – Upper Saddle River, N.J. ; London : Pearson Education, 2010. – 351 p.
2. Recent Advances in the Carrier Mobility of Two-Dimensional Materials: A Theoretical Perspective / S.H.Mir, V.K.Yadav, J. K.Singh // ACS Omega. – 2020. – V. 5. – P. 14203–14211.
3. Electrical characterization of 2D materials-based field-effect transistors / Sekhar Babu Mitta et al // 2D Mater. – 2021. – 8. – P. 012002.
4. Vertical nanowire and nanosheet FETs: device features, novel schemes for improved process control and enhanced mobility, potential for faster & more energy efficient circuits / A. Veloso, G. Eneman, T. Huynh-Bao et al. // 2019 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 7-11 Dec. 2019. – San Francisco: IEEE, 2019. – P. 11.1.1 – 11.1.4.
5. Promises and prospects of two-dimensional transistors / Y. Liu, X. Duan, HJ. Shin et al. // Nature. – 2021. – V. 591. – P. 43–53.
6. Computational methods for 2D materials modeling / A Carvalho, P.E.Trevisanutto, S. Taioli et al. // Rep. Prog. Phys. –2021. – V.84. – P. 106501 (21pp).
7. Soft error susceptibilities of 22 nm tri-gate devices / N. Seifert, B. Gill, S. Jahinuzzaman et al. // IEEE Trans. Nucl. Sci. – 2012. – V.59, No 6. – P. 2666-2673.
8. Vertical MoS₂ transistors with sub-1-nm gate lengths / F. Wu, H. Tian, Y. Shen et al. // Nature. – 2022. – V. 603. – P. 259–264.
9. Low Voltage Operating 2D MoS₂ Ferroelectric Memory Transistor with Hf_{1-x}Zr_xO₂ Gate Structure / Zhang, S., Liu, Y., Zhou, J. et al. // Nanoscale Res Lett. – 2020. – V. 15. – P. 157 (9 pp).

10. Can carbon nanotube transistors be scaled down to the sub- 5 nm gate length? / L. Xu, J. Yang, C. Qiu et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. – 2021. – V. 13. – P. 31957 – 31967.
11. Проценко І. Ю. Наноматеріали і нанотехнології в електроніці : підручник / І. Ю. Проценко, Н. І. Шумакова. – Суми : Сумський державний університет, 2017. – 151 с.
12. Datta S. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport – Part B: Quantum Transport / S. Datta – Singapore: World Scientific, 2018 – 260 p.
13. Lundstrom M. Fundamentals of Nanotransistors / M. Lundstrom – Singapore: World Scientific, 2018. – 342 p.
14. Two-Parameter Quasi-Ballistic Transport Model for Nanoscale Transistors / J.U. Lee,, R.Cuduvally, P. Dhakras et al. // Sci Rep. – 2019. – 9. – P. 525.
15. Моделювання характеристик польового транзистора з каналом на основі молибден сульфїду / І.П. Бурик, В.В. Бібик, Т.М. Гричановська, М.П. Бурик // Вчені записки Таврійського національного університету імені В.І. Вернадського. Серія: Технічні науки. –2023. – Том 34 (73), №1. - С.348-353.
16. <https://nanohub.org/resources/2dfets> - NanoHub, 2DFET, дата доступу 15.05.2023
17. Electrical and Temperature Characteristics of Transistors with a Channel in the Form of a Carbon Nanotube/ I.P. Buryk, I.M. Martynenko, L.V. Odnodvoretz et al. // J. Nano- Electron. Phys. – 2022. – V.14, No 1. – P. 01024-4
18. DFT based estimation of CNT parameters and simulation-study of GAA CNTFET for nano scale applications / B. Singh, P. B, D. Kumar // Mater. Res. Express. – 2020. – V.7. – P. 015916-1 – 015916-8.
19. Double-wall carbon nanotube field-effect transistors: Ambipolar transport characteristics / Shimada et al. // Appl. Phys. Lett. – 2004. – V. 84, No 13. – P. 2412-2414.
20. Investigation of carbon nanotube FET with coaxial geometry/ P. Vimala, L. Krishna L., K. Maheshwari et al. //J. Nano- Electron. Phys. – 2020. – V. 12, No 5. – P. 05027-1 – P. 05027-5.

21. Asymmetric gating for reducing leakage current in carbon nanotube field-effect transistors / T. Srimani, G. Hills, X. Zhao et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2019. – V. 115. – P. 063107-1 – 063107-5.
22. Design and analysis of electrostatic doped tunnel CNTFET for various process parameters variation / S.Bala, M. Khosla // *Superlattice. Microst.* – 2018. – V. 124. – P. 160-167.
23. The effect of carbon nanotube chirality on the electrical conductivity of polymer nanocomposites considering tunneling resistance / J.Doh, S.-I.Park, Q.Yang et al. // *Nanotechnology.* – 2019. – V. 30. – P. 465701-1 – 465701-16.
24. Numerical simulation of field-effect transistor with a channel in the form of a nanowire / I.P. Buryk, A.O. Holovnia, I.M. Martynenko, O.P.Tkach // *J. Nano-Electron. Phys.* – 2021. – V.13, No 4. – P. 04030-1 – 04030-5.
25. Numerical simulation of field-effect transistor GAA SiNWFET parameters based on nanowires / I.P. Buryk, M.M. Ivashchenko, A.O. Holovnia et al. // *J. Nano-Electron. Phys.* – 2020. – V. 12, No 6. – P. 06012-1 – P. 06012-4.
26. Development of anti-reflecting surfaces based on Si micropyramids and wet-chemically etched Si nanowire arrays / A.A. Druzhinin, V.Y. Yerokhov, S.I. Nichkalo et al. // *Functional Materials.* — 2018. — T. 25, № 4. — C. 675-680.
27. Unified compact model for Gate All Around FETs- nanosheets, nanowires, multi bridge channel MOSFETs / P. Kushwaha, J. Duarte, Y.-K. Lin et al. // *Informatics, Electronics and Microsystems: TechConnect Briefs 2018.- Kanpur: epartment of EE, Indian Institute of Technology Kanpur.* – 2018. – P. 249-252.
28. Buryk I.P. Numerical simulation of FinFET transistors parameters/ I.P Buryk, A.O. Golovnia, M.M. Ivashchenko et al. // *J. Nano- Electron. Phys.* – V.12, №3. – 2020. – pp. 03005-1 – 03005-4.
29. Investigation of Nanostructure Phase Composition and Field Emission Properties in the Ge/Si (100) System / S.A. Nepijko, A.A. Sapozhnik, A.G. Naumovets et al. // *J. Nano- Electron. Phys.* – 2016. – V.8, No 4(2). – P. 04067-1 –04067-4.

30. Origins and characteristics of the threshold voltage variability of quasiballistic single-walled carbon nanotube field-effect transistors // Q. Cao, S. Han, A. V. Penumatcha, et al./ ACS Nano. – 2015. – V. 9, № 2. – P. 1936 – 1945.
31. Comparison of various factors affected TID tolerance in FinFET and Nanowire FET / Won H., Ham I., Jeong Y. et al. // Appl. Sci. – 2019. – V. 9. – P.3163-3172.
32. Dual metal gate FinFET integration by Ta/Mo diffusion technology for Vt reduction and multi-Vt CMOS application / Matsukawa T., Endo K., Liu Y. // Sol. State Electron. – 2009. – V. 53. – P. 701-705.
33. Metal gate work function modulation mechanisms for 20-14 nm CMOS low thermal budget integration / B. Saidi // Materials Science. Universite Toulouse III – Paul Sabatier, 2014. –158 p.
34. Effects of work-function variation on performance of junctionless and inversion-mode dual-metal gate nanowire transistors / L. Dai, W. Li, M.Lin // JSTS. – 2020. – V. 20, № 4. – P. 349-356.
35. Impact of work-function variation on analog figures-of-merits for high-k/metal-gate junctionless FinFET and gate-all-around nanowire MOSFET / W.-F. Li, L. Dai // Microelectron. J. – 2019. – V. 84. – P. 54-58.
36. Wu Y.C. 3D TCAD simulation for CMOS nanoelectronic devices / Y.C. Wu, Y.R. Jhan. – Singapore: Springer Nature Singapore Pte Ltd, 2018. – 337 p.

СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ КРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Класичний фаховий коледж

Кваліфікаційна робота бакалавра

**ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ТА
ХАРАКТЕРИСТИК ТРАНЗИСТОРІВ НА ОСНОВІ
ДВОВИМІРНИХ НАНОМАТЕРІАЛІВ**

Студент гр. ЕІс-91.

В.Є. Бугай

Науковий керівник,
к. ф.-м. н, доцент

І.П. Бурик

Конотоп 2023

ВСТУП

2

Обґрунтуванням актуальності теми є потенціал застосування двовимірних наноматеріалів в електроніці через їх унікальні фізичні властивості.

Мета роботи полягає у вивченні та застосуванні чисельних методів для моделювання структури та електронних характеристик транзисторів із каналом на основі двовимірних наноматеріалів.

Відповідно до мети, *вирішувалися такі задачі*:

- вивчення моделей, які враховують особливості транспорту носіїв у 2D-матеріалах;
- аналіз потенційних застосувань 2D-матеріалів у приладобудуванні

При вивченні даної роботи 2D-матеріалів використовувалися методи чисельного моделювання структури та характеристик польових транзисторів із каналами на основі двовимірних наноматеріалів.

Результати дослідження показали, що транзистори із каналом на основі молибден сульфідів та інших мають великий потенціал для поліпшення робочих характеристик порівняно з традиційними транзисторами. Вони відзначаються високою швидкістю роботи, низькою енергоспоживанням та великими коефіцієнтами підсилення. Отримані результати є важливим внеском у розуміння та розвиток нових технологій транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів.

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні процеси в польових транзисторах на основі двовимірних наноматеріалів.

Предмет досліджень комп'ютерне моделювання структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів.

РОЗДІЛ 1
ТРАНЗИСТОРИ ІЗ КАНАЛАМИ У ВИГЛЯДІ ДВОВИМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ

3

1.1. Огляд двовимірних наноматеріалів та їх властивостей

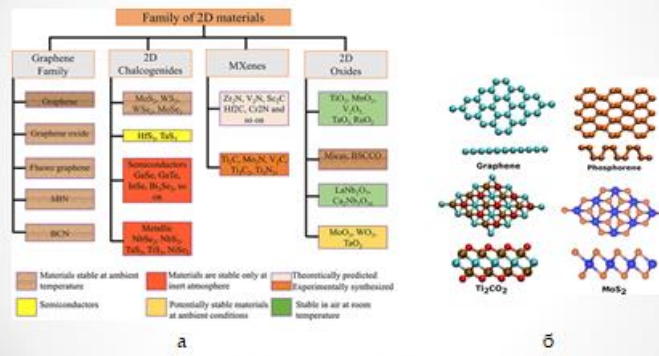


Рис.1.1. Бібліотека (а) та структура (б) двовимірних матеріалів

1.2. Параметри двовимірних польових транзисторів

4

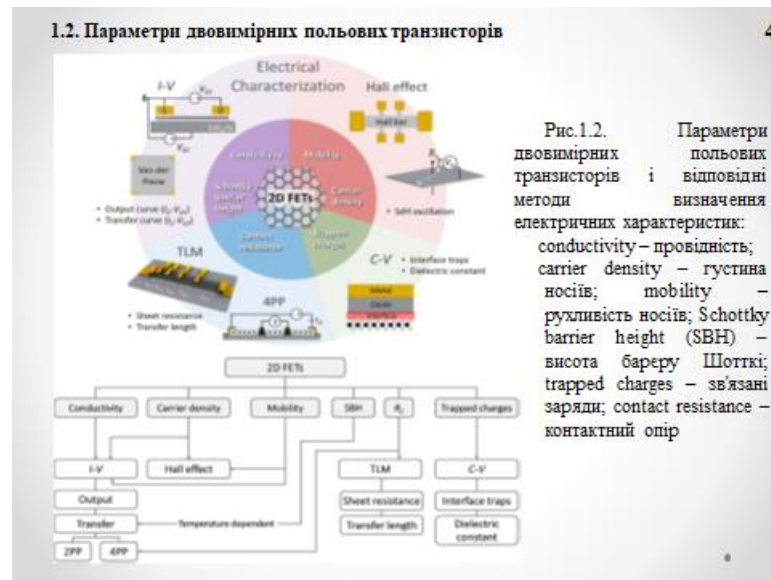


Рис.1.2. Параметри двовимірних польових транзисторів і відповідні методи визначення електричних характеристик: conductivity – провідність; carrier density – густина носіїв; mobility – рухливість носіїв; Schottky barrier height (SBH) – висота бар'єру Шоттки; trapped charges – зв'язані заряди; contact resistance – контактний опір

РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ 5

2.1. Моделювання транспорту носіїв у двовимірних транзисторах

Електростатичний потенціал пов'язаний з просторовою густиною заряду в рівнянні Пуассона:

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_s} \quad (2.1)$$

де φ , ϵ та ρ – електростатичний потенціал, абсолютна діелектрична проникність та об'ємна густина електричного заряду.

Наступне рівняння встановлює зв'язок між напруженістю електричного поля та його потенціалом (жирним шрифтом позначені векторні величини):

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (2.2)$$

Рівняння неперервності визначають швидкості зміни концентрації носіїв заряду:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_n + G_n - R_n, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_p + G_p - R_p, \quad (2.4)$$

де \mathbf{J}_n та \mathbf{J}_p , G_n та G_p , R_n та R_p , q – вектор густини струму електронів та дірок, коефіцієнти генерації для електронів та дірок, коефіцієнти рекомбінації для електронів та дірок, заряд електрона.

1.2. Моделювання транспорту носіїв у двовимірних транзисторах

6

Рівняння дифузійно-дрейфової моделі для електронів та дірок:

$$J_n = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla \psi - \mu_n n (kTV \ln n_{i_e}), \quad (2.5)$$

$$J_p = -qD_p \nabla p - qp\mu_p \nabla \psi + \mu_p p (kTV \ln n_{i_e}), \quad (2.6)$$

де q – заряд електрона, D_n та D_p – коефіцієнт дифузії для електронів та дірок, n та p – концентрація електронів та дірок, μ_n та μ_p – рухливості електронів та дірок, ψ – хвильова функція, k – постійна Больцмана, T – температура Дебая, n_{i_e} – ефективна внутрішня концентрація.

Рівняння дифузійно-дрейфової моделі з урахуванням Bohm quantum Potential (BQP):

$$J_n = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla (\psi - Q) - \mu_n n (kTV \ln n_{i_e}), \quad (2.7)$$

$$J_p = -qD_p \nabla p - qp\mu_p \nabla (\psi - Q) + \mu_p p (kTV \ln n_{i_e}), \quad (2.8)$$

У рівняннях (1.8) та (1.9) додатковий член Q представляє квантовий потенціал Бома[6]:

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\gamma \Gamma [M^{-1} \nabla(n^\alpha)]}{n^\alpha}, \quad (2.9)$$

де \hbar – постійна Планка, M – ефективна маса, n – концентрація (електронів/дірок), γ та α – параметри підгонки.

1.2. Балістичні моделі для нанорозмірних транзисторів

7

Сила струму в одновимірних каналах визначається згідно співвідношення Ландауера-Буттікера:

$$I_{DS}(V_{DS}, V_{GS}) = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \{T(E, V_{DS}, V_{GS}) [f_S(E - E_{FS}) - [E - E_{FD}]]\} dE, \quad (2.10)$$

де $T(E, V_{DS}, V_{GS})$ – передавальний коефіцієнт, E_{FS} та E_{FD} – відповідно рівні Фермі випливу та стоку, $f_S(E, E_{FS})$ and $f_D(E, E_{FD})$ – відповідні функції Фермі-Дірака випливу та стоку.

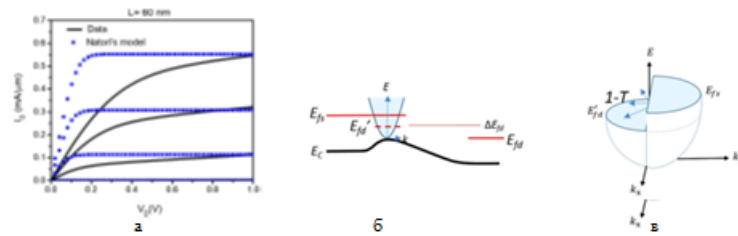


Рис. 2.1. Вольт-амперна характеристика балістичного транзистора (а) та профіль енергетичної зони вздовж каналу квазібалістичного транзистора, що зображує ефективний квазірівень Фермі E_{eff} для електронів (б), фактор Δ вимірює частку E_{eff} який відображається у верхній частині джерела та повна дисперсія у верхній частині енергетичної зони (в)

РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

8

3.1. Характеристики польових транзисторів із каналом на основі молібден сульфіді

Ландауер підкреслював роль контактів у визначенні струму через такий провідник. Максимальна провідність, в цьому випадку, обмежена контактами і визначається:

$$G_e = 2q^2/h \quad (3.1)$$

де q - елементарний заряд та h - стала Планка.

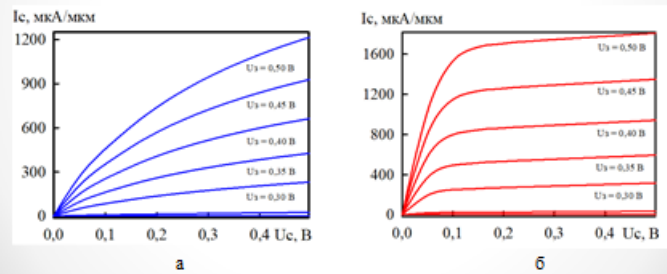


Рис.3.1. Вихідні ВАХ транзистора з каналом на основі молібден сульфіді, отримані в моделі з розсіюванням носіїв (а) та балістичним транспортом (б)

3.2. Перспективи та проблеми 2D напівпровідникових каналів

9

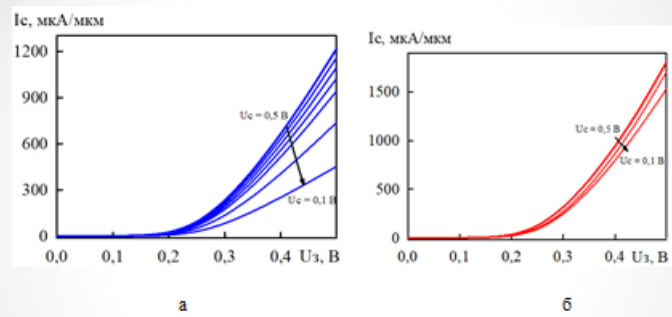


Рис.3.2. Передавальні ВАХ транзистора з каналом на основі молібдену сульфіді, отримані в моделі з розсіюванням носіїв (а) та балістичним транспортом (б)

ВИСНОВКИ**10**

1. Чисельне моделювання структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів є ефективним інструментом для дослідження їхнього функціонування та визначення оптимальних параметрів для досягнення кращих характеристик; використання двовимірних наноматеріалів у транзисторах дозволяє поліпшити електронні характеристики, такі як швидкість комутації та коефіцієнт підсилення.
2. Досліджувані чисельні моделі забезпечують достатню точність для вивчення різних фізичних процесів, які відбуваються у транзисторах на основі двовимірних наноматеріалів, включаючи електронний перенос, зарядову інжекцію, рекомбінацію та розсіювання.
3. Результати чисельних експериментів показали, що оптимальні параметри транзисторів із каналом сульфід молібдену можуть бути визначені для досягнення кращої ефективності та швидкості роботи. Такі транзистори виявляються перспективними для застосувань в електроніці та інших галузях, де важливо досягти високих швидкостей та енергоефективності.
4. Дослідження підтвердили високий потенціал транзисторів із каналом сульфід молібдену та інших 2D-матеріалів і їхню можливість стати основою для створення нових поколінь електронних пристроїв з покращеними характеристиками та функціональністю.
5. Загальною висновком є те, що чисельне моделювання структури та характеристик транзисторів на основі двовимірних наноматеріалів є важливим інструментом для дослідження та розвитку нових напівпровідникових пристроїв.