

## ЕЛЕКТРОНІКА

УДК 681.2

DOI <https://doi.org/10.32782/2663-5941/2023.1/52>

**Бурик І.П.**

Конотопський інститут Сумського державного університету

**Бібік В.В.**

Конотопський інститут Сумського державного університету

**Гричановська Т.М.**

Конотопський інститут Сумського державного університету

**Бурик М.П.**

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

### МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА З КАНАЛОМ НА ОСНОВІ МОЛІБДЕН СУЛЬФІДУ

*Наведено огляд робочих характеристик польового транзистора з каналом на основі молібден сульфїду. Розглянуто основи моделювання таких структур за допомогою програмного середовища NanoHub. Наведено результати дослідження робочих характеристик польового транзистора з каналом на основі молібден сульфїду, отримані результати свідчать про більш високу його продуктивність, ніж планарних структур або FinFET. Чисельне моделювання робочих характеристик польового транзистора із каналом на основі молібден сульфїду розкриває проблемні сторони та особливості застосування двовимірних матеріалів у електронному приладобудуванні, отримані результати демонструють допустимі величини електричних параметрів та можуть бути застосовані при вивченні особливостей комп'ютерного моделювання приладових структур наноелектроніки. Поряд з цим, повністю охопити або навіть правильно оцінити потенціал двовимірних матеріалів для застосування у транзисторах досить складно. Електронні властивості визначаються їхніми внутрішніми дефектами, поверхневими адсорбатами або порушеннями міжфазної поверхні. На робочі характеристики негативно впливають надмірний контактний опір, значний гістерезис та великі відхилення між приладами. Екстраполяція відомих принципів, які засновані на ідеалізованих приладах з керованим легуванням, омичним контактом, незначним гістерезисом, малою паразитною ємністю і струмом витоку, у транзистори із каналом у вигляді двовимірного матеріалу іноді може призвести до значних невізначностей або навіть до помилкових висновків. Тому, щоб сприяти ефективному просуванню в цій галузі, необхідно створити належну оцінку забезпечення дійсності параметрів транзисторів. Це обумовить розуміння справжнього потенціалу та проблем кожного матеріалу, структури приладу або технологічного процесу виготовлення.*

**Ключові слова,** польовий транзистор, молібден сульфїду, балістичний транспорт, електричні параметри.

**Постановка проблеми.** Зараз не існує фундаментальних перешкод для обробки транзисторів із каналами на основі двовимірних (2D) матеріалів у масштабі пластин і промислових спроб їх виробництва. Успішний перехід від лабораторії до фабрики вимагає об'єднаних зусиль багатьох сторін:

– від хіміків і матеріалознавців, щоб синтезувати та оцінити атомарнотонкі матеріали;

– від фізиків, щоб розробити та апробувати відповідні моделі для опису інжекції та транспортування носіїв заряду;

– від інженерів-електроників, щоб оцінити та перевірити пристрої з більш значущими показниками продуктивності та розробити та впровадити стратегії інтеграції з поточною кремнієвою електронікою.

Постійна мініатюризація електроніки сприяла значному зростанню ступеня інтеграції мікросхем. Кремнієві транзистори знаходяться у нормах техпроцесу нижче 10 нм. Поряд з цим зросли і різні технічні проблеми. Дослідження альтернативної будови польових транзисторів або нових матеріалів стає все більш важливим для майбутніх процесорних чіпів.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** У 90-х роках минулого сторіччя як реакція на запит суб-25 нм норм техпроцесу було розроблено такі структури як FinFET. Прийняття останніх успішно розширило масштабування елементів до вузлів технології нижче 10 нм. Слід відміти, що найменування норма техпроцесів втратило своє історичне значення (фізична довжина затвору) і служить лише «маркетинговою назвою». Поряд з загальновідомими планарними та FinFET транзисторами великий інтерес мають коаксіальні структури із затвором, що оточує канал з усіх сторін. Побудовані та активно досліджуються горизонтальні та вертикальні канали на основі нанодротів та нанотрубок [1-5].

Поряд з цим перспективними вважаються транзисторні структури із каналами на основі таких 2D матеріалів як молібден сульфід, вольфрам сульфід, чорний фосфор, максени (MXenes) [4]. Насамперед це пов'язано з можливістю практичної реалізації для останніх балістичного транспорту носіїв заряду.

Розглянемо основні вимоги, які пред'являються до польових транзисторів із каналом на основі 2D матеріалу: несприйнятливості до випадкових флуктуацій домішки; електростатична якість вища, ніж у планарних транзисторах; відносна простота виготовлення; можливість динамічного регулювання порогової напруги; ефективність топологічного розміщення елементів така сама або краще, ніж у планарних транзисторах. Для задоволення першої вимоги концентрація домішки у каналі має бути низькою. Для виконання другої вимоги необхідні багатозатворні транзистори. Для реалізації третьої вимоги необхідно уникати суб-5нм товщини каналу або високого відношення топологічних розмірів (наприклад, «Fin» із відношенням висоти до ширини більше 3). Щоб виконати четверту вимогу, необхідний нижній затвор або безпосередній контакт до бази. П'ята вимога не є критичною, вона призначена для транзисторів із каналом, ширина якого більша ніж крок металізації. З усіх транзисторів з тонкою базою тільки планарні структури (з відповідним зміщенням нижнього затвора) можуть задовольнити всім

цим вимогам. Практичне виготовлення останніх визначається високою вартістю підкладок із прихованим шаром ( $< 10$  нм) [1].

Для вирішення проблем, пов'язаних з масштабуванням в тривимірних об'ємних напівпровідниках, велике сімейство 2D матеріалів привернуло останнім часом значний інтерес завдяки своїй атомарно тонкій товщині каналу ( $< 1$  нм), де носії заряду утримуються в одноатомному каналі, або каналі з кількома атомами. Зокрема, 2D матеріали мають ряд переваг, зокрема незначну зміну рухливості зі зменшенням товщини. Тому, хоча багат шарові структури можуть не показати конкурентну перевагу над об'ємними напівпровідниками (такими як кремній або арсенід галію), одно- або багат шарові структури демонструють очевидні переваги в діапазоні суб-3 нм товщин [2]. Це є суттєвим для продовження масштабування транзистора. Ефективна рухливість кремнію швидко зменшується з товщиною нижче 5 нм, тоді як рухливість польового ефекту для 2D напівпровідників мало залежить від товщини і значно вища в цьому випадку.

Транзистори із каналом на основі 2D матеріалів демонструють набагато меншу величину допорогового розкиду, що важливо для постійного масштабування довжини затвора нижче 10 нм. Це важко досягти в кремнієвих структурах, навіть якщо використовується передова конструкція FinFET. Таким чином, застосування 2D напівпровідників дозволяє забезпечити шлях до вузлів із суб-5 нм нормами техпроцесу [2-5].

Поряд з цим листовидна структура, електронні, оптоелектронні, фізичні та хімічні властивості 2D матеріалів надзвичайно привабливі та викликали величезний дослідницький інтерес [2-5]. Через їхню малу товщину транспорт носіїв (електрон/дірка), фононів і фотонів сильно обмежений зовнішніми поверхнями. Це призводить до незвичайних змін їх електронних, теплових та оптичних властивостей. Однак застосування 2D матеріалів сильно обмежено або через низьку власну рухливість носіїв, або через зниження рухливості внаслідок впливу матеріалу підкладки. Як приклад, хоча кілька застосувань графену були досліджені через його надзвичайно високу рухливість носіїв, але його практично нульова заборонена зона призводить до низького співвідношення струму включення/вимкнення. Це суттєво обмежило його практичне застосування для електронних пристроїв.

Таким чином, відмітимо наступні переваги транзисторів із каналом на основі 2D матері-

алу: зменшення геометричних короткоканальних ефектів; малий статичний струм витоку та динамічне споживання; високе відношення струмів у відкритому та закритому станах; сумісність із існуючими технологіями виготовлення; потенційно дуже високий рівень інтеграції.

**Постановка завдання.** У класичній теорії для визначення густоти струму носіїв, коефіцієнтів генерації, рекомбінації та інших параметрів як базові використовують рівняння Пуассона та безперервності. Для прогнозування робочих характеристик польових транзисторів можуть бути застосовані дифузійно-дрейфові транспортні моделі із статистиками Больцмана або Фермі-Дірака. Врахування квантового потенціалу Бома дозволяє подолати проблеми їх апробації при проявленні ефектів короткого каналу.

Слід відмітити, що т.зв. балістичні транзистори мають характерну схему енергетичних рівнів з контрольованим бар'єром. На ній присутня невелика область (вікно Фермі), яка має балістичну провідність. Сила струму в каналі визначається згідно концепції Ландауера. Завдяки відсутності зворотного розсіювання (довжина вільного пробігу збільшується до лінійного розміру каналу), такі транзистори можуть мати відмінні характеристики. Також між металевим електродом та каналом формується бар'єр Шоттки. Це довгий час перешкоджало створенню балістичних транзисторів. Цю проблему вдалося вирішити завдяки використанню паладію як матеріалу електродів.

Для дослідження нанорозмірних транзисторних структур із каналом на основі молібден сульфідів використано on-line ресурси NanoHUB [6]. В основу моделювання покладено розв'язання систем рівнянь Пуассона і Шредінгера в рамках співвідношення нерівноважної функції Гріна. Для розв'язання рівняння Пуассона, що зв'язує заряди та потенціали всередині каналу приладу використовується тривимірна задача. У цьому випадку сітка будується навколо кожного одиничного елемента (атома, іона) структури. Двовимірною моделлю Шредінгера визначає можливість знаходження носія заряду в перерізах каналу, а сам транспорт враховується одновимірним рівнянням [7, 8].

Таким чином в рамках співвідношення Ландауера-Буттікера квазібалістичний транспорт носіїв заряду для польових транзисторів може бути визначений згідно виразу [7, 8]:

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

де  $E_{FS}$  та  $E_{FD}$  – рівні Фермі відповідно витоку та стоку,  $f_S(E, E_{FS})$  and  $f_S(E, E_{FD})$  – функції Фермі-Дірака

відповідно витоку та стоку,  $T(E, V_{DS}, V_{GS})$  – транспортний коефіцієнт.

Об'єктом дослідження даної роботи є особливості транспорту носіїв заряду польових транзисторів з каналами на основі двовимірних матеріалів.

Мета роботи полягає у вивченні особливостей робочих характеристик польових транзисторів, отриманих шляхом чисельного моделювання із врахуванням розсіювання носіїв заряду та балістичного транспорту.

**Виклад основного матеріалу.** Транзистор – це електронний перемикач, у якому провідність напівпровідникового каналу між електродами витоку та стоку може вмикатися та вимикатися третім електродом затвором, електростатично з'єднаним через тонкий діелектричний шар. Таким чином, поведінка перемикачів типового тонкоплівкового польового транзистора диктується електростатикою в трививідному пристрої. У даній роботі використано наступні вхідні дані: у двовимірному каналі на основі молібден сульфідів потік електронів рухається від витоку до стоку та керується третім електродом затвором, який має довжину 20 нм. Затвор оточує канал з обох боків та відокремлений ізоляційним шаром товщиною 3,0 нм, який має діелектричну проникність 20. Величину температури середовища визначено на рівні 300 К. Значення порогової напруги становило 0,3 В, а напруги зміщення на керуючих електродах варіювалися в межах від 0 до 0,5 В. Для моделювання були використані транспортні моделі з врахуванням розсіювання носіїв та без врахування розсіювання носіїв (балістичний транспорт).

На рис. 1 та рис. 2 відповідно наведено вихідні та передавальні вольт-амперні характеристики (ВАХ) для наномасштабних транзисторних структур із каналом на основі молібден сульфідів. Отримані результати, зокрема в логарифмічних координатах дозволили визначити електричні параметри відповідно в рамках транспортних моделей з врахуванням розсіювання носіїв та без врахування розсіювання носіїв: допороговий розкид 78,7 мВ/декаду та 69,2 мВ/декаду; струм у відкритому стані  $1,2 \cdot 10^3$  мкА/мкм та  $1,9 \cdot 10^3$  мкА/мкм та струм витоку 0,1 мкА/мкм та 0,2 мкА/мкм; коефіцієнт підсилення  $\sim 10^4$ ; зниження бар'єру, індуковане 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 сульфідів, ніж структур польових транзисторів із каналом у вигляді вуглецевих нанотрубок [9]. Це дуже важливо для цифрового проектування, оскільки є визначальним параме-

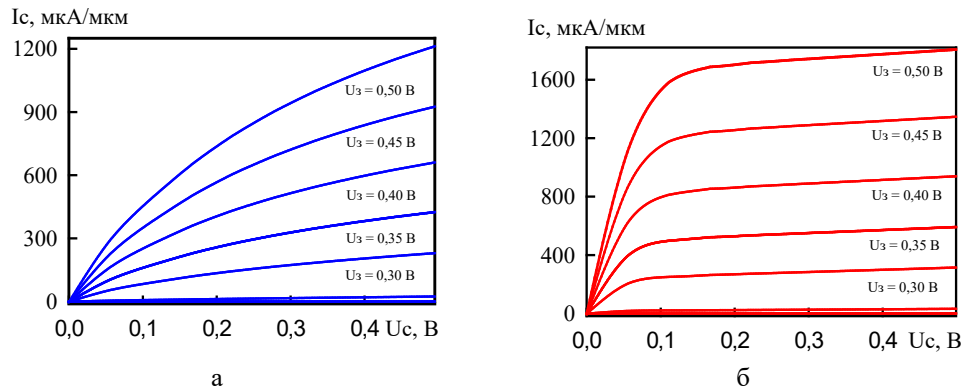


Рис. 1. Вихідні ВАХ транзистора із каналом на основі молібден сульфїду, отримані в рамках моделей із розсіюванням носіїв (а) та балістичного транспорту (б)

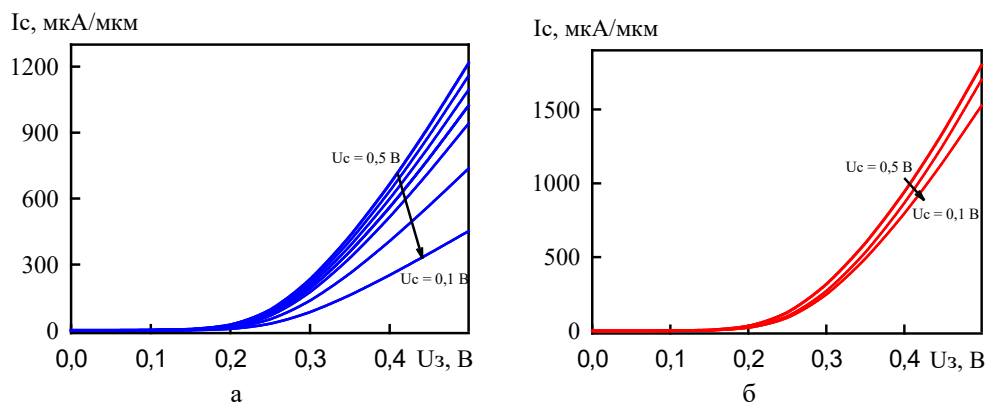


Рис. 2. Передавальні ВАХ транзистора із каналом на основі молібден сульфїду, отримані в рамках моделей із розсіюванням носіїв (а) та балістичного транспорту (б)

тром швидкості та потужності як окремого елемента так і схеми в цілому. Чим вище коефіцієнт, тим краща їх продуктивність.

Згідно моделі Шоклі при дослідженні транзисторів із каналом на основі 2D матеріалу рухливість носіїв визначається за допомогою рівняння [2]:

$$\mu = \frac{L}{WCU_c} \left( \frac{\partial I_c}{\partial U_g} \right),$$

де  $\mu$ ,  $W$ ,  $L$ ,  $C$ ,  $U_c$ ,  $U_g$ ,  $I_c$  – рухливість носіїв, ширина каналу, довжина каналу, ємність затвора, напруга витік-стік, напруга затвор-стік, та сила струму витік-стік відповідно.

При зміщеннях на стоці та затворі напругою 0,5 В рухливість носіїв становила величину  $50,2 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  та  $74,6 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ , відповідно отримані в рамках моделей із розсіюванням носіїв та балістичного транспорту. Такі дані добре узгоджуються з відомими даними [2, 4] для польових транзисторів із каналом на основі молібден сульфїду.

Для покращення мобільності двовимірних матеріалів застосовувалися різні методи, такі як легування, інженерія деформацій, створення гетероструктур або багат шарових систем, але жоден

з матеріалів не досяг значень мобільності, порівнянних з приладовим кремнієм. Наприклад, експериментально виміряна рухливість носіїв одношарового молібден сульфїду набагато менша, ніж прогнозована теоретично ( $410 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ) [4], внаслідок розсіювання на фонах ґратки, викликане міжфазними фонами, зарядженими домішками та високою к діелектричного середовища. Розсіювання носіїв заряду може відбуватися на фонах ґратки через дефор маційний потенціал. Розсіювання фонів залежить від температури і, таким чином, збільшується при підвищенні температури. На основі перших принципів розрахунків розсіювання акустичних/полярних фонів та екранування моношару молібден сульфїду, повідомляється, що їх мобільність може бути досягати  $17410 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  [4]; однак ці розрахунки не врахували ефект екранування вільних носіїв та діелектричної невідповідності.

Розсіювання фонів стає домінуючим через наявність високодіелектричного матеріалу, що призводить до зниження рухливості при кімнатній температурі. У сполуках молібден сульфїду дипольний момент, що виникає між катіоном та

аніоном, був зумовлений полярною природою хімічного зв'язку. Електричне поле, створене збуренням дипольного моменту полярних фононів, взаємодіє з носіями заряду, що призводить до низької рухливості носія. Цей процес відомий як полярне оптичне розсіювання фононів або взаємодія Фроліха [2]. Носії заряду можуть збуджувати фонони, якщо мода полярних коливань підтримується шаром діелектрика. Такі фонони мають віддалений інтерфейс або поверхневі оптичні фонони. У розсіянні через поверхневі оптичні фонони при кімнатній температурі переважає високодіелектричне середовище в порівнянні діелектричним шаром із низькою діелектричною проникністю [2, 10, 11]. Крім того, крім кулоновського та фононного розсіяння, структурні дефекти також відіграють важливу роль у зменшенні рухливості носіїв. Наприклад, джерелом сильного розсіювання може виступати іонна вакансія в неякісному зразку.

**Висновки.** За допомогою відкритих ресурсів проведено дослідження електричних параметрів короткоканальних транзисторних структур у рамках транспортних моделей із врахуванням роз-

сіювання носіїв та без розсіювання (балістичний транспорт).

Досліджено робочі характеристики транзисторних структур із каналом на основі молибден сульфіді. Відповідно до транспортних моделей з урахуванням розсіювання носіїв та без урахування розсіювання носіїв отримано наступні електричні параметри при напрузі зміщення затвору 0,5 В: допороговий розкид 78,7 мВ/декаду та 69,2 мВ/декаду; струм у відкритому стані  $1,2 \cdot 10^3$  мкА/мкм та  $1,9 \cdot 10^3$  мкА/мкм, струм витоку 0,1 мкА/мкм та 0,2 мкА/мкм; коефіцієнт підсилення  $\sim 10^4$ ; зниження бар'єру, індуковане стоком 43,3 мВ/В та 30,1 мВ/В.

В рамках моделі Шоклі було визначено рухливість носіїв для польових транзисторів із каналом на основі молибден сульфіді; при напрузі зміщення стоку 0,5 В величина рухливості носіїв у каналі в рамках моделі балістичного транспорту носіїв становила  $74,6 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$ , яка узгоджується з відомими даними. Відносно малі значення рухливості носіїв характерні для молибден сульфіді. Поряд з цим відомо, що для чорного фосфору можуть бути отримані її значно більш високі значення.

#### Список літератури:

1. Hu C. Modern semiconductor devices for integrated circuits. Upper Saddle River, N.J. ; London : Pearson Education. 2010. 351 p.
2. Liu Y., Duan X., Shin HJ. et al. Promises and prospects of two-dimensional transistors *Nature*. 2021. V. 591. Pp. 43-53. DOI: 10.1038/s41586-021-03339-z.
3. Veloso A., Eneman G., Huynh-Bao T. et al. Vertical nanowire and nanosheet FETs: device features, novel schemes for improved process control and enhanced mobility, potential for faster & more energy efficient circuits. 2019 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). 7-11 Dec. 2019. San Francisco: IEEE, 2019. Pp. 11.1.1-11.1.4. DOI:10.1109/IEDM19573.2019.8993602
4. Mir S.H., Yadav V.K., Singh J. K. Recent Advances in the Carrier Mobility of Two-Dimensional Materials: A Theoretical Perspective *ACS Omega*. 2020. V. 5. Pp. 14203-14211. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c01676>
5. Carvalho A., Trevisanutto P.E., Taioli S. et al. Computational methods for 2D materials modeling *Rep. Prog. Phys.* 2021. V.84. Pp. 106501 (21pp). DOI: 10.1088/1361-6633/ac2356
6. Ning Yang, Tong Wu, Jing Guo (2021), "2DFET," <https://nanohub.org/resources/2dfets>. (DOI: 10.21981/MCT5-1694).
7. Datta S. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport – Part B: Quantum Transport. Singapore: World Scientific. 2018. 260 p.
8. Lundstrom M. Fundamentals of Nanotransistors. Singapore: World Scientific, 2018. 342 p.
9. Xu L., Yang J., Qiu C. et al. Can carbon nanotube transistors be scaled down to the sub-5 nm gate length? *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2021. V. 13. Pp. 31957-31967. <https://doi.org/10.1021/acsaami.1c05229>
10. F. Wu, H. Tian, Y. Shen et al. Vertical MoS<sub>2</sub> transistors with sub-1-nm gate lengths. *Nature*. 2022. V. 603. Pp. 259-264. DOI: 10.1038/s41586-021-04323-3
11. Zhang, S., Liu, Y., Zhou, J. et al. Low Voltage Operating 2D MoS<sub>2</sub> Ferroelectric Memory Transistor with Hf<sub>1-x</sub>Zr<sub>x</sub>O<sub>2</sub> Gate Structure. *Nanoscale Res Lett*. 2020. V. 15. P. 157 (9 pp). <https://doi.org/10.1186/s11671-020-03384-z>

#### **Buryk I.P., Bibyk V.V., Grychanovs'ka T.M., Buryk M.P. SIMULATION OF THE CHARACTERISTICS OF A CHANNEL FIELD TRANSISTOR BASED ON MOLYBDENUM SULPHIDE**

*An overview of the operating characteristics of the field-effect transistor with a channel based on molybdenum sulfide is given. The basics of modeling such structures using the NanoHub software environment are considered. The results of the study of the operating characteristics of the field-effect transistor with a channel based on molybdenum sulfide are presented, the obtained results indicate its higher performance*

---

*than that of planar structures or FinFET. Numerical modeling of the operating characteristics of a field-effect transistor with a channel based on molybdenum sulfide reveals problematic aspects and features of the use of two-dimensional materials in electronic device construction, the obtained results demonstrate the permissible values of electrical parameters and can be applied when studying the features of computer modeling of nanoelectronics device structures. Along with this, it is quite difficult to fully grasp or even correctly assess the potential of two-dimensional materials for transistor applications. The electronic properties are determined by their internal defects, surface adsorbates or disturbances of the interfacial surface. The operating characteristics are adversely affected by excessive contact resistance, significant hysteresis and large deviations between devices. The extrapolation of known principles, which are based on idealized devices with controlled doping, ohmic contact, negligible hysteresis, low parasitic capacitance and leakage current, to channel transistors as a two-dimensional material can sometimes lead to significant uncertainties or even erroneous conclusions. Therefore, in order to promote effective advancement in this industry, it is necessary to create a proper assessment of ensuring the validity of transistor parameters. This will lead to an understanding of the true potential and problems of each material, device structure or manufacturing process.*

**Key words:** *field-effect transistor, molybdenum sulfide, ballistic transport, electrical parameters.*