

УДК 621.382.323; 538.9

DOI 10.52928/2070-1624-2023-41-2-63-68

**МОДЕЛЬ ВЗАИМОСВЯЗИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ
ТРАНЗИСТОРНОЙ СТРУКТУРЫ С ДВУМЕРНЫМ КАНАЛОМ
ДЛЯ СИСТЕМ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ****В. А. ЗАЙЦЕВ, В. В. МЕЛЬНИКОВА, канд. физ.-мат. наук Д. А. ПОДРЯБИНКИН,
канд. физ.-мат. наук, доц. А. Л. ДАНИЛЮК****(Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск)**

Представлена модель и установлены закономерности взаимосвязи электрофизических параметров транзисторной структуры с двумерным каналом, основанные на самосогласовании электрохимического потенциала и концентрации носителей заряда двумерного канала в полевой транзисторной структуре. Такое самосогласование обеспечивается совмещением статистики Ферми – Дирака с условием электронейтральности транзисторной структуры. Рассмотрено влияние на электрофизические параметры транзисторной структуры с двумерным полупроводниковым каналом ширины запрещенной зоны материала канала, емкости подзатворного диэлектрика, емкости интерфейсных состояний. Разработанная модель взаимосвязи электрофизических параметров транзисторной структуры с двумерным каналом может использоваться в системах автоматизированного проектирования элементной базы микро- и нанoeлектроники.

Ключевые слова: транзисторная структура, двумерный полупроводник, канал, взаимосвязь электрофизических параметров, электрохимический потенциал, квантовая емкость, зарядовая неустойчивость.

Введение. Разработка и модернизация систем автоматизированного проектирования элементной базы приборов и устройств обработки и передачи цифровой информации является одним из ключевых направлений цифровой трансформации общества и производства. Создание и внедрение новой, более энергоэффективной элементной базы микро- и нанoeлектроники помимо решения технологических проблем также требует непрерывного совершенствования алгоритмов для автоматизированного проектирования элементной базы, разработки моделей новых элементов, пригодных для применения в системах автоматизированного проектирования, решения вопросов, связанных с верификацией новых моделей и их адаптацией к производству, построения с их помощью эквивалентных (электрических) схем.

Рост энергоэффективности и быстродействия транзисторов в настоящее время связывается с применением двумерных полупроводников. В таких транзисторах отсутствуют недостатки, присущие объемным транзисторам при уменьшении их размеров. К примеру, отсутствие обеднённой области, существующей в традиционных кремниевых МОП-структурах, ведёт к уменьшению паразитных параметров. К тому же отличительной чертой транзистора с двумерным каналом является важная роль квантовой ёмкости, связанной с видом энергетической зависимости плотности состояний в двумерном полупроводнике.

Одними из наиболее перспективных считаются дихалькогениды молибдена и вольфрама, обладающие прямой запрещённой зоной [1–4]. Их применение, а также аналогичных двумерных полупроводников с шириной запрещенной зоны до 1-2 эВ, позволяет достичь необходимых электрических параметров транзисторов с двумерными каналами [5; 6].

Наряду с решением технологических проблем для применения двумерных материалов в транзисторных структурах необходимо еще решить вопросы, связанные с режимами их оптимального функционирования. Это связано с тем обстоятельством, что электрические характеристики транзисторов с двумерными каналами самым существенным образом определяются взаимосвязью электрофизических параметров транзисторной структуры. Кроме свойств материалов, из которых формируются транзисторные структуры с двумерными каналами, режимы функционирования в значительной мере обуславливаются такими электрофизическими параметрами, как электрохимический потенциал μ , заряд канала Q , квантовая емкость канала C_Q , емкость канала C_{CH} и затвора C_G , емкость интерфейсных состояний C_{it} , которые самосогласованным образом влияют друг на друга и в конечном счете определяют электрические выходные характеристики транзистора. Главным образом, электрофизические параметры определяют передаточную характеристику и ее крутизну, а также выходную характеристику и ее коэффициент усиления по напряжению [7].

Таким образом, актуальны исследования взаимосвязи электрофизических параметров транзисторных структур с двумерными каналами, выявление влияния этой взаимосвязи на выходные характеристики, разработка моделей подобных взаимосвязей, пригодных для систем автоматизированного проектирования транзисторов с двумерными каналами.

Целью работы является определение взаимосвязи между электрохимическим потенциалом, концентрацией носителей заряда, зарядом канала, квантовой емкостью, емкостями канала и затвора, потенциалом

полевого электрода, емкостью подзатворного диэлектрика, емкостью состояний на интерфейсах транзисторной структуры и разработка модели такой взаимосвязи, пригодной для систем автоматизированного проектирования.

Модель взаимосвязи электрофизических параметров. Объектом моделирования является транзисторная структура, включающая двумерный полупроводниковый канал на диэлектрической подложке и полевой электрод (затвор), с отделенным от канала подзатворным диэлектриком. Для материала двумерного канала используются прямозонные дихалькогениды переходных металлов [8; 9]. Взаимосвязь между концентрацией электронов на единицу площади двумерного полупроводниковый канала n_e и его электрохимическим потенциалом μ задается выражением [6]

$$n_e(\mu) = \int_{E_c}^{\infty} \left(\frac{4\pi m_e}{h^2} \right) \sum_n H(E - E_n) f(E - \mu) dE, \quad (1)$$

где m_e – эффективная масса электронов;

h – постоянная Планка;

H – функция Хэвисайда;

E_n – энергия n^{th} -подзоны (превалирующий вклад в концентрацию носителей заряда вносит основное состояние с $n=0$);

E_c – энергия минимума зоны проводимости;

f – функция Ферми – Дирака.

Концентрация дырок n_h определяется аналогичным выражением.

Другая взаимосвязь между концентрацией электронов и электрохимическим потенциалом посредством потенциала полевого электрода V_G с учетом емкостей подзатворного диэлектрика и интерфейсных состояний определяется уравнением электростатики исходя из условия электронейтральности транзисторной структуры [10]

$$qV_G = \mu \left(1 + \frac{C_{it}}{C_{ox}} \right) + \frac{q^2 n_s(\mu)}{C_{ox}}, \quad (2)$$

где V_G – потенциал полевого электрода;

$n_s = n_e - n_h$,

q – элементарный заряд.

Совместное решение уравнений (1) и (2) позволяет определить зависимости электрохимического потенциала, концентрации носителей заряда и квантовой емкости $C_Q = q^2 (dn_s / dm)$ от потенциала полевого электрода V_G и найти взаимосвязи между ними.

Кроме квантовой емкости, важными параметрами являются емкость затвора и емкость канала, которые также взаимосвязаны с концентрацией носителей заряда и квантовой емкостью. В области низких частот ёмкости затвора и канала записываются следующим образом [10]:

$$C_G = \frac{d(n_s + N_G)}{dV_G} = \frac{C_Q + C_{it}}{1 + (C_Q + C_{it}) / C_{ox}}; \quad (3)$$

$$C_{CH} = \frac{d(n_e + n_h)}{dV_G} = \frac{C_Q}{1 + (C_Q + C_{it}) / C_{ox}}, \quad (4)$$

где N_G – число положительных зарядов в подзатворном диэлектрике на единицу площади.

Результаты расчетов и обсуждение. Для проведения расчетов были использованы следующие величины параметров транзисторной структуры с двумерным каналом: ширина запрещенной зоны материала двумерного канала $E_g = 0,25 - 2,1$ эВ, удельная емкость подзатворного диэлектрика $(0,03 - 4)10^{-3}$ Ф/м², удельная емкость интерфейса $C_{it} = (1 - 5)10^{-3}$ Ф/м², потенциал полевого электрода $V_G = 0 - 5$ В, эффективная масса электронов $(0,45 - 0,56)m_0$. Здесь m_0 – масса свободного электрона. Для случая $V_G > 0$

и $n_e \gg n_h$ проводились расчеты электрохимического потенциала канала μ , концентрации электронов, квантовой емкости, емкости затвора и канала при варьировании ширины запрещенной зоны E_g , емкости подзатворного диэлектрика C_{ox} , емкости интерфейсных состояний C_{it} . В результате установлено, что с увеличением потенциала полевого электрода электрохимический потенциал растет и выходит на насыщение. Рост электрохимического потенциала соответствует увеличению концентрации электронов и, соответственно, заряда канала Q (рисунок 1). Увеличение ширины запрещенной зоны приводит к сдвигу зависимости $m(Q)$ по оси Q в сторону меньших значений Q . Как показали проведенные расчеты, квантовая емкость канала C_Q при $V_G = 5$ В, $C_{ox} = 1,77 \cdot 10^{-3}$ Ф/м² и $C_{it} = 10^{-3}$ Ф/м² достигает величины 0,25 – 0,65 Ф/м² в зависимости от ширины запрещенной зоны E_g . Уменьшению квантовой емкости способствует рост ширины запрещенной зоны, уменьшение удельной емкости подзатворного диэлектрика и увеличение емкости C_{it} .

Определена взаимосвязь квантовой емкости и заряда канала $C_Q(Q)$. Эта взаимосвязь характеризуется следующим эффектом. При изменении ширины запрещенной зоны, емкости C_{ox} и емкости C_{it} зависимости $C_Q(Q)$ стягиваются в одну кривую. Полученный эффект объясняется наличием в данном случае самосогласованного изменения заряда канала и его электрохимического потенциала при варьировании величин C_{ox} , C_{it} , E_g . Такое самосогласование обусловлено наличием двух взаимосвязей концентрации носителей заряда и электрохимического потенциала: с одной стороны посредством статистики Ферми – Дирака, а с другой – условия электронейтральности транзисторной структуры. При этом зависимость квантовой емкости от емкости подзатворного диэлектрика характеризуется монотонным ростом, зависящим от потенциала полевого электрода и не зависящим от ширины запрещенной зоны (рисунок 2).

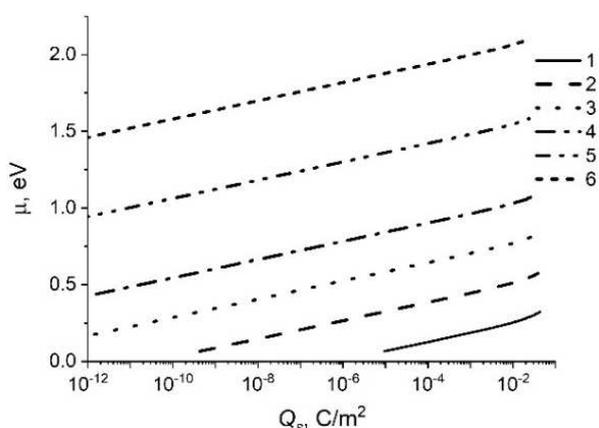


Рисунок 1. – Зависимость электрохимического потенциала двумерного канала от его заряда при варьировании E_g в диапазоне 0,26 – 2,08 эВ (соответственно кривые 1–6)

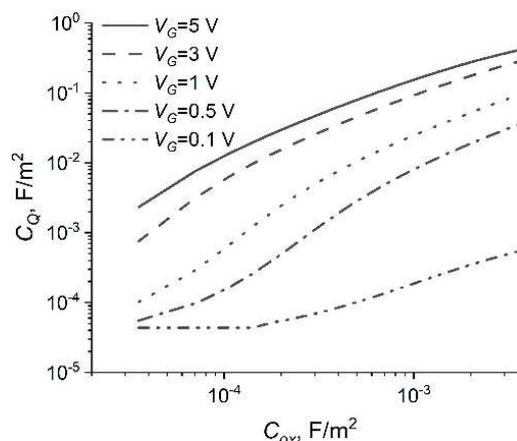


Рисунок 2. – Зависимость квантовой емкости транзисторной структуры с двумерным каналом от емкости подзатворного диэлектрика при варьировании V_G

Определены взаимосвязи емкостей затвора и канала с зарядом канала, а также установлено, что при варьировании ширины запрещенной зоны они также стягиваются в одну кривую, но при постоянных величинах емкости подзатворного диэлектрика и интерфейсных состояний. Полученные результаты характеризуют взаимосвязь емкостей затвора и канала с зарядом канала (рисунок 3). При варьировании ширины запрещенной зоны и постоянных значениях C_{ox} и C_{it} емкости канала и затвора стягиваются каждая в одну кривую, характеризуемую наличием насыщения. В области насыщения емкости C_G , $C_{CH} \approx C_{ox}$ (рисунок 4). Емкость C_{it} и потенциал V_G не влияют на насыщение, а только на начальные участки зависимостей $C_G(Q)$, $C_{CH}(Q)$ (см. рисунок 4). Следует отметить наличие характерных особенностей на кривых $C_G(Q)$, $C_{CH}(Q)$, которые связаны с их максимальными величинами в зависимости от ширины запрещенной зоны. Эти значения ограничиваются шириной запрещенной зоны. С ростом E_g наблюдается сдвиг областей насыщения в сторону меньших значений Q .

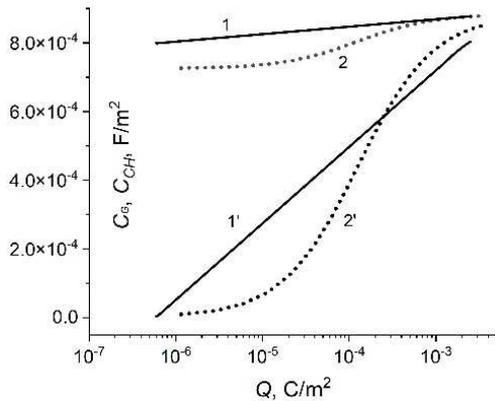


Рисунок 3. – Емкость затвора (1, 2) и канала (1', 2') в зависимости от заряда канала при различных емкостях интерфейса: 1, 1' – $C_{ii} = 8,2 \cdot 10^{-3} \text{ Ф/М}^2$, 2, 2' – $C_{ii} = 4 \cdot 10^{-3} \text{ Ф/М}^2$, $C_{ox} = 9 \cdot 10^{-3} \text{ Ф/М}^2$

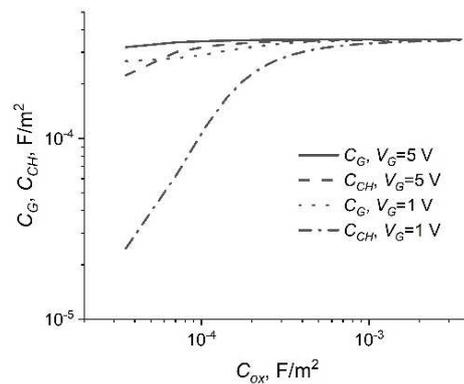


Рисунок 4. – Емкость затвора и канала в зависимости от емкости подзатворного диэлектрика при различных значениях потенциала V_G . $C_{ii} = 3 \cdot 10^{-3} \text{ Ф/М}^2$

Полученные в результате исследования взаимосвязи электрофизических параметров транзисторной структуры с двумерным каналом можно объяснить следующим образом. В первую очередь это связано с ограничением роста заряда канала при увеличении электрохимического потенциала μ , рост которого, в свою очередь, ограничивается величиной потенциала полевого электрода и соотношением емкостей интерфейса и подзатворного диэлектрика C_{ii} / C_{ox} . Это связано с тем, что разность зарядов полевого электрода и канала регулируется электрохимическим потенциалом канала. Такой эффект обуславливает наличие взаимосвязи заряда полевого электрода и канала через электрохимический потенциал. Это означает, что электрохимический потенциал, с одной стороны, управляет зарядом канала в соответствии со статистикой Ферми – Дирака, а с другой – регулирует зарядовый баланс структуры через условие электронейтральности.

Взаимосвязь квантовой емкости и заряда канала также объясняется тем обстоятельством, что электрохимический потенциал выполняет ключевую роль, определяющую согласование между условием электронейтральности и статистикой Ферми – Дирака, определяющей концентрацию носителей заряда в зависимости от электрохимического потенциала.

Вырождение квантовой емкости, емкости канала и затвора в зависимости от заряда канала при варьировании ширины запрещенной зоны, емкости подзатворного диэлектрика и емкости интерфейса свидетельствует о стремлении транзисторной структуры к компенсации снижения заряда канала с увеличением ширины запрещенной зоны путем увеличения электрохимического потенциала. Таким образом, зависимости квантовой емкости, емкости канала и затвора от заряда канала отражают наличие в системе самосогласованной взаимосвязи электрофизических параметров.

Для исследования устойчивости решения самосогласованной системы уравнений (1), (2), определяющей взаимосвязь электрофизических параметров транзисторной структуры с двумерным каналом, проводились расчеты чувствительности электрохимического потенциала, концентрации электронов, квантовой емкости к росту емкости интерфейсных состояний C_{ii} . Установлено, что при относительно низкой величине емкости C_{ii} зависимости $\mu(V_G)$ (рисунок 5, а, кривая 1), а также $n_s(V_G)$ и $C_Q(Q)$ (рисунок 5, б, кривая 1) монотонные. Вместе с тем увеличение емкости C_{ii} до $(8,1 - 8,3)10^{-2} \text{ Ф/М}^2$ приводит к возникновению резких подъемов (скачков) на зависимостях $\mu(V_G)$ и $n_s(V_G)$, $C_Q(V_G)$. Это может быть связано с тем, что существенное увеличение соотношения емкостей C_{ii} / C_{ox} приводит к расхождению самосогласованного решения системы (1), (2) в некоторой критической точке, определяемой величиной потенциала полевого электрода V_G . С физической точки зрения это объясняется тем, что высокая емкость интерфейса приводит к неустойчивости зарядового состояния в двумерном канале. Но дальнейший незначительный рост потенциала полевого электрода позволяет преодолеть такую неустойчивость, как можно видеть из рисунка 5, а, б, и далее наблюдается монотонный рост параметров $\mu(V_G)$ и $n_s(V_G)$, $C_Q(V_G)$, но уже с наличием разрыва в их значениях. Таким образом, происходит преодоление неустойчивости. Это может означать, что взаимосвязи электрофизических параметров транзисторной структуры характеризуются наличием бистабильных состояний при некоторых критических величинах некоторых свойств транзисторной структуры с двумерным каналом. Другими словами, можно предполагать существование критических точек, в которых нарушается зарядовый баланс и взаимосвязи электрофизических параметров претерпевают качественные изменения.

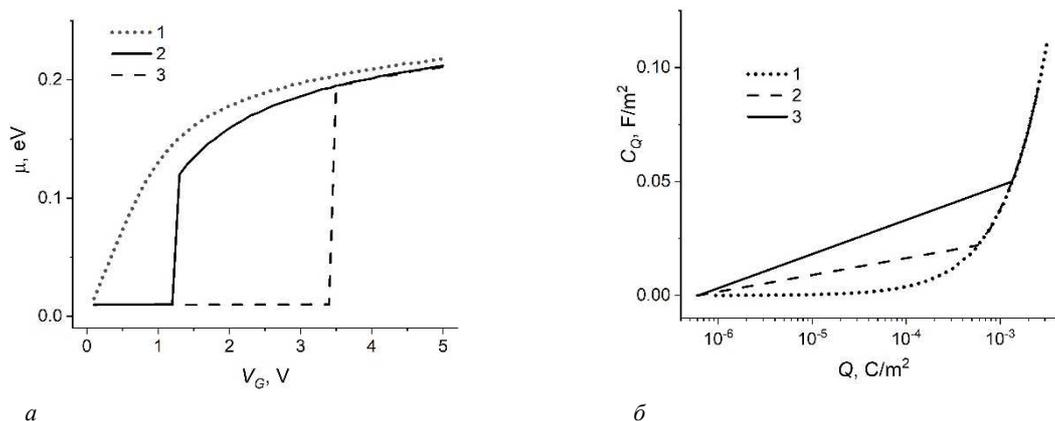


Рисунок 5. – Электрохимический потенциал в зависимости от V_G (а) и квантовая емкость в зависимости от заряда двумерного канала (б): $C_{ox} = 9,44 \cdot 10^{-3}$ Ф/м², $C_{it} = 8 \cdot 10^{-3}$ Ф/м² (кривые 1); $C_{it} = 8,1 \cdot 10^{-2}$ Ф/м² (кривые 2); $C_{it} = 8,3 \cdot 10^{-2}$ Ф/м² (кривые 3)

Таким образом, при моделировании режимов функционирования транзисторов с двумерными каналами, помимо учета наличия взаимосвязи электрофизических параметров, необходимо обращать внимание на возникновение неустойчивостей, вызванных нарушением зарядового баланса, что ведет к перестройке указанных взаимосвязей.

Заключение. Проведено исследование и разработана модель взаимосвязи электрофизических параметров транзисторной структуры с двумерным полупроводниковым каналом. Найдены и проанализированы закономерности взаимовлияния потенциала полевого электрода, ширины запрещенной зоны двумерного канала, емкости подзатворного диэлектрика и емкости интерфейсных состояний, электрохимического потенциала, заряда канала, его квантовой емкости, емкости затвора и емкости канала. Установлено, что квантовая емкость, емкость канала и емкость затвора при постоянных емкостях подзатворного диэлектрика и интерфейса определяются только зарядом канала и не зависят от ширины запрещенной зоны.

Выявленные взаимосвязи объясняются наличием самосогласованной реакции, заключающейся в подстройке заряда канала к его электрохимическому потенциалу при варьировании таких параметров, как ширина запрещенной зоны, емкость подзатворного диэлектрика и емкость интерфейсных состояний. Такое взаимовлияние вызвано самосогласованием концентрации носителей заряда и электрохимического потенциала за счет условия электронейтральности и статистики Ферми – Дирака, связанных через потенциал затвора транзисторной структуры. Также выявлена возможность возникновения неустойчивости, обусловленной нарушением зарядового баланса в критических точках.

Использование полученных взаимосвязей электрофизических параметров при моделировании электрических характеристик транзисторных структур с каналами из двумерных полупроводников позволяет выявить особенности токопереноса в них и повысить эффективность функционирования таких приборов, а также способствует созданию моделей, пригодных для использования в системах автоматизированного проектирования.

Благодарность. Исследования выполнены при финансовой поддержке и в рамках решения задач заданий 3.2 и 3.15 Государственной программы научных исследований «Фотоника и электроника для инноваций», 2021–2025 гг.

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Yoon, Y., Ganapathi, K., & Salahuddin, S. (2011). How good can monolayer MoS₂ transistors be? *Nano Letters*, 11(9), 3768–3773. DOI: [10.1021/nl2018178](https://doi.org/10.1021/nl2018178).
2. Wang, Q. H., Kalantar-Zadeh, K., Kis, A., Coleman, J. N., & Strano, M. S. (2012). Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nature Nanotechnology*, 7(11), 699–712. DOI: [10.1038/nnano.2012.193](https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193).
3. Mingsheng, X. Tao, L., Minmin, S., & Hongzheng, C. (2013). Graphene-Like Two-Dimensional Materials. *Chemical Reviews*, 113(5), 3766–3798. DOI: [10.1021/cr300263a](https://doi.org/10.1021/cr300263a).
4. Radisavljevic, B., Radenovic, A., Brivio, J., Giacometti, V., & Kis, A. (2011). Single-layer MoS₂ transistors. *Nature Nanotechnology*, 6(3), 147–150. DOI: [10.1038/nnano.2010.279](https://doi.org/10.1038/nnano.2010.279).
5. Cao, W., Kang, J., Liu, W., & Banerjee, K. (2014). A Compact Current–Voltage Model for 2D Semiconductor Based Field-Effect Transistors Considering Interface Traps, Mobility Degradation, and Inefficient Doping Effect. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 61(12), 4282–4290. DOI: [10.1109/TED.2014.2365028](https://doi.org/10.1109/TED.2014.2365028).

6. Jiménez, D. (2012). Drift-diffusion model for single layer transition metal dichalcogenide field-effect transistors. *Applied Physics Letters*, 101(24), 243501. DOI: [10.1063/1.4770313](https://doi.org/10.1063/1.4770313).
7. Makovskaya, T., Danilyuk, A., Krivosheeva, A., Shaposhnikov, V., & Borisenko, V. (2020). Charge Properties of the MOS Transistor Structure with the Channel Made from a Two-Dimensional Crystal. *Russian Microelectronics*, 49(7), 507–515. DOI: [10.1134/S1063739720070069](https://doi.org/10.1134/S1063739720070069).
8. Chernozatonskii, L., & Artyukh, A. (2017). Quasi- two-dimensional transition metal dichalcogenides: structure, synthesis, properties and applications. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 61(1), 2–28. DOI: [10.3367/ufne.2017.02.038065](https://doi.org/10.3367/ufne.2017.02.038065).
9. Wang, G., Chernikov, A., Glazov, M. M., Heinz, T. F., Marie, X., Amand, T., & Urbaszek, B. (2018). Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides. *Review of Modern Physics*, 90(2), 021001. DOI: [10.3367/UFNr.2017.02.038065](https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.02.038065).
10. Zebrev, G. I. (2011). Graphene Field Effect Transistors: Diffusion-Drift Theory. In S. Mikhailov (Eds.), *Physics and Applications of Graphene-Theory* (476–498). InTech. DOI: [10.5772/14211](https://doi.org/10.5772/14211).

Поступила 28.08.2023

ELECTROPHYSICAL PARAMETERS INTERRELATION MODEL FOR CAD SYSTEMS

U. ZAITSAU, V. MELNIKOVA, D. PODRYABINKIN, A. DANILYUK
(Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk)

A model is presented and regularities are established for the relationship between the electrophysical parameters of a transistor structure and a two-dimensional channel, based on the self-consistency of the electrochemical potential and the concentration of charge carriers of a two-dimensional channel in a field-effect transistor structure. Such self-consistency is ensured by combining the Fermi – Dirac statistics with the condition of electrical neutrality of the transistor structure. The effect on the electrophysical parameters of a transistor structure with a two-dimensional semiconductor channel is considered for the band gap of the channel material, the capacitance of the gate dielectric, and the capacitance of interface states. The developed model of the relationship between the electrophysical parameters of a transistor structure with a two-dimensional channel can be used in computer-aided design systems for the element base of micro- and nanoelectronics.

Keywords: transistor structure, two-dimensional semiconductor, channel, electrophysical parameters relationship, electrochemical potential, quantum capacitance, charge instability.