

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна
Факультет радіофізики, біомедичної
електроніки та комп'ютерних систем
Кафедра фізичної і біомедичної електроніки
і комп'ютерних інформаційних технологій

ЗАТВЕРДЖУЮ

ВО завідувача кафедри

С.Л. Берднік _____ підпис
ініціали, прізвище

“ ____ ” _____ 2023 року

Дипломна робота магістра

на тему: **КІНЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ДВОВИМІРНИХ
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ МАТЕРІАЛІВ**

Виконав: студент II курсу магістратури, групи РЕ-61
спеціальності 153 Мікро- та наносистемна техніка
освітньо-професійна програма «Фізична та біомедична
електроніка»

Калініченко А. В.

Керівник
кандидат фіз.-мат. наук,
доцент

Боцула О.В.

2023 рік

Кінетичні властивості двовимірних напівпровідникових матеріалів

РЕФЕРАТ

Дипломна робота містить 59 сторінок, 21 ілюстрацію, 49 бібліографічних джерел.

В роботі розглянуто ефекти, пов'язані з електронним транспортом в моношарових напівпровідниках з використанням методу Монте-Карло. Цим методом досліджено фізичні процесив у планарних напівпровідникових структурах на основі моношарів. В рамках запропонованої моделі досліджено планарні діоди з гетеропереходом 2D MoS₂ – 3D GaN та визначено особливості формування характеристик таких структур в залежності від розмірів, положення елементів моношару та електрофізичних параметрів матеріалів. Показано, що в планарних GaN діодах, що місять гетероперехід MoS₂ струм якісно не змінюється на відміну від діодів з суцільною бічною границею MoS₂ характеристики якої визначаються переважно концентраціями легуючих домішок в матеріалах.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: моношар, MoS₂, гетероперехід, напруженність електричного поля, електричний струм.

ABSTRACT

This work contains 59 pages, 21 illustrations, 49 bibliographic sources.

In this article considers the effects associated with electronic transport in monolayer semiconductors using the Monte Carlo method. This method investigates physical processes in planar semiconductor structures based on monolayers. Within the framework of the proposed model, planar diodes with a 2D MoS_2 – 3D GaN heterojunction were investigated and the peculiarities of the formation of the characteristics of such structures were determined depending on the size, position of the monolayer elements and electrophysical parameters of the materials. It's shown that in planar GaN diodes containing a MoS_2 heterojunction, the current does not change qualitatively, in contrast to diodes with a continuous MoS_2 side border, the characteristics of which are mainly determined by the concentrations of alloying impurities in the materials.

KEYWORDS: monolayer, MoS_2 , heterojunction, electric field strength, electric current.

ЗМІСТ

Перелік найменувань та скорочень	5
ВСТУП.....	6
1 ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	8
1.1 Основи 2D матеріалів	8
1.2 Дихалькогеніди перехідних металів	12
1.2.1 Властивості	12
1.3 Гексагональний нітрид бору	19
1.3.1 Властивості	19
1.4 Тертя в 2D матеріалах.....	20
1.5 Пристрої	22
1.6 Переваги 2D матеріалів	23
1.7 Проблеми та виклики.....	24
1.8 Конструкції пристроїв	25
1.8.1 Транзистори	25
1.9 Датчики та детектори на моношарах	29
2 Характеристики структур на основі гетеропереходу об'ємний напівпровідник – моношар.....	37
2.1 Модель діодів на основі гетероструктури 2D/3D	37
2.2 Характеристики діодів з гетеропереходом об'ємний напівпровідник-моношар	42
2.2.1 Статичні характеристики діодів	42
2.3 Характеристики діода з бічною границею на основі MoS ₂	46
ВИСНОВКИ.....	52
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ.....	53
Додаток А	59

ПЕРЕЛІК НАЙМЕНУВАНЬ ТА СКОРОЧЕНЬ

1D - Одновимірний

2D - Двовимірний

3D - Тривимірний

ХОПФ - Хімічне осадження з парової фази

hBN - Гексагональний нітрид бору

ООІ - Оксид олова індію

ДПМ - Дихалькогенід перехідного металу

ККД - Коефіцієнт корисної дії

НДП - Негативна диференціальна провідність

МПЕ - Міждолинний перенос електронів

ВСТУП

В якості приладів для використання в діапазонах суб - ТГц та ТГц, пропонується використати планарні діодні структури, що містять додаткові активні елементи на бічних границях та електрично з'єднаних з одним із контактів планарної частини [1-4]. Зокрема у роботах [3,4] показано, що в планарних структурах з додатковими напівпровідниковими елементами, що були розташовані на бічній границі діода і електрично з'єднані з анодом діода, можливо отримати генерацію в широкому діапазоні частот, а саме – міліметрового та терагерцового діапазонів.

У таких структурах дрейф електронів та об'ємні ефекти в каналі поєднуються з переносом електронів в бічний активний елемент, що може суттєво вплинути на його характеристики. Елементи, що можуть використовуватися у якості бічних границь можуть впливати на формування вказаних вище умом як за рахунок модуляції провідності, наприклад, як це є у самоперемикаючих діодах [5], так і за рахунок перерозподілу носіїв заряду між областями діода, що мають відмінні властивості, що наприклад, має місце при використанні ефекту Ганна. У цьому напрямку перспективним є використання комбінації 2D-матеріалів, вирощених на звичайних 3D-напівпровідниках, оскільки це дає змогу поєднати переваги усталених 3D-напівпровідників з унікальними властивості 2D-матеріалів. Одну з таким комбінацій можна отримати, використовуючи об'ємні напівпровідники GaN та 2D-матеріали, зокрема дихалькогеніди перехідних металів (ДПМ) [6-15] у так званих гетероструктурах змішаних розмірів завдяки розвинутій планарній технології GaN, що вже практично реалізовано в ряді пристроїв: від світловипромінюючих діодів до приладів електроніки високої потужності. Отже, поєднання GaN з 2D ДПМ, такими як MoS_2 , має особливе значення для розробки нових гібридних гетероструктур, в тому числі для високочастотної електроніки. В роботі розглядаються планарні діодні структури, що містять активні поверхневі шари, які сформовано як на основі традиційних 3D матеріалів, так і з використанням гетероструктур 2D TMD/3D на прикладі гетероструктури

MoS₂/GaN досліджується перенесення заряду між двома електронними підсистемами у складі одного приладу.

1 ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1 Основи 2D матеріалів

Графен - алотроп вуглецю що складається з одного шару атомів у гексагональній решітці, що з'єднаний sp^2 . Ці зв'язки дуже міцні в площині, а з цього виходить, що фізично він може похвалитися одними з найнеймовірніших властивостей будь-якого відомого матеріалу. Його модуль Юнга дорівнює 1 ТПа, що є одним із найвищих коли-небудь виміряних, і має міцність на розрив 42 Нм^{-1} . Цей плоский зв'язок призводить до значного ступеня анізотропії з легкою деформацією поза площиною, незважаючи на надзвичайну жорсткість в площині. Теплопровідність також є незрівнянною: балістичні фонони у зважених моношарах підтримують найвище виміряне значення з усіх матеріалів. Можливо, це більше стосується гнучкої електроніки, оскільки було показано, що він здатний витримувати дуже великі навантаження, без пошкоджень і повного відновлення, продемонстрованого до навантажень 25%.

Графен є напівметалом, тобто, як і напівпровідник, він має дискретні валентні зони та зони провідності, але відрізняється тим, що не має забороненої зони. Для низьких енергій смуги є лінійними, що призводить до ще однієї з його рекордних властивостей: оскільки ефективна маса пропорційна величині, зворотній кривизні смуги, носії поведуться як безмасові ферміони Дірака і тому рухаються з ефективною «швидкістю світла» (0,33 % c), що призводить до рухливості до $200000 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$ і високої електропровідності. Він демонструє сильний ефект амбіполярного електричного поля, що означає, що застосування електричного поля може використовуватися для введення носіїв. Важливо відзначити, що цей ефект відбувається однаково як для електронів, так і для дірок. У моношаровій формі графен дуже прозорий, з коефіцієнтом поглинання видимого світла 2,3 % і широкосмуговим пропусканням через відсутність забороненої зони. Це значення лінійно зменшується зі збільшенням кількості шарів. Ці властивості дозволили досліджувати екзотичні фізичні явища в графені,

такі як електронна гідродинаміка, де електрони поведуться як фермі-рідина з властивостями, аналогічними класичним рідинам.

Раманівська спектроскопія є потужним методом дослідження 2D матеріалів. 2D виникає в результаті процесу розсіювання другого порядку від двох фононів і є специфічним для графітових матеріалів. У моношаровому графені співвідношення інтенсивностей 2D/G становить приблизно 4, і зі збільшенням кількості шарів це співвідношення зменшується, оскільки 2D розширюється, і стає порівняно менш інтенсивним. У дефектному матеріалі є ще один пік (D), який також виникає внаслідок процесу розсіювання другого порядку, цього разу за участю фонону та дефекту. Інтенсивність піку збільшуватиметься пропорційно до щільності дефектів, і тому його можна використовувати для характеристики рівня розладу, що виникає, наприклад, через технології обробки та виготовлення.

Синтез графену спочатку проводився шляхом механічного відшарування. Це дуже проста техніка, за якої шматок високоякісного графіту кілька разів розколюється, доки не залишиться дисперсія пластівців одно- або малошарового графену. Отриманий матеріал буде монокристалами високої якості з відмінними електронними властивостями, оскільки межі зерен і дефекти є основними джерелами розсіювання носіїв. За відсутності таких недоліків балістичний транспорт спостерігався на мікрометрових масштабах

Пов'язаний процес, ексfolіація рідинної фази (ЕРФ), може бути використаний для отримання суспензії пластівців графену від нанометрового до мікронного масштабу. Існує кілька методів, які використовуються для досягнення цього, але всі вони передбачають руйнування пластівців графіту в розчині. Це долає обмеження невеликого масштабу механічного відлущування, оскільки з цього розчину потім можна отримати великомасштабні полікристалічні плівки. Однак через велику кількість дефектів, малий розмір зерен і високий електричний опір між зернами — результат зв'язку Ван-дер-Ваальса, який їх з'єднує — ці плівки не підходять для високопродуктивної електроніки.

Щоб подолати проблеми, властиві цим процесам «зверху вниз», було розроблено кілька методів «знизу вгору». Епітаксійне зростання графену

графітізованими підкладками з карбіду кремнію (SiC) шляхом термічного розкладання дозволяє отримувати більші площі одно- або малошарового графену. Зростання на кристалографічних площинах або терасах призводить до утворення областей надзвичайно плоского і малодфектного матеріалу. Однак ця техніка, як правило, обмежена виробництвом невеликих плівок, а кількість шарів за своєю суттю важко контролювати, оскільки розкладання не є самообмеженим. Хоча, це не завжди необхідно, оскільки SiC є ізолятором і тому сумісний із виготовленням пристроїв, перенесення з субстрату для росту (наприклад, для гнучкої електроніки) також може виявитися проблематичним. Більш життєздатна техніка для великомасштабного виробництва, яка сумісна з роликовим виробництвом, хімічне осадження з парової фази (ОПФ) — це техніка, яка дозволила виробляти великомасштабні графенові плівки, які, хоч і не такі високоякісні, як ті, що виготовляються шляхом механічного відлущування або розкладання SiC, але є значно кращими, ніж вироблені із суспензій ЕРФ. Ця техніка передбачає розкладання вуглецевмісного прекурсора, розведеного в текучому екрані інертного газу, на каталітичній підкладці для вирощування графену (рис. 1.1).

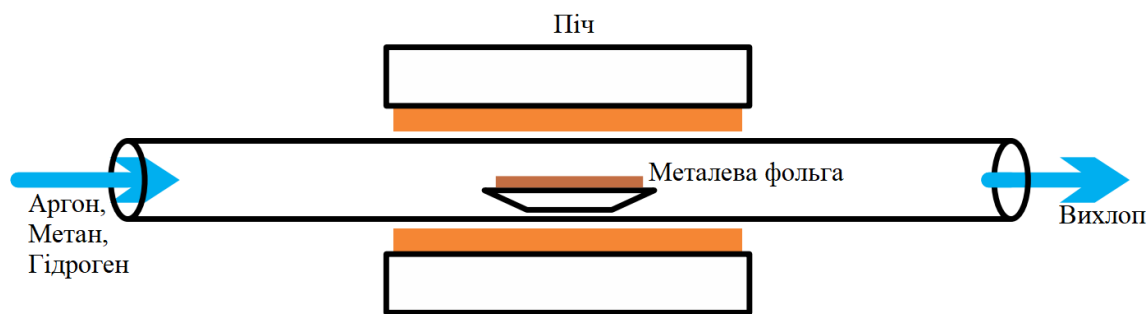


Рисунок 1.1: Схема установки ХОПФ для графену.[41, 42]

Подібне було продемонстровано на низці різних підкладок, найчастіше з використанням перехідних металів міді та нікелю, хоча кілька інших металевих (наприклад, паладій, рутеній та іридій) і рідше неметалічних (наприклад, SiO_2 , Al_2O_3 , Ga_2O_3 , MgO та ZrO) субстрати також життєздатні. Враховуючи переважну поширеність металевих підкладок у ОПФ графену, вони будуть у центрі уваги цього розділу.

У металах, де вуглець може розчинятися, таких як нікель, зростання графену досягається розкладанням вуглецевого прекурсора при високій температурі таким чином, що вуглець розчиняється в підкладці з наступною сегрегацією на поверхні, спричиненою зниженням розчинності вуглецю при температурі. опускається. Перед вирощуванням фольгу спочатку відпалюють у присутності водню, щоб збільшити розмір зерен і зменшити поверхневі оксиди.

Зростання на цих підкладках за своєю суттю важко контролювати, оскільки товщина виробленого графену сильно залежить від кількості розчиненого вуглецю (саме це функція тиску прекурсора, часу витримки та товщини фольги) та швидкості охолодження. Високі швидкості охолодження призводять до виділення надто великої кількості вуглецю на поверхні, утворюючи товсті шари графіту; низькі швидкості охолодження обмежують сегрегацію на поверхні, оскільки вуглець дифундує в основну масу, перешкоджаючи росту. Подібним чином дуже високі швидкості охолодження запобігають зростанню, загартовуючи підкладку та запобігаючи дифузії на поверхню. Ще більше ускладнює ситуацію те, що вуглець переважно відділяється до меж зерен, що призводить до більш товстого графену в цих областях. Кращим субстратом є такий, у якому вуглець має дуже низьку розчинність, такий як мідь. У цьому випадку ріст досягається не сегрегацією, а адсорбцією на поверхні субстрату. Як і у випадку з нікелем, фольга відпалюється в присутності водню перед тим, як подається вуглець шляхом розкладання прекурсора. Зростання відбувається, коли на поверхні міді є достатнє насичення вуглецем для зародження, яке потім росте та об'єднується в полікристалічну плівку за умови достатнього надходження вуглецю. Через свою низьку реакційну здатність мідь потребує температур росту понад 1000 °C, але навідміну від нікелю низький тиск не потрібен, оскільки не має необхідності запобігти надмірному розчиненню вуглецю. Ще одна перевага полягає в тому, що цей процес значною мірою обмежений поверхнею, і тому одношарові плівки набагато легше досягти, що означає, що мідь значною мірою витіснила нікель.

Хоча процес лише на поверхні дещо спрощує вирощування, параметри все одно потрібно ретельно контролювати: недостатнє постачання вуглецю призведе до неповного покриття; Надлишок постачання призводить до великої кількості ядер і, отже, до дрібнозернистої плівки, а також до утворення двошарових або більш товстих областей у точках зародження.

Також, одним із факторів є якість мідної фольги, оскільки зародження сприяє утворенню дефектів поверхні, таких як шорсткість і межі зерен. Щоб обмежити зародження, фольгу полірують, щоб зменшити шорсткість, і відпалюють перед введенням прекурсора, щоб стимулювати ріст зерен.

1.2 Дихалькогеніди перехідних металів

1.2.1 Властивості

Дихалькогеніди перехідних металів (ДПМ) — це підгрупа шаруватих дихалькогенідів металів, велика сім'я матеріалів, що складається з одного атома металу на кожні два атоми халькогену (група 16), які зазвичай можуть бути виділені в моношарову форму. ДПМ є найбільш широко вивченими в цій області, з властивостями в діапазоні від металевих до напівпровідникових залежно від кристалічної структури та використаного перехідного металу. Цей огляд буде зосереджений на напівпровідникових, оскільки вони найбільше стосуються гнучкої електроніки.

У рамках вивчення напівпровідникових ДПМ переважна більшість робіт була виконана на основі молібдену та вольфраму, хоча є докази того, що деякі інші, такі як титан, цирконій та олово, також демонструють таку поведінку.

Усі ці матеріали мають схожі фізичні та електронні властивості, тому далі буде загальний опис, заснований переважно на дослідженнях W-дихалькогенідів і Мо-дихалькогенідів. Як і графен, ДПМ є фізично міцними. Встановлено, що MoS_2 має модуль Юнга ~ 270 ГПа, міцність на розрив ~ 15 Нм $^{-1}$ і деформації руйнування до 25 %. Як і інші 2D-матеріали, вони дуже прозорі для видимого світла, поглинання

змінюється, але зазвичай становить менше 5%, але на відміну від графену деякі довжини хвиль будуть сильніше ослаблені через поглинання в забороненій зоні.

Однією з проблем, з якою стикається інтеграція ДПМ в електронні пристрої, є їх схильність до деградації в умовах навколишнього середовища. Вони легко окислюються, починаючи з наявних дефектів і призводячи до втрати атомів халькогену протягом кількох місяців, оскільки вони замінюють кисень. Цей ефект також може бути опосередкований фотозбудженням і електронним зміщенням. Отримана фрагментація кристалів і порушення електронних властивостей потребуватимуть стратегій для придушення цього ефекту та забезпечення стабільної роботи пристрою протягом тривалого часу. Було показано, що графен пригнічує окислення, якщо його помістити під WS_2 , екрануючи поверхневі електричні поля навколо початкових дефектів. Інкапсуляція з hBN є ще однією життєздатною стратегією пригнічення деградації.

У моношаровій формі ці матеріали є напівпровідниками з прямою забороненою зоною (у координації 2H, показаній на рисунку 1.2; координація 1T призводить до металевої поведінки, але зазвичай є менш стабільною) із зазорами, що варіюються від видимого до ближнього інфрачервоного, зменшуючись зі збільшенням атомної маси халькогену. Ця пряма заборонена зона розвивається з непрямої щілини об'єму внаслідок поєднання квантового обмеження та втрати міжшарового зв'язку, підвищення енергії точки T_c і зниження енергії точки Γ_v , доки щілина не зміститься від $\Gamma_v \rightarrow T_v$ перехід маси, до проміжного $\Gamma_v \rightarrow K_c$ для 2-4 шарів і, нарешті, до $K_v \rightarrow K_c$ в моношарі (рис. 1.3).

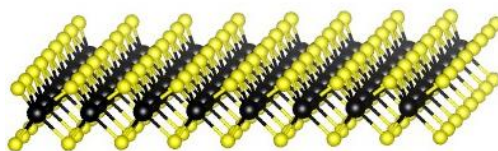


Рисунок 1.2: Загальна будова дихалькогенідів 2H-перехідних металів.

Спектри комбінаційного розсіювання ДПМ мають два характерних піки, які також вказують на кількість присутніх шарів, E_{2g}^1 і A_{1g} . Співвідношення інтенсивності E_{2g}^1/A_{1g} становить >3 у моношарі, зменшується до ~ 2 у подвійному шарі та далі зменшується у більш товстих пластівцях. Завдяки використанню довжини хвилі збудження 532 нм тут також існує вторинна акустична мода ($2LA(M)$) з центром приблизно в тому ж зсуві, що й E_{2g}^1 - окремі внески можуть бути виявлені за допомогою підгонки Лоренца.

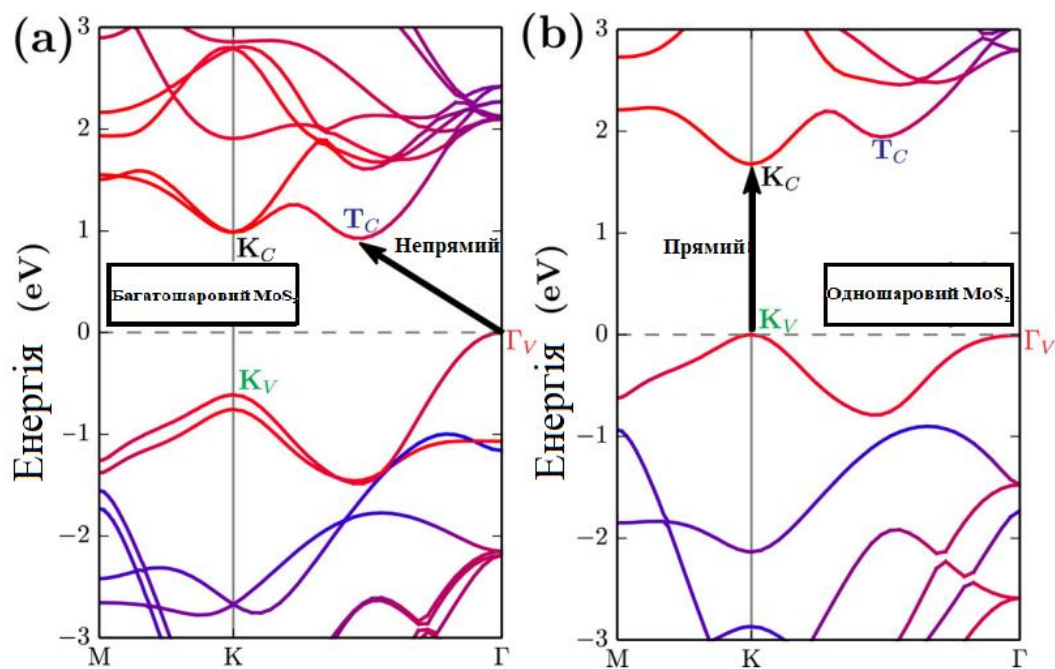


Рисунок 1.3: Смугова структура в (а) об'ємному (багатошаровому) та (б) одношаровому MoS_2 . Подібна еволюція смугової структури відбувається в WS_2 ..[43]

Завдяки прямій забороненій зоні моношарові ДПМ демонструють сильну фотолюмінесценцію (PL). Спектр кімнатної температури складається переважно з двох переходів, екситон (A) і трион (A^-/A^+). Трион — це заряджена квазічастинка, що складається з екситона, зв'язаного з електроном або діркою, населеність якого визначається рівнем допування в матеріалі, причому негативні триони домінують у матеріалі n -типу, а позитивні триони — у p -типі. Завдяки сильному просторовому обмеженню та зниженому екрануванню параметр взаємодії в ДПМ

є високим, що означає, що екситони сильно зв'язані, що дозволяє трионам залишатися значущими при кімнатній температурі. Щільність трионів можна регулювати шляхом регулювання легування, наприклад, шляхом застосування зовнішнього електричного поля, до рівнів, що перевищують щільність нейтральних екситонів i , отже, домінують у спектрі випромінювання. Інший екситонний перехід (B), що відповідає більш високому енергетичному переходу на нижчий рівень у спін-орбітальній розщепленій валентній смузі, як правило, не спостерігається в спектрах ФЛ, оскільки висока щільність станів означає, що більшість носіїв можуть бути розміщені в більш високій енергії. рівень.

Внаслідок переходу до непрямой забороненої зони інтенсивність ФЛ різко зменшується зі збільшенням кількості шарів i є незначною в об'ємних ДПМ. Це дозволяє легко ідентифікувати будь-які моношари, присутні у зразку. Крім того, застосування деформації може використовуватися для модифікації цього, і було показано, що створює непрямий-прямий перехід i , як наслідок, гігантське посилення PL у багатьох ТМД, таких як двошаровий WSe_2 , і, навпаки, призводить до прямого прямого переходу в одношарових кристалах.

Хоча вона на кілька порядків нижча, ніж у графену, рухливість носіїв у ДПМ все ще прийнятна та порівнянна з рухливістю кремнію при $\sim 10^3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Це значення дуже чутливе до розладу підкладки та буде різко зменшено через наявність шорсткості поверхні, захоплених зарядів, хімічних зв'язків тощо, тому вибір підкладки є ключовим для забезпечення високоякісних пристроїв. Гексагональний нітрид бору є багатообіцяючим матеріалом для цього застосування, оскільки він може забезпечити хорошу площинність поверхні та високе діелектричне екранування підкладки, що лежить під ним, тим самим діючи для збільшення рухливості носія.

Внаслідок переходу до непрямой забороненої зони інтенсивність ФЛ різко зменшується зі збільшенням кількості шарів i є незначною в об'ємних ПДМ. Це дозволяє легко ідентифікувати будь-які моношари, присутні у зразку. Крім того, застосування деформації може використовуватися для модифікації цього, і було показано, що створює непрямий-прямий перехід i , як наслідок, гігантське

посилення PL у багатьох ПДМ, таких як двошаровий WSe_2 , і, навпаки, призводить до прямого непрямого переходу в одношарових кристалах.

Хоча вона на кілька порядків нижча, ніж у графену, рухливість носіїв у ДПМ все ще прийнятна та порівнянна з рухливістю кремнію при $\sim 10^3 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. Це значення дуже чутливе до розладу підкладки та буде різко зменшено через наявність шорсткості поверхні, захоплених зарядів, хімічних зв'язків тощо, тому вибір підкладки є ключовим для забезпечення високоякісних пристроїв. Гексагональний нітрид бору є багатообіцяючим матеріалом для цього застосування, оскільки він може забезпечити хорошу площинність поверхні та високе діелектричне екранування підкладки, що лежить під ним, тим самим діючи для збільшення рухливості носія.

Подібно до графену, синтез вільних моношарових ДПМ спочатку був досягнутий шляхом механічного відлущування, процесу, який дає високоякісні пластівці, але сильно обмежений у масштабі кристалів, які він може утворити. Приготування рідкофазних розчинів стало можливим з 1980-х років, найбільш ефективно шляхом інтеркаляції іонів літію між шарами в об'ємних кристалах ДПМ з подальшим впливом води, щоб літій реагував і виробляв газоподібний водень, який розштовхував шари. Недоліком цього методу є зміна фази на 1Т, зміна поведінки на металеву та потреба відпалу для відновлення структури 2Н. РФВ також можливий без інтеркаляції - наприклад, за допомогою ультразвуку - але вихід одношарових пластівців є порівняно низьким. Потім суспензії можна переробляти на плівки, але їх корисність знижується через низьку якість. У зв'язку з потребою у високоякісних плівках і підбадьорюваними успіхами в синтезі графену, була проведена велика кількість досліджень щодо вирощування ДПМ за допомогою ХОПФ. ХОПФ цих матеріалів ускладнюється тим фактом, що вони складаються з двох елементів і що ці елементи зазвичай не мають відповідних газоподібних прекурсорів, оскільки ті, що існують, зазвичай дуже небезпечні та потребують складного поводження. Труднощі ще більше ускладнюються тим фактом, що на відміну від обмеженого поверхневого росту графену на міді, де сприяють утворенню моношарів, ДПМ мають схильність до

утворення багатьох шарів, наночастинок або дрітків. Незважаючи на це, були успішно продемонстровані методи, що включають випаровування попередника, що містить перехідний метал, і халькогену перед підкладкою (рис. 1.4), або піддавання підкладки, вкритої металом або попередником, що містить, халькогену, випареного вище.

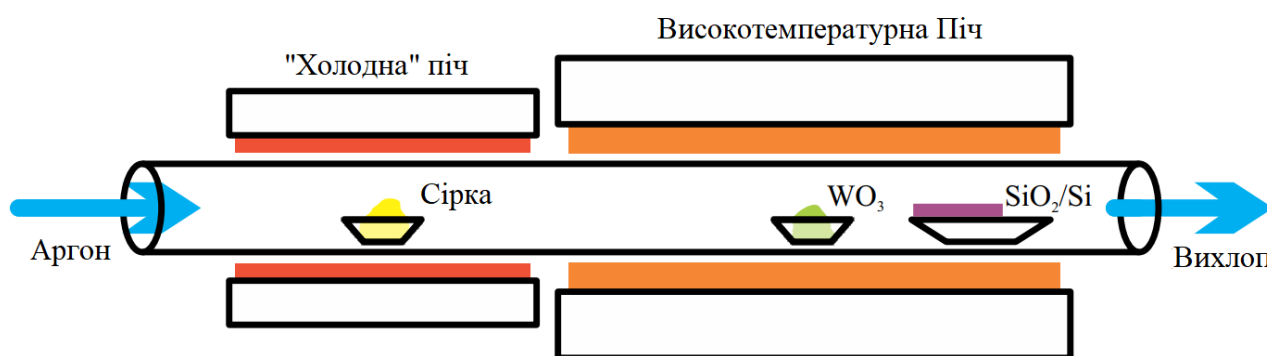


Рисунок 1.4: Схема налаштування ХОПФ для WS_2 . Інші ДПМ можна вирощувати цим методом з використанням відповідних прекурсорів.[44, 45]

Більшість ДПМ ХОПФ було виконано з використанням підкладок SiO_2/Si , хоча також були продемонстровані інші ізоляційні підкладки, такі як сапфір, плавлений кремнезем і гексагональний нітрид бору, а також золота фольга. Процес все ще знаходиться в зародковому стані, і до недавнього часу зростання просторово однорідних одношарових плівок вислизало від дослідників. Далі буде опис поточних методів синтезу з використанням кремнієвих підкладок.

У 2012 році для синтезу MoS_2 вперше було продемонстровано двозонний транспорт пари, у якому обидва прекурсори випаровуються окремо та проходять над підкладкою.

У цьому процесі попередник, що містить метал (зазвичай оксид), випаровується в інертному газовому щиті та осідає на поверхні підкладки при високій температурі, яка потім піддається впливу атомів халькогену та реагує з утворенням кристалів ДПМ.

Хоча цей процес спочатку виконувався з використанням однієї печі, було виявлено, що кращого контролю за процесом можна досягти, використовуючи дві

печі - одну для халькогену та одну для металевого прекурсора та підкладки. За допомогою цієї техніки було продемонстровано великі трикутні домени розміром до кількох сотень мікрон, хоча покриття загалом є неоднорідним, з високою щільністю в центрі підкладки та рідкісним покриттям по краях. Нуклеацію можна зародити, зазвичай використовуючи похідні графену, такі як відновлений оксид графену (ВОГ), але це призведе до погіршення електронних властивостей через домішки в кінцевій плівці та більш дрібну зернисту структуру, тому не є перевагою.

Альтернативний метод передбачає покриття підкладки металевим попередником і його обробку сіркою/селеном/теллуром при високій температурі під захистом від інертного газу. Цей процес подібний до двозонного методу транспортування парів, але має потенціал для більш надійного забезпечення повного покриття, якщо можна досягти однорідного розподілу прекурсора металу. Що стосується двозонного переносу пари, то це було вперше продемонстровано в 2012 році для синтезу MoS_2 з використанням електронно-променевого випаровування металу Mo або розчину $(\text{NH}_4)_2\text{MoS}_4$ з подальшим сульфуванням за високої температури.

Моношарові області спостерігалися для підкладки з металевим покриттям, але загалом утворювався більш товстий матеріал, що робило цей процес непридатним для великомасштабного виробництва моношару.

Експерименти показали, що можна вирощувати суцільні одношарові плівки. Було показано, що золота фольга є придатним каталізатором для росту моношару за допомогою процесу, опосередкованого поверхнею, і плівки були вирощені з розміром зерен до 420 мкм, використовуючи метавольфрамат амонію та H_2S . Інший метод використовував гексакарбоніл молібдену або вольфраму (обидва високотоксичні газоподібні попередники) і $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{S}$ за низького тиску для вирощування 4-дюймових плівок на підкладках з плавленого кремнезему шляхом контролю надходження попередника таким чином, щоб прикріплення країв було кращим, але розмір зерен був обмежений мікронного масштабу з максимальним розміром ~ 15 мкм.

1.3 Гексагональний нітрид бору

1.3.1 Властивості

Гексагональний нітрид бору (hBN) — матеріал, структурно схожий на графен, у якому атоми вуглецю по черзі замінені атомами бору та азоту, як показано на рис. 1.5. Незважаючи на те, що механічні властивості hBN не такі вражаючі, як у графену, вони все ще дуже хороші, з виміряною міцністю на розрив $15,7 \text{ Нм}^{-1}$ і порівнянною жорсткістю до 880 ГПа. Параметр решітки hBN майже відповідає графену, відрізняючись приблизно на 2 %. Наразі деформація руйнування відставала від теоретичного значення 24 % із вимірними значеннями 3-4 %, але це може бути проблемою якості матеріалу, оскільки було показано, що інші, такі як графен і MoS_2 , добре узгоджуються між вимірюванням і теорією. Незважаючи на структурну подібність, за своїми електронними властивостями hBN сильно відрізняється від графену: це ізолятор із широкою забороненою зоною 6 еВ і високим електричним опором. Діелектрична проникність зменшується в міру розрідження до моношару, але залишається високою і становить 2,31, 2,43 і 2,49 для одно-, дво- і тришарових плівок відповідно.

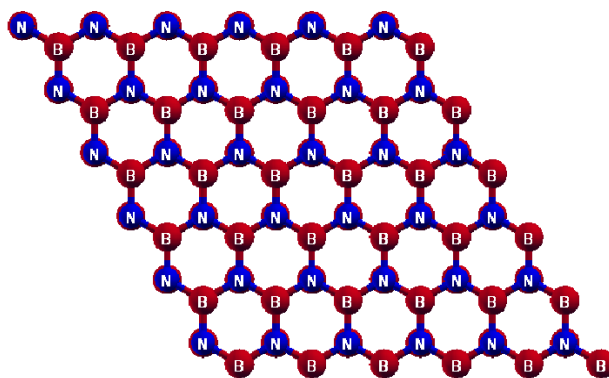


Рисунок 1.5: Будова гексагонального нітриду бору

Це призвело до інтересу до його використання як додаткового матеріалу для металевих ізоляторів та інших пристроїв у поєднанні з іншими двовимірними матеріалами. hBN має нижче оптичне поглинання, ніж графен, із широкосмуговим видимим поглинанням $<1 \%$ і сильнішим поглинанням, починаючи з 202 нм, через збудження носіїв через заборонену зону. Раманівський

сигнал hBN показує один характерний пік, аналогічний піку G у графені при $\sim 1366 \text{ см}^{-1}$ для масового матеріалу, який зміщується до $\sim 1368 \text{ см}^{-1}$ у двошарі та $\sim 1370 \text{ см}^{-1}$ у моношарі.

Синтез моношарового hBN вперше був досягнутий шляхом механічного відлущування. Також можна проводити рідкофазний пілінг. Було продемонстровано, що ХОПФ є ефективною технікою для виробництва тонких плівок hBN, використовуючи процес, дуже схожий на графен. Каталітичні підкладки, такі як мідь, нікель і платина, успішно використовувалися для отримання плівок з повним покриттям підкладки, але контроль над цим процесом менш вивчений, і одержувані плівки, як правило, являють собою дрібнозернисту структуру з одно- або малошарового матеріалу. Нещодавні розробки з використанням електрополірованих мідних підкладок мали певний успіх у повторенні досягнень ХОПФ графену, з безперервними моношаровими плівками, синтезованими з розміром зерен до $\sim 35 \text{ мкм}$. Було використано ряд різних прекурсорів, як правило, твердих речовин, таких як полімерний аміноборан або аміачно-боран, які термічно розкладаються для вивільнення боразину, або навіть рідин, таких як сам боразин. У попередніх роботах часто використовувався високий вакуум, але останні роботи зосереджені на синтезі тиску навколишнього середовища. У всіх випадках процес загалом передбачає розкладання прекурсора шляхом нагрівання в захисному екрані інертного газу, що тече, у присутності водню, який потім проходить над підкладкою, щоб утворилася плівка. Схема типової установки ХОПФ показана на рис. 1.6.

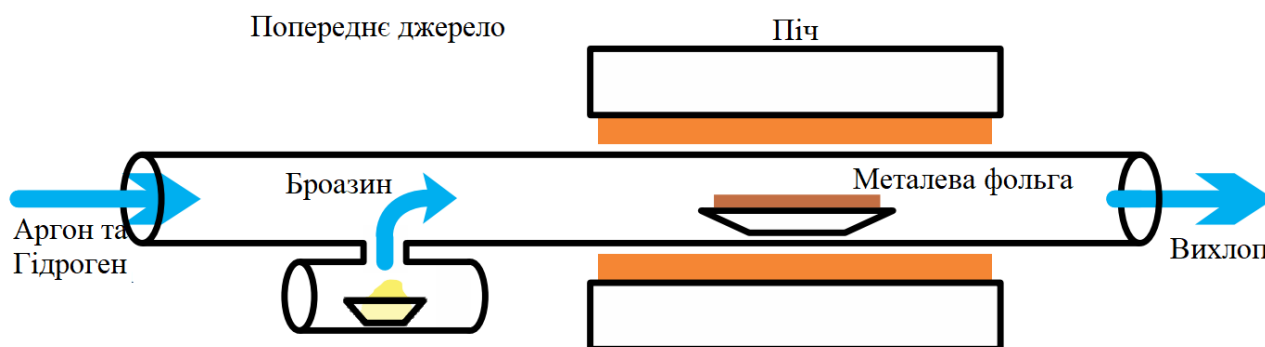


Рисунок 1.6: Схема установки ХОПФ за hBN.[41, 42]

1.4 Тертя в 2D матеріалах

Тертя в графені та інших 2D-матеріалах є складним і є предметом постійних досліджень, як шляхом моделювання, так і експериментально з використанням таких методів, як атомно-силова мікроскопія (АСМ), раманівська та фотолюмінесцентна (PL) спектроскопія. Лі та ін. використовували моделювання молекулярної динаміки для моделювання взаємодії кремнієвого наконечника з графеном із різною кількістю шарів, демонструючи збільшення тертя, коли кількість шарів зменшується через збільшення зморщування навколо наконечника зонда. Крім того, вони продемонстрували, що раніше незрозуміле тимчасове збільшення сили тертя протягом перших кількох атомних періодів є результатом утворення пасток, що поступово поглиблюються на межі розділу, де деформація поза площиною підвищує якість фрикційного контакту. Граничний стан матеріалу також важливий, коли пухкий і зморшковатий лист демонструє набагато більше тертя, ніж щільний і гладкий. Це матиме відношення до двовимірної електроніки з пристроями, що складаються зі стосів різних двовимірних матеріалів різної геометрії, і демонструє важливість деформацій поза площиною.

Через слабе Ван-дер-Ваальсове з'єднання поза площиною розумно очікувати повної передачі напруги від підкладки до двовимірних матеріалів. Лю та ін. використовували раманівське та PL-картування для вивчення розподілу деформації в межах трикутних доменів моношару MoS_2 на напружених підкладках з полідиметилсилоксану (ПДМС), виявивши, що при вищих деформаціях передається лише $\sim 10\%$ деформації, і що передана деформація поширюється через трикутник, починаючи з точки, розташованої найближче до осі деформації. Хоча неповне перенесення деформації раніше спостерігалось в 2D-матеріалах на м'яких підкладках під напругою, з добре задокументованим впливом полів деформації та неоднорідностей на 2D-матеріали є значні можливості для вдосконалення в описі механізму та його впливу на різні гетероструктури.

1.5 Пристрої

Незважаючи на те, що гетероструктурованим пристроям, що складаються з цих матеріалів, буде важко конкурувати з добре відомими напівпровідниками, такими як кремній, у встановлених високопродуктивних застосуваннях, наразі створено багато нових конструкцій пристроїв з цікавими, а часом і унікальними властивостями. Однією з областей, у яких вони є більш сприятливими, є гнучка та/або прозора електроніка з порівняльною стійкістю до деформацій і оптичною пропускну здатністю, а рухливість носіїв часто значно перевищує показники конкуруючих технологій, таких як провідні полімери.

Місцеве середовище може сильно впливати на властивості двовимірних матеріалів через їх високу питому поверхню; це зазвичай проявляється як зміни рівня легування або ширини забороненої зони, але також може призводити до змін робочої функції та напруги.

З цієї причини необхідно мати розуміння взаємодії між двовимірними матеріалами в гетероструктурах. Сфера гнучкої електроніки забезпечує додаткове ускладнення у вигляді деформації, яка знову може спричинити зміни забороненої зони та змінити взаємодію між різними матеріалами.

Останніми роками спостерігався значний інтерес до використання двовимірних матеріалів у гнучкій електроніці. Було проведено дуже багато демонстрацій пристроїв, що складаються з графену, а також гетероструктурних пристроїв, що використовують широкий спектр різних 2D матеріалів; однак на сьогоднішній день реалізація виготовлення на чіпі з використанням масштабованих процесів, як правило, залишалася поза межами більшості робіт, які зосереджувалися на невеликих доказах концепції. Також було проведено широке дослідження осадження рідкофазного відшарованого матеріалу у формі струменевих або інших друкованих пристроїв, але обмежені дослідження пристроїв, що складаються з високоякісних матеріалів великої площі, які можна отримати за допомогою ХОПФ. Таким чином, необхідні додаткові дослідження

методів виготовлення пристроїв з використанням масштабованих методів і характеристики їхніх властивостей, особливо під час застосування деформації.

Існують значні обмеження щодо можливих технологій виготовлення та обробки при використанні полімерних підкладок. Пов'язано це з їх типовою нижчою термічною та хімічною стабільністю та, на відміну від кремнієвих (SiO_2/Si) пластин конкретно, їх відсутністю провідності та внутрішнього зворотного затвора. З цієї причини необхідно модифікувати звичайні методи для справді масштабованого виробництва, тобто повного виготовлення чіпа без електронно-променевої літографії. Вражаючи властивості матеріалів, описаних вище, можуть бути реалізовані в реальному застосуванні лише шляхом поєднання їх разом у пристрої.

1.6 Переваги 2D матеріалів

Є ряд факторів, які роблять 2D-матеріали привабливими кандидатами на гнучку електроніку. Перш за все, є явні переваги в електронних властивостях, особливо в мобільності носія. Це параметр, який серйозно перешкоджає впровадженню високопродуктивних пристроїв, оскільки він значно відставав від характеристик традиційних твердих матеріалів. Особливо у випадку графену, але також – і більш доречно для продуктивності багатьох пристроїв – у ДПМ можливі рухливість, яка на кілька порядків перевищує конкуруючі органічні, металооксидні та інші технології. Цей параметр важливий, оскільки він впливає на продуктивність пристрою декількома способами, а саме: максимальну щільність струму, енергоефективність, максимальну швидкість перемикання та відключення.

З точки зору форм-фактора, атомний масштаб усіх 2D-матеріалів означає, що вони матимуть менший внесок у профіль і вагу пристрою, ніж будь-які альтернативи. Ще одна перевага надзвичайної тонкості полягає в тому, що вона забезпечує високоефективний електростатичний контроль завдяки більш ефективному проникненню електричних полів. Це має додаткові наслідки для

зменшення масштабу пристрою, оскільки, наприклад, у транзисторах довжина каналу повинна бути в 3 рази більше його товщини, що робить тонший канал бажаним з точки зору масштабування. Гнучкість також буде кращою в пристроях, виготовлених із 2D-матеріалів, оскільки деформація вихідного матеріалу перевершує усіх інших конкурентів принаймні в 2 рази, а порівнювані пристрої, виготовлені з цих матеріалів, майже відповідають цьому вдосконаленню. Надзвичайно низьке оптичне поглинання цих матеріалів (зазвичай $<5\%$) забезпечує пристрої з неперевершеною прозорістю.

Відносно слабка Ван-дер-Ваальсова взаємодія між шарами означає, що гетероструктурні пристрої можна виготовляти без значних міжфазних деформацій шляхом простого укладання різних матеріалів, на відміну від складних методів, необхідних для інших матеріалів.

Це значно зменшує складність виготовлення гетероструктурних пристроїв, розширює кількість можливих з'єднань порівняно з іншими кристалічними матеріалами, де методи осадження вимагають точної відповідності параметрів решітки, і повністю усуває проблему міжфазного змішування, яка зазвичай спостерігається в органіці. Крім того, легкість деформацій поза площиною дозволяє довільно складеним шарам отримати високий ступінь конформації з базовими характеристиками.

1.7 Проблеми та виклики

Незважаючи на численні переваги, зазначені вище, існує ряд проблем, які необхідно подолати, перш ніж стане можливим широке впровадження. Хоча це не обмежується 2D-матеріалами, розсіювання тепла є проблемою для тонкоплівкової гнучкої електроніки через низьку теплопровідність і нижчі максимальні робочі температури матеріалів полімерної підкладки, і це найбільш виражено в 2D-пристроях через високу необхідну щільність струму. Дослідження графену показують, що нагрівання Джоуля може призвести до пікових температур, що

перевищують 300 °С, що є достатньо високим показником, щоб пошкодити більшість матеріалів підкладки.

Типові стратегії управління теплом у звичайній електроніці передбачають використання металевого радіатора з великою площею поверхні для ефективної передачі тепла повітрю, але це явно не підходить для гнучкої електроніки, і існує мало досліджень щодо стратегій керування теплом у цій галузі. Проблемою, пов'язаною з проблемою управління температурою, є виготовлення пристрою. Багато процесів виготовлення включають етапи відпалу для очищення поверхневих адсорбатів і перенесення залишків скелету або підвищення конформації складених шарів для покращення якості пристрою, використовуючи температури, які знову ж таки перевищують робочі температури більшості полімерних підкладок. Зменшення мобільності носія та загальна нижча якість гнучких пристроїв порівняно з їх аналогами з жорсткою підкладкою можна частково пояснити цим обмеженням.

1.8 Конструкції пристроїв

1.8.1 Транзистори

Незабаром після відкриття графену багато хто сподівався, що його можна буде використовувати в транзисторах, оскільки його висока мобільність носіїв дозволить створювати дуже швидкі пристрої. Однак прогресу заважає відсутність внутрішньої забороненої зони та складні методи, необхідні для створення такої корисної величини, як-от фізичне обмеження нанострічок або застосування деформації, що означає, що такі транзистори фактично неможливо вимкнути. ДПМ є набагато більш придатними, оскільки їх великі ширини забороненої смуги означають, що можливий низький струм вимкнення, що збільшує коефіцієнт увімкнення/вимкнення.

Ще одна перевага полягає в тому, що рухливість, як правило, досить однакова як для електронів, так і для дірок, що має наслідки для спрощення комбінованих пристроїв n- і p-типу, дозволяючи симетричний дизайн пристроїв.

Переважна більшість транзисторів ДПМ була продемонстрована з використанням MoS_2 , але серед інших також використовувалися інші дихалькогеніди Mo і W .

Гнучкі тонкоплівкові польові транзистори (ПТ) були вперше продемонстровані у 2012 році з використанням багатошарового MoS_2 та іонно-гелевих діелектриків. У цій роботі, заснованій на успіхах із відшарованим матеріалом із використанням жорстких підкладок та іонних рідких діелектриків, тришарові плівки MoS_2 були вирощені за допомогою ХОПФ та перенесені на підкладки PI, із зв'язаними нікелем золотими електродами та іонним гелевим затвором, нанесеним на вершину для отримання подвійного електричного шару. - шаровий транзистор (ЕДТ). Після корекції ємності між іонним гелем і електродами виток та сток продуктивність цього пристрою порівняли з ідентичним пристроєм, виготовленим на підкладці SiO_2/Si . Структура діапазону для цього пристрою показана на рис 1.7. За відсутності зміщення затвора потік струму блокується бар'єрами Шотткі. Позитивне зміщення затвора зменшить ширину області виснаження та підвищить рівень Фермі, що призведе до утворення омичних контактів і збільшення потоку струму. Хоча продуктивність пристрою на SiO_2 була кращою, ніж на PI ($\mu = 12,5 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$ проти $\mu = 3,01 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$, співвідношення ввімк./вимк. ~ 105 проти ~ 103), продуктивність гнучкого пристрою була обнадійливою.

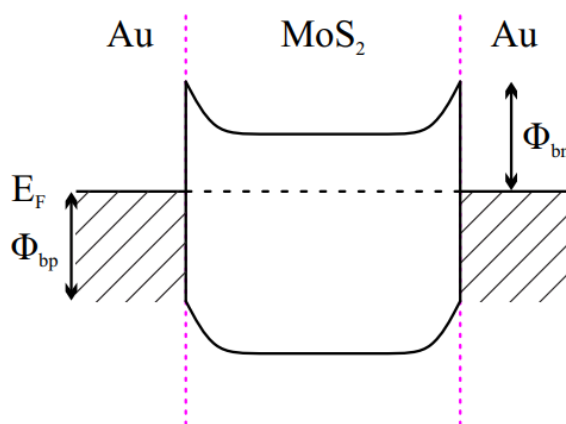


Рисунок 1.7 Структура діапазону для пристрою.[46]

Відмінності пояснювали взаємодією з полімерним субстратом, що знижувало якість MoS_2 . Не спостерігалось явної електричної деградації, коли пристрій PI було зігнуто до радіуса кривизни 0,75 мм у напрямку каналу.

У цій галузі було досягнуто ряд досягнень, зокрема графенові контакти витоків та стоків, а також графенові затворні електроди з діелектричним шаром hBN, продемонстровані незалежно, а нещодавно разом. Використовувалися різні субстрати, але зазвичай використовуються PET або ПЕФ через їхню високу хімічну та термічну стабільність. Використовуючи відшарований подвійний шар WSe_2 , завдяки чому виготовили пристрій із усіх 2D-матеріалів, який був приблизно на 88% прозорим з рухливістю до $45 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ і коефіцієнтом увімкнення/вимкнення 107. Характеристики пристрою не змінювалися деформаціями до 2%. Ці властивості можна порівняти з еквівалентними пристроями, виготовленими на підкладках SiO_2/Si .

Інша конструкція пристрою використовує надтонку природу цих матеріалів для створення перемикачів в гетероструктурі шляхом налаштування рівня Фермі на гетероінтерфейсі для модуляції ймовірності тунелювання через вузький бар'єр, уможливаючи співвідношення ввімкнення/вимкнення до 10^6 . Спочатку виготовлено на SiO_2/Si підкладці, яка використовувалася як електрод заднього затвора, цей тунельний польовий транзистор (ТПТ) складається з двох графенових електродів, розділених ізоляційним шаром з hBN або ДПМ (рис. 1.8).

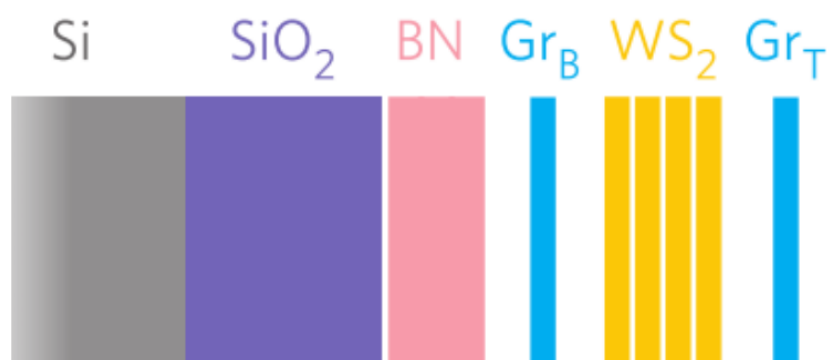


Рисунок 1.8: структура ТПТ.[47]

Він використовує низьку щільність станів (ЩС) у графені, щоб забезпечити значне збільшення енергії Фермі (E_F) в обох електродах для заданої напруги на

затворі, зменшуючи ефективну висоту тунельного бар'єру та збільшуючи тунельну ЩС. Це різко збільшує потік струму, одночасно збільшуючи як ймовірність тунелювання, так і кількість термоелектронного випромінювання через бар'єр. З того часу ТПТ були продемонстровані на підкладках з ПЕТ Джорджіу та ін., використовуючи WS_2 як тунельний бар'єр, для створення пристроїв, які були нечутливими до вигину до 5% перевіреної деформації та демонстрували дуже подібну поведінку до еквівалентних пристроїв, виготовлених на кремнії. Одним із недоліків було використання ПЕТ-підкладки як діелектрика затвора, що обмежувало електричне поле через велику відстань між затвором і з'єднанням, що призводило до порівняно поганого співвідношення включення/вимкнення. Використання більш товстого шару hBN як діелектрика затвора, як це використовується в інших 2D транзисторах, може забезпечити більш ефективну модуляцію тунельного струму. Інші, не двовимірні матеріали не підходять для цієї архітектури пристрою, оскільки вони не мають необхідних розмірів, щоб забезпечити таке ефективне проникнення електричного поля, або мають занадто високий ЩС, щоб забезпечити адекватне збільшення EF .

Виготовлення р-n переходів залишається проблемою для 2D матеріалів. Цьому сприяє ряд факторів. У ДПМ є кілька матеріалів, властивих р-типу, і існує дуже мало стратегій легування. Легування з перенесенням заряду досягло певних успіхів, процес, у якому донор або акцептор електронів наноситься на поверхню для отримання легування n- або р-типу відповідно, але ця методика страждає від відсутності довгострокової стабільності та збільшення оптичного поглинання. Звичайні напівпровідники зазвичай легують за допомогою іонної імплантації для отримання замісного легування, але, незважаючи на неминучі пошкодження, пов'язані з цією технікою, замісне легування в ДПМ може спричинити неприйнятне погіршення рухливості носіїв, а також зміни зонної структури.

Однією зі стратегій створення р-n-переходів, яка користується певним успіхом, є створення вертикального гетеропереходу з ДПМ n-типу та недовимірного напівпровідника р-типу. Якщо виготовити такий пристрій з використанням MoS_2 і плівки з одностінних карбонових нанотрубок (ОКН), який

продемонстрував сильну випрямляючу поведінку (співвідношення прямого і зворотного струмів 104) з використанням кремнієвої підкладки, але цю конструкцію можна було б однаково виготовити на гнучких підкладках, враховуючи стійкість плівок КН для деформації. Інший метод передбачає застосування електричного поля для електростатичного налаштування рівня легування в моношарі ДПМ, використовуючи архітектуру розділеного затвора для створення областей n and p -типу, які можна індивідуально налаштувати для зміни поведінки пристрою. Основним недоліком цього рішення є необхідність постійного застосування зміщення затвора, що різко знижує загальну енергоефективність.

Для порівняння, легування графену для отримання матеріалу n - або p -типу є простим. Пов'язану структуру можна створити, помістивши ДПМ n -типу поверх частини графенової стрічки, що призведе до зменшення допування p -типу та, отже, до утворення p - p^+ -переходу, хоча цьому пристрою, на жаль, не вистачає випрямляючих характеристик. Інші методи забезпечують достатнє легування для створення справжніх p - n -переходів у графені, використовуючи хімічне легування, електростатичне або оптичне стробування за допомогою фоточутливих молекул барвника.

1.9 Датчики та детектори на моношарах

Робота фотодетекторів залежить від збудження носіїв падаючим світлом, що викликає збільшення потоку струму. Двома основними конструкціями пристроїв, які використовують цей принцип, є фототранзистори та фотодіоди, причому більшість досліджених 2D пристроїв є фототранзисторами. Завдяки своїм прямим забороненим зонам у видимому та ближньому інфрачервоному діапазонах ДПМ добре підходять для цієї програми, з низьким темновим струмом, що забезпечується бар'єрами Шотткі, і фотогенерованими екситонами, розділеними вбудованим або прикладеним електричним полем для створення сигналу. [16-19]

Геометрії метал-напівпровідник-метал (НМ) були широко вивчені, з ранніми дослідженнями, які повідомляли, що фотовідповідь була домінує фототермоелектричний ефект, в якому температурний градієнт, що є результатом поглинання фотонів, створює напругу на переході метал-напівпровідник через різні Зеебека. коефіцієнти. Проте подальші дослідження дійшли висновку, що хоча цей механізм сприяє вимірній реакції, домінуючим механізмом все ще є поділ екситонів, спричинений електричним полем, і зниження бар'єру Шотткі шляхом заповнення станів пасток на межі розділу фотогенерованими носіями. Такі пристрої зазвичай демонструють внутрішнє посилення фотоструму, що призводить до гарної чутливості, яка може перевищувати 10^3 A W^{-1} , але, на жаль, час відгуку (визначається швидкістю, з якою носії можуть бути розділені та зібрані електродами витоку та стоку) зазвичай поганий порівняно з фотодіодами. Гібридні пристрої, які складаються з графену на MoS_2 , показали ще більшу чутливість ($R > 10^7 \text{ A W}^{-1}$), коли фотозбуджені електрони вводяться в графен з MoS_2 , тоді як дірки блокуються та створюють позитивну напругу затвора. Поєднання цих ефектів призводить до дуже сильного збільшення провідності.

Багато з попередніх демонстрацій пристроїв НМ, які були вивчені, були побудовані з використанням підкладок SiO_2/Si та металевих контактів, але оскільки графен утворює з'єднання Шотткі з ДПП, є можливості для виробництва гнучких прозорих пристроїв з використанням тих самих принципів. Якщо порівняти властивості моношару GaS , що контактує з Au (спорідненого 2D-напівпровідника) на підкладках SiO_2/Si та PET, і виявили, що PET збільшив чутливість у 4 рази (до $\sim 20 \text{ A W}^{-1}$), тоді як час відгуку залишився подібним на рівні $\leq 30 \text{ ms}$ (обмежено роздільною здатністю експериментальної установки). Було виявлено, що ці значення зменшуються, коли плівки згинаються, хоча це пояснюється відповідним зниженням ефективного опромінення пристрою. Нещодавно були продемонстровані пристрої, що використовують графенові електроди, такі як графен - WS_2 - графен, графен - SnS_2 - графен і графен - WS_2/MoS_2 - графен. Останній пристрій продемонстрував значне підвищення на 1-

2 порядки величини у чутливості порівняно з еквівалентними пристроями з ізольованими моно- або двошаровими або MoS_2 або WS_2 , до 1173 A W^{-1} .

Введення більших полів для сприяння розділенню екситонів може значно зменшити час відгуку та підвищити фотовідгук. Якщо розглянути лавинний фотодетектор НМ на основі моношару InSe (іншого спорідненого двовимірного напівпровідника), використовуючи алюмінієві електроди для створення переходів Шотткі та застосовуючи велике електричне поле для створення ефекту лавини. Високий потенціал прискорює фотогенеровані носії до енергій, достатньо високих, щоб викликати ударну іонізацію, генеруючи додаткові екситони та, як наслідок, сильне посилення сигналу. Час відгуку цього пристрою становив 60 мкс. Якщо ж використати вертикальну гетероструктуру графену/багатошарового MoS_2 /графен, де вузьке розділення двох електродів є значно меншим, ніж довжина виснаження, і тому зливає два бар'єри Шотткі разом.

Комбінована смугова структура нахилена вгору до контакту на кремнієвій підкладці, оскільки оксид кремнію збільшує висоту бар'єру Шотткі на цьому контакті, створюючи р-легування. Ця структура похилої смуги ефективно розділяє фотогенеровані носії для отримання часу відгуку ≤ 50 мкс (обмежується роздільною здатністю експериментальної установки). Наприклад, раніше описані ОКН - MoS_2 р-n переходи демонструють нижчу чутливість близько $0,1 \text{ A W}^{-1}$, але мають час відгуку до ≤ 15 мкс.

Як і у випадку з фотодіодами, складність створення р-n-переходів гальмувала розвиток світлодіодів. Показано, що вищезазначені електростатично леговані пристрої електролюмінесцюють під зміщенням, при цьому пристрої WSe_2 демонструють зовнішню квантову ефективність (ЗКЕ) до $\sim 0,1\%$. Це вигідно порівняно з попередніми повідомленнями про електролюмінесценцію в MoS_2 без електростатичного р-n-переходу, що виникає внаслідок ударної іонізації через бар'єр Шотткі (ЗКЕ = $0,001\%$), але все ще значно відстає від інших гнучких технологій. Крім того, ці пристрої були продемонстровані лише на підкладках SiO_2/Si , і їх може бути важко відтворити на гнучких підкладках через вимогу високої прикладеної напруги на затворі для індукції р-n-переходу.

Більш ефективний підхід був сприяний нещодавнім досягненням у виготовленні гетероструктурних пристроїв, з першими повідомленнями про пристрої з ЗКЕ, що наближається до 10% від плівок ДПМ. Це вигідно порівняно з технологією органічних світлодіодів (ОС), де ЗКЕ зазвичай становить ~15 %, що є багатообіцяючим результатом, враховуючи швидкість розвитку цієї галузі, що зароджується, на відміну від порівняно добре розвиненої промисловості органічних напівпровідників. Гетероструктурні пристрої, продемонстровані Withers et al. у 2015 році з використанням як SiO_2 , так і PET підкладок, складається з моношарової плівки ДПМ, обмеженої з обох боків дво- або тришаровим hBN для створення квантової ями (КЯ), яка потім контактує з графеном та інкапсулюється в hBN. Люмінесценція пристрою виникає в результаті тунелювання електронів і дірок через шари hBN у КЯ, утворюючи екситони, які швидко рекомбінують, випромінюючи світло через пряму заборонену зону. Цей єдиний пристрій КЯ показав ЗКЕ ~1 %.

Покращення квантової ефективності було досягнуто шляхом накладення кількох додаткових шарів тієї самої структури hBN/ ДПМ один на одного для створення структури з кількома КЯ, що забезпечує максимальний ЗКЕ 8,4 %. Також були виготовлені численні квантові ями з використанням різних матеріалів ДПМ із комбінацією КЯ WSe_2 і MoS_2 , що призвело до збільшення ЗКЕ до ~5 %. У цьому пристрої світло виходить із шару WSe_2 , оскільки його вужча заборонена зона означає, що екситони, створені в MoS_2 , спочатку переходять до нього перед рекомбінацією. Важливо, що ті самі одиничні КЯ-пристрої були виготовлені на підкладках з PET і показали еквівалентні властивості люмінесценції, які не змінювалися до максимальної виміряної деформації в 1%.

Інкапсуляція hBN також уможливила формування теплового випромінювача світла з використанням графену, створюючи надшвидке джерело світла зі смугою пропускання до 10 ГГц, яке є стабільним до електронних температур 2000 К.

Фотоелектричні елементи покладаються на здатність ефективно відокремлювати фотогенеровані екситони, знову ж таки зазвичай вимагаючи створення р-п-переходу. Не дивлячись на труднощі, пов'язані з цим, ДПМ є

хорошими кандидатами в цьому застосуванні, оскільки обмеження Шоклі-Квейссера вимагає напівпровідника з високою рухливістю з прямою забороненою зоною приблизно 1,3 еВ. Було показано, що архітектура розділеного затвора, що використовується для створення р-n-переходів, має ефективність перетворення потужності до $\sim 0,5\%$, але вимоги до стробування роблять це непрактичним. Було показано більш ефективний пристрій із використанням багат шарового MoS_2 , контактованого в геометрії НМ з одним Au електродом і одним Pd електродом, які, якщо їх використовувати окремо для обох контактів, створюють транспорт n- і p-типу відповідно. Це пов'язано зі зниженням енергії Фермі на межі розділу Pd порівняно з межею Au, незважаючи на майже однакові роботи виходу. Отриманий пристрій демонструє асиметричний амбіполярний транспорт і поводить себе як діод, з похилою зонною структурою, обмеженою контактами Шотткі (Рис. 1.9), яка ефективно розділяє фотогенеровані екситони для створення значного фотоструму з ефективністю перетворення потужності до $\sim 2,5\%$.

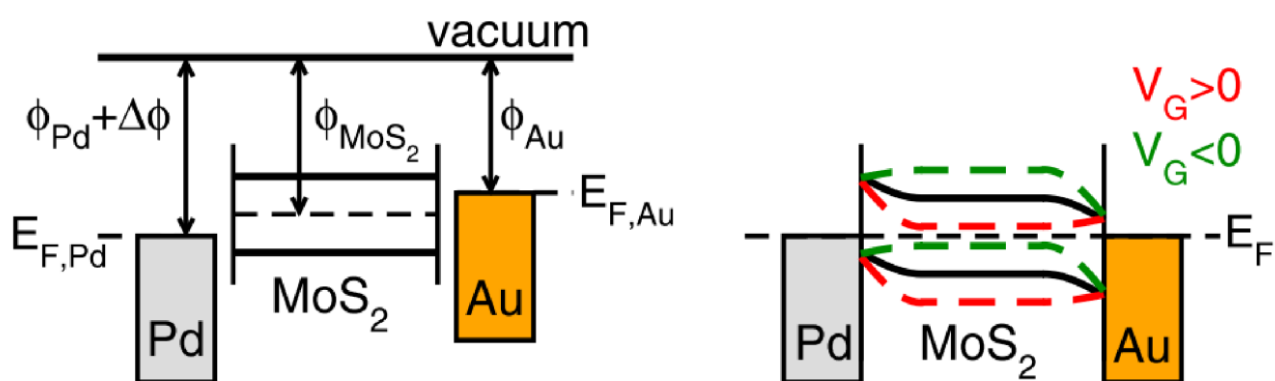


Рисунок 1.9: Утворення похилої смугової структури, що призводить до фотоелектричної поведінки [48]

Фотоелектричні пристрої на основі перовскіту викликали широкий інтерес як потенційні недорогі тонкоплівкові альтернативи кремнію. Осередки з одним з'єднанням стрімко розвиваються, за останнє десятиліття ефективність перетворення потужності (ЕПЕ) зросла з 3,8 % до $>22\%$. Було продемонстровано гнучкі пристрої, які зазвичай виготовляються з металевими тонкоплівковими катодами та прозорими анодами з оксиду індію та олова (ООІ).

Фотоелектричні пристрої на основі перовскіту викликали широкий інтерес як потенційні недорогі тонкоплівкові альтернативи кремнію. Осередки з одним з'єднанням стрімко розвиваються, за останнє десятиліття ефективність перетворення потужності (ЕПЕ) зросла з 3,8% до >22%. Гнучкі пристрої, які зазвичай виготовляються з металевими тонкоплівковими катодами та прозорими анодами з оксиду індію та олова (ООІ), були продемонстровані з ЕПЕ, як правило, у межах 10-17%. Недавня демонстрація повністю вуглецевого електродного пристрою з використанням КН катодів і графенових анодів Луо та ін. служить для того, щоб підкреслити переваги заміни звичайних на 1D і 2D матеріали, з ЕПЕ до ~12% і підвищену стабільність і стійкість до деформацій порівняно з пристроями на основі ООІ. Вертикальні гетероструктури знову були використані для значного підвищення ефективності пристрою. Брітнелл та ін. виготовив стек графен/ДПМ/графен, який мав вбудоване електричне поле, створене за допомогою використання заднього затвора або р-допування верхнього контакту за допомогою водяної пари. Важливо, що це поле ефективно розділяє екситони, що генеруються по всій товщині та по всій площі використовуваного кількешарового MoS_2 , що є покращенням порівняно з бічними пристроями, де генерація відбувається лише у відносно невеликих областях виснаження. Було виявлено, що на підкладках SiO_2/Si пристрої мають максимальний ЗКЕ, що перевищує 30% за низької потужності лазера та використання однієї частоти. Це значення зменшується зі збільшенням потужності лазера, що пояснюється екрануванням вбудованого електричного поля через збільшення концентрації носіїв у MoS_2 . У цій геометрії фотоелектричний ефект, здається, залежить від номера шару, спостереження фотоелектричного ефекту в таких пристроях з двошаровим WS_2 , але не в пристроях з моношаровим пояснюється довшим часом життя екситонів і їхньою меншою енергією зв'язку в двошаровому матеріалі.

Для підкладок з ПЕТ продуктивність скромніша, частково через гірше поглинання світла без покращення, яке забезпечує кремнієва підкладка, з квантовою ефективністю приблизно вдвічі до ~15%. Були показані покращені ЗКЕ (до 55%) для пристроїв, які використовують один графеновий і один

титановий контакти з прозорим електродом затвора ООІ, але цей пристрій не підходить для виробництва з гнучкою підкладкою.

Завдяки неперевершеній питомій площі поверхні адсорбція молекул може сильно модулювати електропровідність шляхом перенесення заряду. Використовуючи графен, було продемонстровано, що такі пристрої мають чутливість до часток на мільярд концентрацій, найбільш успішно використовуючи ВОГ, але також з дещо нижчою чутливістю, використовуючи пінографен, вирощений на підкладці з пінонікелю, і ХОПФ графен, вирощений на міді. Для повторного використання сенсорів необхідна повна десорбція адсорбованих частинок, що зазвичай досягається нагріванням сенсора до достатньо високої температури, щоб їх відключити.

ПЕС був використаний як субстрат через його високу термічну стабільність. Цей датчик мав прозорість $> 90\%$ і чутливість, порівнянну з іншими ХОПФ графеновими датчиками, яка була майже незмінною до максимальної вимірної деформації 1,4%. Чутливість була хорошою — $\sim 15\%$ для 1 частини на мільйон NO_2 , а вбудований нагрівач дозволив знизити час відновлення до ~ 11 секунд.

ДПМ також використовувалися як газові датчики, загалом знову використовуючи перенесення заряду від адсорбованих видів. Подібна чутливість спостерігалася, але було показано, що ДПМ покращує один із головних недоліків датчиків газу графену, оскільки вони мають вищу вибірковість без функціональності. Наприклад, було виявлено, що одношаровий MoS_2 чутливий лише до органічних частинок, які є донорами електронів, без сигналу для акцепторів електронів. Гуо та ін. продемонстрували гнучкий датчик вологості з використанням MoS_2 , отриманого з ХОПФ, у геометрії НМ, контактуючої з паладієм, на ПЕТ. Застосування деформації розтягу до цього пристрою шляхом згинання призводить до підвищення чутливості завдяки п'єзотронному ефекту – результату позитивних поляризаційних зарядів, що знижують висоту бар'єру Шотткі.

Інший механізм чутливості також можливий за допомогою ДПМ, що використовує зміни ефективності фотолюмінесценції або електролюмінесценції, коли акцептори електронів підвищують ефективність у матеріалі n-типу та

знижують ефективність у р-типі. Демонстрація цього ефекту була обмеженою, але перспективною через велику величину можливих змін і відповідну високу чутливість.

2 ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРУКТУР НА ОСНОВІ ГЕТЕРОПЕРЕХОДУ ОБ'ЄМНИЙ НАПІВПРОВІДНИК – МОНОШАР

2.1 Модель діодів на основі гетероструктури 2D/3D

При конструюванні приладів на основі гетероструктур вирішальне значення має взаємодія між плівкою на основі двовимірного шару та підкладкою. Подібно до Ван-дер-Ваальсівських 2D гетероструктур, слід враховувати дві ключові проблеми: ефект деформації, що викликаний невідповідністю решіток між обома матеріалами, що становлять гетероструктуру, та взаємне положення країв заборонених зон, що виникає в результаті утворення переходу, яке і визначає величину розривів відповідно валентної зони та зони провідності.

Використання 2D матеріалів з 3D GaN є прикладом 2D/3D – структури, що задовольняє всім загальним вимогам, що пред'являються до контактуючих гетеропар. Ці гетеропереходи активно вивчаються останні 3 роки як експериментально так і теоретично. У перших роботах було розглянуто гетеропереходи між GaN – MoS₂ та GaN – WSe₂. Було виростано нелегований GaN на 2D матеріалах і провели мікрокомбінаційну та рентгенівську фотоемісійну спектроскопію для встановлення положення заборонених зон у цих гетероструктурах. В роботі MoS₂ було вирощено на плівці GaN n-типу, яка початково була сформована на сапфірі. Використовуючи методи атомної силової мікроскопії з провідним зондом, було показано, що гетероструктура MoS₂/GaN електрично проводить у напрямку перпендикулярному до площини, що розділяє матеріали через ван-дер-Ваальсову щілину. В [26-30] було показано, що в такій структурі можна також реалізувати гетеродіоди з p-n- переходом p-MoS₂ – n-GaN, в яких спостерігався ефект випрямлення, характерний для звичайних діодів. Ряд даних відносно положення зон на сьогодні є дещо суперечливим, що ускладнює створення достовірної моделі гетеропереходу в MoS₂/GaN. Крім того, вплив порядку формування шарів може змінити електронні властивості інтерфейсу. Так у роботі зроблене припущення про можливу залежність величини розриву зон від

типу та рівня легування. Отриманий в ній результат вказує на формування контрваріантного гетеропереходу з величиною розриву зони провідності близько 0,51 еВ та суттєвим переносом електронів з GaN (р- типу) в MoS₂. Цей результат за порядком величини співпадає з даними, що отримано пізніше в роботах [24,25], де робиться аналогічний висновок в результаті дослідження структури, що мали канал n-типу, що також підтверджується теоретичними розрахунками з використанням методу гібридного функціонала електронної густини: в роботі [24] показано, що величина розриву зони провідності для гетеропереходу MoS₂ – 3D GaN залежить від кількості шарів GaN і монотонно зменшується при переході від моношару до об'ємного напівпровідника, складаючи в останньому величину 0,6 еВ.

Поперечний переріз планарної діодної структури, що досліджується показано на рис.2.1. Вона складається з провідного шару (активного шару), сформованого на високоомній (напівізоляційній) підкладці з двома омичними контактами. Шар 2D-напівпровідника розміщується поверх каналу та займає ділянку від катодного до анодного контакту, проте електрично не з'єднаний з n⁺ – областю катодного контакту.

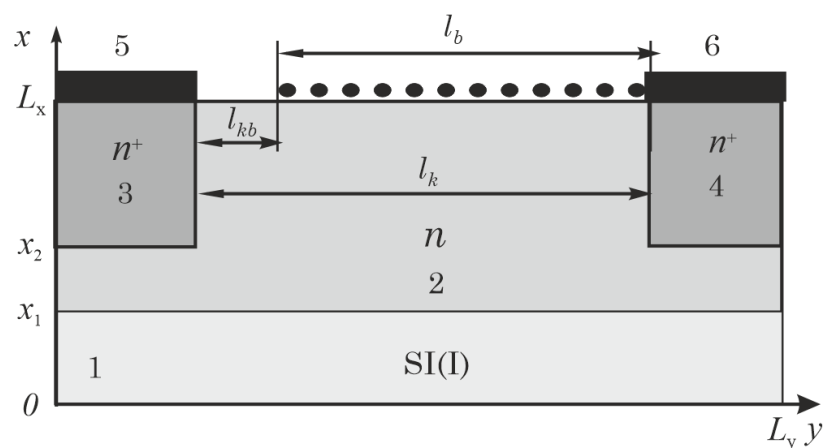


Рисунок 2.1 – Структура діода: напівізоляційна підкладка (1), канал (2), високолегована контактна область (n^+) (3), катод (4) та анод (5) - металеві контакти.

Для спрощення аналізу передбачається, що моношар контактує з металевим контактом лише в межах p^+ - області. Передбачається, що всі контакти метал-напівпровідник є омічними. Високолеговані ділянки контакту (p^+) мають розмір $0,16 \times 0,32$ мкм і концентрацію донорів $5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$. Таким чином, активна область діода має довжину 0,98 мкм. Концентрація в активному n - шарі базової діодної структури становила $(1-6) \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$.

Для аналізу процесів в GaN була розглянута трьохдолинна модель зони провідності з урахуванням нижньої - Γ і верхніх Γ_1 та M-L-долин. Закон дисперсії для нижньої долини та непараболічний закон дисперсії електронів $E_e(k)$. У розрахунках враховувалися всі суттєві механізми розсіяння електронів: акустичне, полярне оптичне, домішкове, п'єзоелектричне, міждолинне і еквівалентне міждолинне. Враховувалося також п'єзоелектричне розсіяння, яке в нітридах істотно впливає на їх кінетичні характеристики. Зона провідності MoS_2 описується параболическими нижньою K долиною, супутньою K' - долиною, яка розміщена на шляху між Γ і K долинами і лежить близько 200 меВ вище за край смуги провідності. Долини K, K' , які заселені MoS_2 n - типу що розташовані в кутах шестикутної зони Бріллюена і через свою ізотропну та параболическу природу, можуть бути в хорошому наближенні описані простими параболическими зонами з ефективною масою $m^* = 0.48m_e$. Двовимірний характер носіїв призводить до постійної щільності станів, заданих $\rho_0 = \frac{g_s g_v m^*}{2\pi \hbar^2}$, де $g_s = 2$ і $g_v = 2$ - це спин виродження K та K' - долини відповідно. Велика щільність станів, що впливає з великого значення ефективної маси смуги провідності в K, K' - долинах, призводить до невиврожденного розподілу носіїв.

Враховані всі основні механізми розсіяння, характерні для 2D – матеріалів. Враховано, що у двовимірних матеріалах відсутність періодичності у напрямку перпендикулярному шару, усуває розщеплення в фононних модах LO—TO, а отже впливом LO- моди на макроскопічну поляризацією в моношарі можна знехтувати. Параметри матеріалів, що використовуються у розрахунках наведено в додатку А та додатку Б.

Основним параметром, що являє найбільший інтерес з точки зору високочастотних застосувань, є величина часу захоплення носіїв заряду в 3D-частини діодної структури в 2D частину, оскільки такий перехід по суті еквівалентний міждолинному перенесенню електронів у k – просторі. На сьогодні домінуючим підходом є розгляд 2D-шару як квантової ями з необмеженою глибиною і, розглядаючи процеси в 2D-шарі, вважають, що огинаючі хвильові функції електронів у напрямку перпендикулярному 2D-шару є $\psi_{\perp} = A \sin(k_{\perp} x)$, де $k_{\perp} = n\pi/a$, a – ширина квантової ями. Носії можуть знаходитися всередині квантової ями як в захопленому енергетичному стані, пов'язаній з шаром 2D - напівпровідника, так і над квантовою ямою за рахунок стану, що пов'язаний з 3D-напівпровідником. Тому слід розглядати зв'язок між тривимірним електронним газом (3DEG) і двовимірним газом (2DEG). Подібні задачі розглядалися раніше в контексті захоплення електронів в квантові ями в гетероструктурах [26-34].

Враховуючи особливості взаємного положення зон провідності у матеріалах, що контактують: мінімум енергії в 2D-матеріалі, що відповідає К долині, знаходиться нижче, ніж мінімум в GaN, переходи 3D – 2D стають можливі за умови, коли початкова енергія електрона E_i є не меншою від енергії електрона в 2D-матеріалі на величину енергії оптичного фонону E_f . Тому ймовірність захоплення $3D \rightarrow 2D$ практично дорівнює сумарній ймовірності завершити який-небудь перехід випущеним оптичним фононом. Враховуючи невиродженість початкового і кінцевого станів та домінування в GaN за низьких енергій електронна розсіяння на полярних оптичних фононах, найімовірніше саме полярно-оптичний фононний обмін є домінуючим механізмом таких переходів. Розглядаємо швидкість переходу $W(\vec{k}_i, \vec{k}_f)$ через полярно-оптичну фотонну взаємодію між станом електрона $\vec{k}_f$ в зоні провідності 2D-матеріалу та станом $\vec{k}_i$ в об'ємному напівпровіднику.

Імовірність такого переходу з початкового стану $\vec{k}$ з енергією E_i в 3D матеріалі до будь-якого іншого стану $\vec{k}'$ з енергією E_f за поглинання або

випромінювання фонона з енергією $\hbar\omega_{qb}$ зводиться до визначення параметра зв'язку C_{qb} для даного механізму і інтеграла перекриття $I^2(\vec{k}_i, \vec{k}_f, q_x)$ та обчислення інтеграла від (2.1) за всіма можливими станами $\vec{k}'$ в 2D напівпровіднику:

$$W_{if}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar}{2NM} \frac{S}{(2\pi)^2} \int \frac{C_{qb}^2}{\omega_{qb}} I^2(\vec{k}, \vec{k}', q_x) \left(N_{qb} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \pm \hbar\omega_{qb}) d\vec{k}' \quad (2.1)$$

де S - площа поверхні моношару, знак «+» відноситься до поглинання, а знак «-» до випромінювання. Інтеграл перекриття між 3-D і 2-D хвильовими функціями $\psi_i(x)$ і $\psi_f(x)$, та може бути записаний явно:

$$I^2(\vec{k}_i, \vec{k}_f, q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \rho_{if}(x) \rho_{if}^*(x') e^{iq_x|x-x'|}, \quad (2.2)$$

де, $\rho_{if}(x) = \psi_f^*(x) \psi_i(x)$,

Імовірність зворотного переходу з початкового стану $\vec{k}$ з енергією $E_{\vec{k}}$ в 2D матеріалі до будь-якого іншого стану $\vec{k}'$ з енергією $E_{\vec{k}'}$ 2D - матеріалі визначається в подібний спосіб:

$$W_{if}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar}{2NM} \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{C_{qb}^2}{\omega_{qb}} I^2(\vec{k}, \vec{k}', q_x) \left(N_{qb} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \pm \hbar\omega_{qb}) d\vec{k}', \quad (2.3)$$

де інтеграла перекриття $I^2(\vec{k}_i, \vec{k}_f, q_x)$ співпадає з (2.2). В обох випадках допускається, що переходи відбуваються в результаті взаємодії з об'ємними оптичними модами GaN.

Переходячи від інтегралів по кінцевих станах до інтегралів за величиною імпульсів, які передаються, та проводячи інтегрування по кутах, отримаємо вирази для ймовірностей у вигляді квадратур по q .

Визначення величини імпульсу фонона, який випромінюється (поглинається) в результаті розсіяння визначається з використанням процедури Неймана.

Враховуючи параболічний закон дисперсії в GaN та MoS₂ із закону збереження енергії визначається значення імпульсів і кінцевих станах:

$$k_{2-D}^2 = \frac{2m_{2D}^*}{\hbar^2} ((E - \Delta E_C \pm \hbar\omega_{LO}) = \frac{m_{2D}^*}{m_{3D}^*} k_{\parallel}^2 + \frac{2m_{2D}^*}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{3D}^*} - \Delta E_C \pm \eta \hbar\omega_{LO} \right). \quad (2.4)$$

$$p_{3-D}^2 = \frac{m_{3D}}{m_{2D}} (E_i \pm \hbar\omega_{LO} + \Delta E_C) \quad (2.5)$$

Кут між початковим та кінцевим хвильовими векторами визначається із закону збереження імпульсу.

Обмеження, що обумовлене двовимірною моделлю пов'язане з тим, що ширина моношару приймається рівною ширині діода, тоді як характер руху носіїв заряду під моношаром є тривимірним процесом і залежить від розподілу електричного потенціалу в поперечному напрямку, який, через малі площі моношару може бути істотно нерівномірним.

Для визначення заряду макрочастинок у вузлах даної сітки використовувався НСІС-метод [34].

Носії заряду рухаються переважно по каналу і частина з них може бути поглинена тунельною межею, створюючи струм провідності тунельної межі.

Загальний струм через електроди визначався шляхом диференціювання за часом заряду що пройшов через контакт. Для знаходження електростатичного потенціалу знаходиться розв'язок двовимірного рівняння Пуассона, для розв'язку якого використовується повний багатосітковий методу (FMG) [35].

2.2 Характеристики діодів з гетеропереходом об'ємний напівпровідник-моношар

2.2.1 Статичні характеристики діодів

Характеристики діодів розглядалися в інтервалі напруг 0 – 8 В. Це гарантувало обмеження величини енергії електронів та локалізації їх в параболічній Г- долині GaN, що відповідає моделі розрахунку. Розглянуто випадки переходів n- GaN – нелегований MoS₂ та переходи n- GaN – n- MoS₂ . Додатково розглянута ситуація, коли діод містить слабелегований шар, що

розташовано між n^+ - контактами, який відділяє основну частину діода від моношару.

На рис. 2.2. – 2.3 представлені розподіли потенціалу, напруженості електричного поля в діоді з гетеропереходом n - GaN – нелегований MoS_2 . Для порівняння на рис. 2.4 наведені відповідні розподіли потенціалу, напруженості електричного поля в GaN – діоді без моношара.

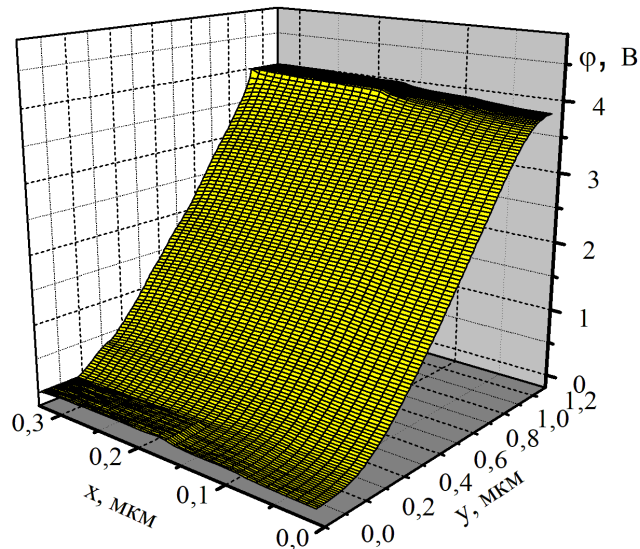
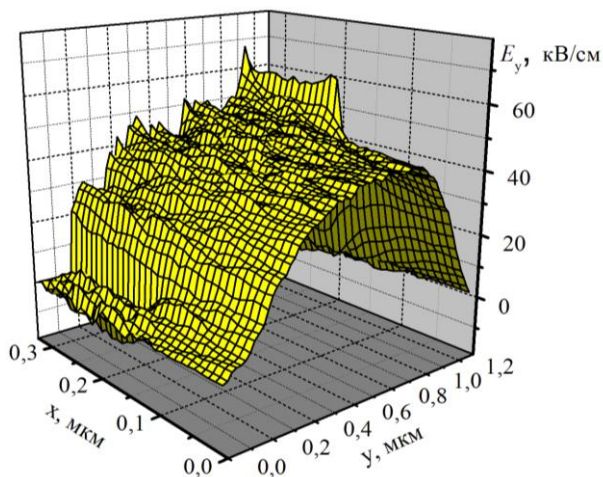
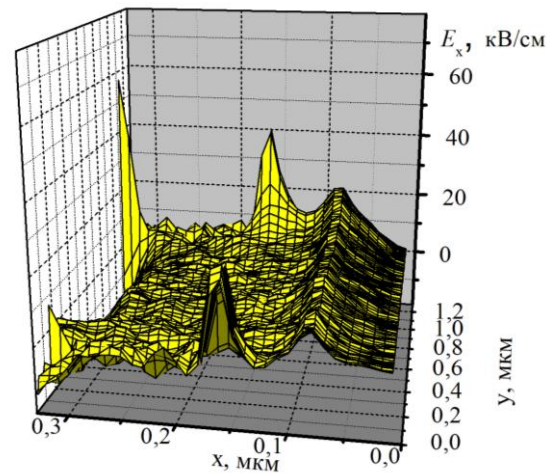


Рисунок 2.2 – Розподіл електростатичного потенціалу в діоді, $N_s = 0$, $l_{kb} = 0,16$ мкм.



а)



б)

Рисунок 2.3 – Розподіл E_y а) та E_x б) - складових напруженості електричного поля, $N_s = 0$, $l_{kb} = 0,16$ мкм.

Як видно з залежностей, наявність моношару у розглянутій структурі мало впливає на умови дрейфу носіїв заряду уздовж каналу діоду. Область об'ємного заряду, що виникає на межі поділу GaN – MoS₂ за розмірами не перевищує 0,05 мкм. Оскільки імовірність розсіяння електрона на полярному оптичному фононі має слабку залежність від енергії електрона, то захоплення носіїв зарядку в 2D - шар відбувається по всій довжині моношару Рис. 2.5.

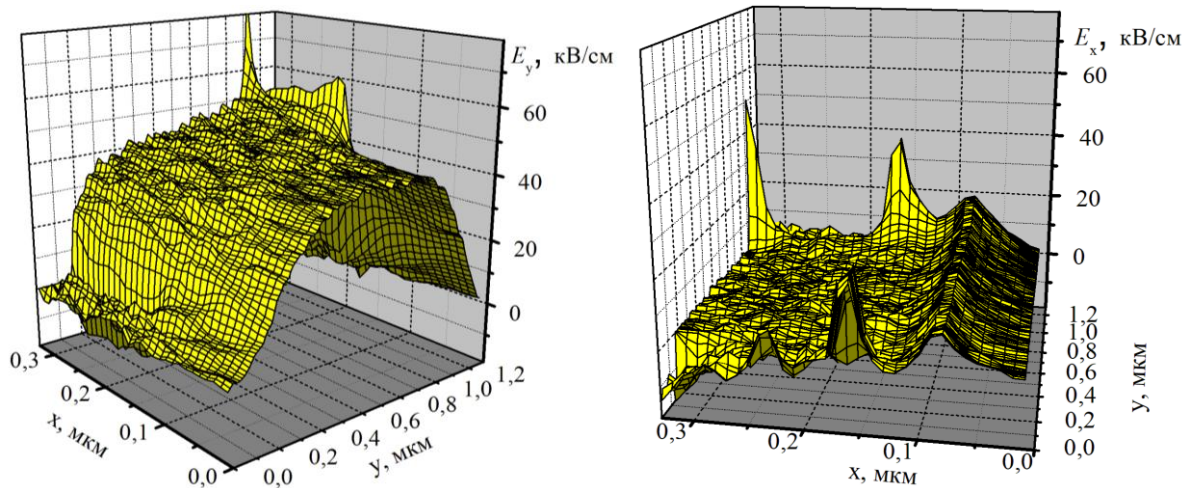


Рисунок 2.4 – Розподіл E_y а) та E_x б) - складових напруженості електричного поля в GaN - діоді.

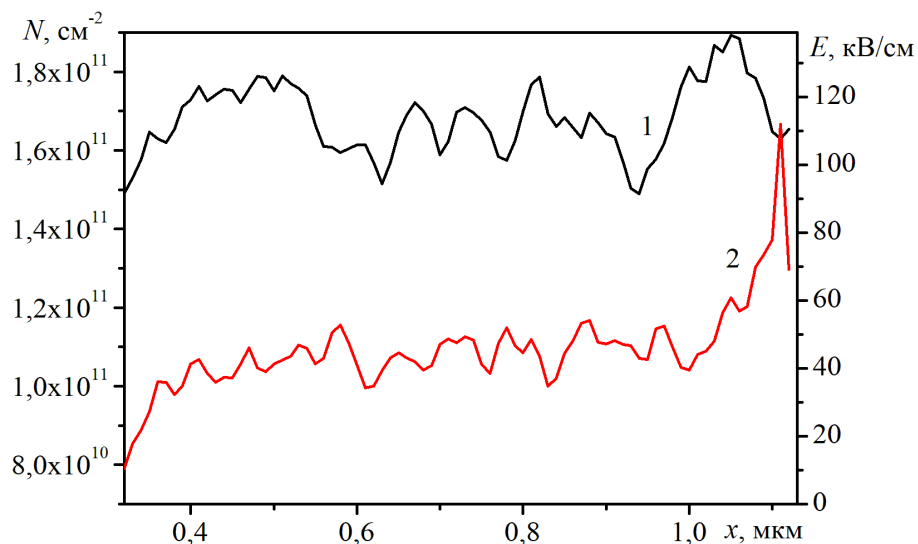
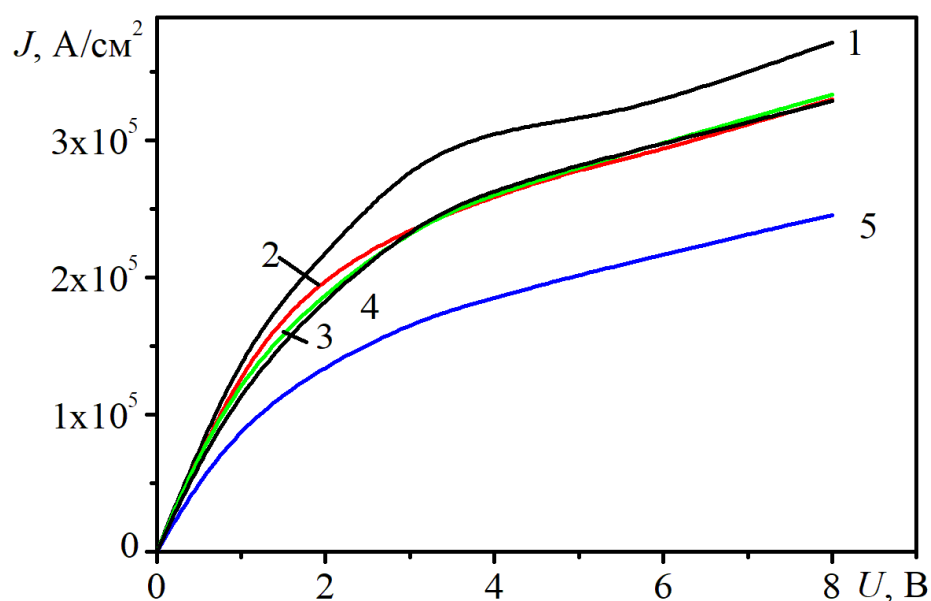


Рисунок 2.5 – Статичний розподіл поверхневої концентрації електронів (1) та напруженості електричного поля (E_y) (2) в моношарі, $N_s = 0$, $l_{kb} = 0,16$ мкм, $U = 0$

В.

Через наявність потенціального бар'єру між моношаром та об'ємним напівпровідником, поверхневий заряд дещо вищий в області контакту та підвищує електричне поле в області анодного переходу 2D – n^+ -GaN. Основним механізмом, що обмежує переходи 3D → 2D є формування потенціального бар'єру.

На рис. 2.6. показані залежність щільності струму від напруги для діодів на основі GaN з гетеропереходами 2D-MoS₂ – 3D GaN, що мали різний рівень легування моношару. Також на рисунку показана залежність густини струму від напруги для звичайного планарного діоду.



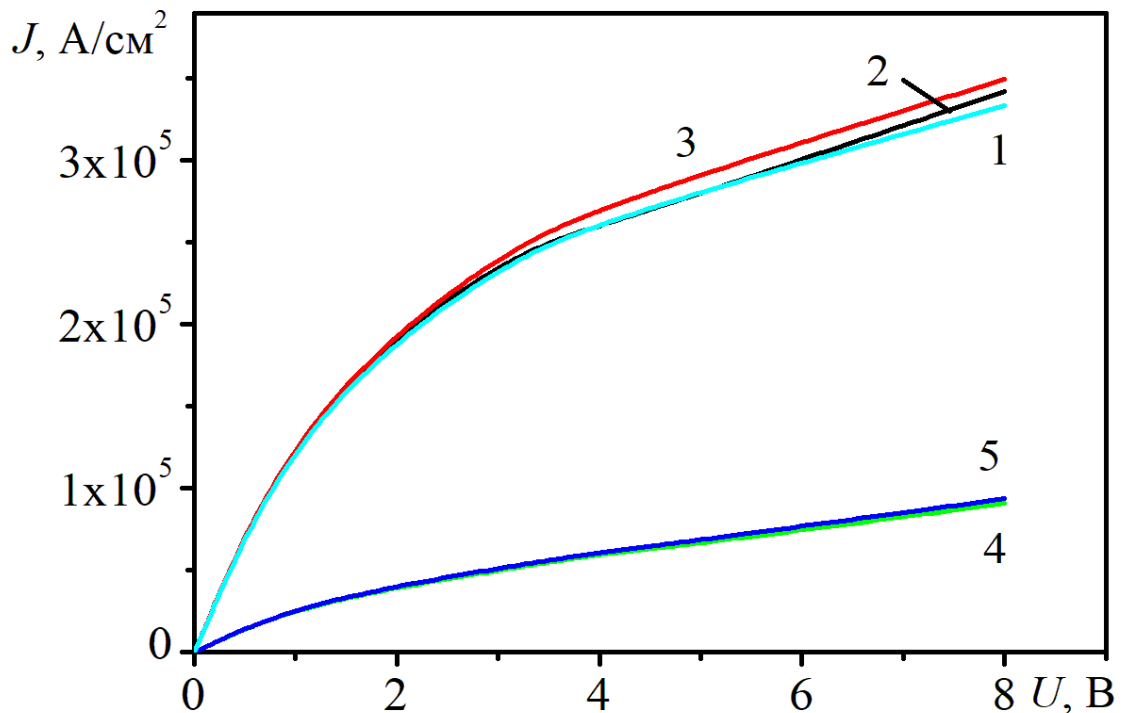
1 – діод без гетеро шару; 2- 5 діод з гетерошаром 2D-MoS₂ – 3D GaN: 2– $N_s = 0$; 3, 5– $N_s = 10^{11} \text{ см}^{-2}$; 4– $N_s = 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

Рисунок 2.6 – Залежність густини струму від напруги для діодів на основі GaN без гетерошару та з гетерошаром дожиною 0,8 мкм ($l_{kb} = 0,16 \text{ мкм}$).

Залежність 5 отримана для діоду, що містив слаболегований шар товщиною 80 нм, який був розташований між n^+ - контактами, та відділяв основну частину діода від моношару. З наведених залежностей видно, що наявність гетерошару зменшує величину струму, що протікає через діод, проте практично не змінює якісну залежність струму від напруги. Також, наявність не впливає на якісну поведінку введення слаболегованого шару, який лише знижує провідність каналу. За умови незмінності значення розриву зон між контактуючими матеріалами

величина провідності моношару слабо впливає на величину струму діодної структури. Найбільші відмінності спостерігаються в інтервалі напруг $0 - 2,5$ В і пов'язані за залежністю імовірності розсіяння на фононах від енергії.

На рис. 2.7 показані залежність густини струму від напруги для діодів на основі GaN з гетеропереходами 2D-MoS₂ – 3D GaN, що мали різну довжину моношару.



$$1 - l_b = 0,8 \text{ мкм}; 2,4 - l_b = 0,64 \text{ мкм}; 3,5 - l_b = 0,48 \text{ мкм}$$

Рисунок 2.7 – Залежність густини струму від напруги для діодів на основі GaN з гетерошаром з концентрацією донорів $N_s = 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

Основні відмінності спостерігаються на великих напругах, що пов'язано переважно з впливом просторового заряду в каналі діоду. Зниження концентрації носіїв в каналі послаблює цей вплив: відмінності в залежностях не спостерігаються.

2.3 Характеристики діода з бічною границею на основі MoS₂

Структура діода з бічною границею показана на рис. 2.8, умовні позначення відповідають опису рис. 2.1.

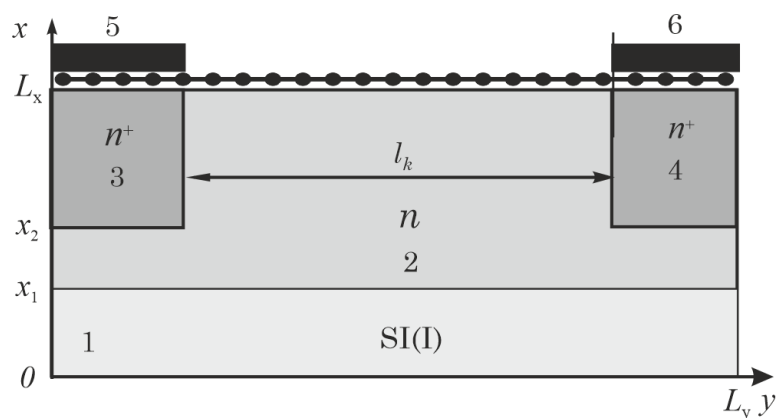


Рисунок 2.8 – Структура діода з бічною границею.

Особливості структури пов'язані з декількома факторами. В представленому варіанті контакт являє собою структуру 3D метал- 1L шар -3D напівпровідник, де 1L –є шар товщиною в один атом. Дослідження таких структур проводилося в [37,38], де з використанням провідного зонду АСМ було досліджено епітаксійний 1L-MoS₂, що був нанесений на n-легованому та р-легованому GaN та зроблено порівняння отриманих вольтамперних характеристик з характеристиками зонд-чистий GaN. Аналіз показав, що характер переносу через межу розділу зонд/1L-MoS₂/GaN практично відповідає переносу через границю зонд - GaN, що означає, що двовимірний моношар веде себе як напівпрозорий для електронів, тобто фактично є складовою частиною контакту Au/ GaN, як в роботі [38]. Щодо анодного контакту, то в розглянутому випадку допускається, що він має шарову структуру з використанням індію для GaN, Au та нікелю поверх шару MoS₂. В результаті можна вважати, що анодний контакт близький до омичного.

Враховуючи на несталу на сьогодні думку щодо величини розриву зони провідності на межі MoS₂ - GaN для структури з бічною границею допускається розгляд двох випадків, з величиною розриву зони провідності 0,2 та 0,5 еВ. При цьому не розглядається можливість виникнення зв'язаних станів на границі MoS₂ - GaN, які на думку деяких дослідників призводять до фіксації рівня електрохімічного потенціалу [39,40].

Розподіл середньої по довжині концентрації носіїв заряду та електростатичного потенціалу в каналі діоду показано на рис. 2.9.

Залежності отримано у припущенні, що встановлення термодинамічної рівноваги в системі MoS_2 – p-GaN відбувається за рахунок перерозподілу заряду між зоною провідності GaN та MoS_2 з формуванням збідненої області на межі поділу з боку GaN та негативного заряду в шарі MoS_2 . В результаті відбувається зниження концентрації в каналі. Залежність середньої концентрації від концентрації донорної домішки в каналі наведено на рис. 2.10.

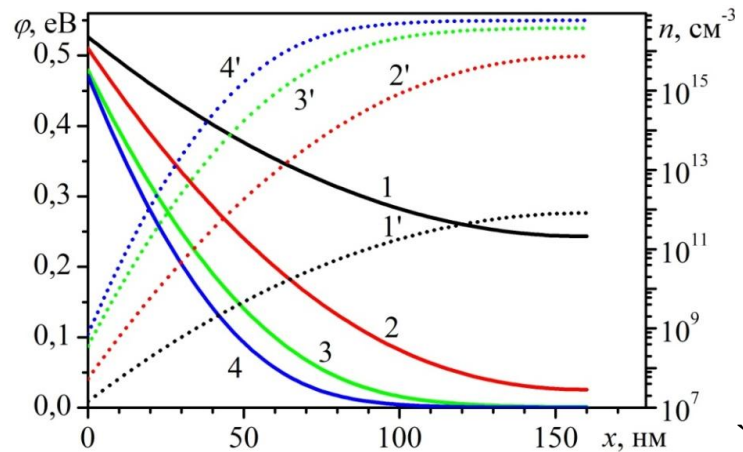


Рисунок 2.9 – Розподіл концентрації та електростатичного потенціалу області каналу діода за поверхневій концентрації домішок в 2 D – шарі $N_s = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, 1-4 – електростатичний потенціал, 1' - 4' – концентрація: 1,1' – $N_d = 10^{22} \text{ m}^{-3}$; 2,2' – $N_d = 2 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$; 3,3' – $N_d = 4 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$; 4,4' – $N_d = 6 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$.

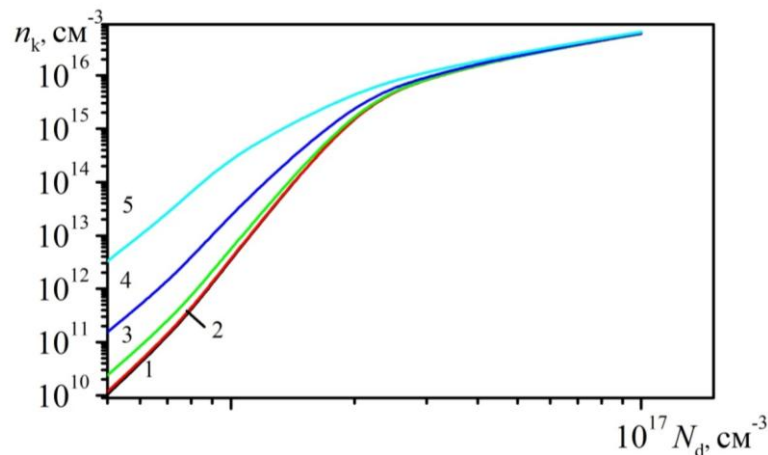


Рисунок 2.10 – Залежність середньої концентрації в каналі діода від рівня легування за наявності моношару MoS_2 на поверхні різних рівнях домішки в ньому: 1 – $N_{sd} = 0$; 2' – $N_{sd} = 10^{14} \text{ m}^{-2}$; 3 – $N_{sd} = 10^{15} \text{ m}^{-2}$; 4 – $N_{sd} = 10^{16} \text{ m}^{-2}$, 5 – $N_{sd} = 10^{17} \text{ m}^{-2}$.

Отримані залежності демонструють, що суттєвий вплив на процеси переносу заряду в каналі діода можна досягнути за умови, коли рівень легування каналу на основі GaN не перевищує $4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, вище якого процеси в моношарі, які не пов'язані з генерацією додаткових носіїв заряд, не будуть впливати на транспорт носіїв заряду в каналі. Причому, при рівні легування шару MoS_2 меншому за величину приблизно рівну 10^{15} м^{-2} його вплив на провідність каналу буде майже однаковий. На рис. 2.11 – 2.12 показані результати моделювання діода загальною довжиною 1,28 мкм та каналом близько 1 мкм при $N_{sd} = 0$ та концентрації донорів в каналі 10^{22} м^{-3} .

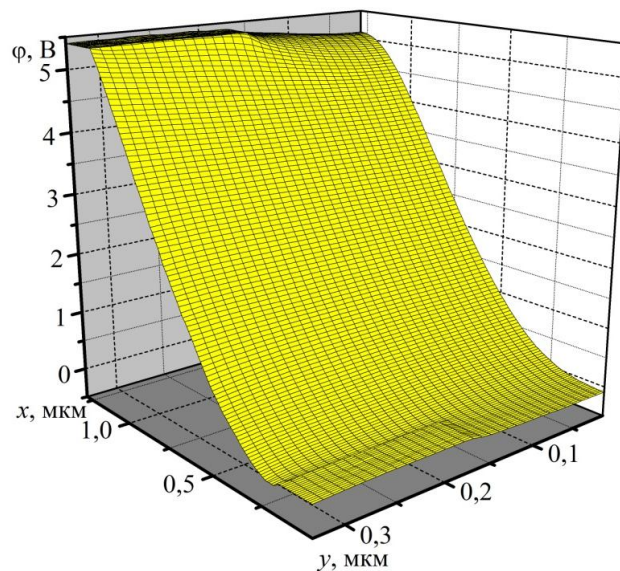


Рисунок 2.11 – Розподіл електростатичного потенціалу в діоді.

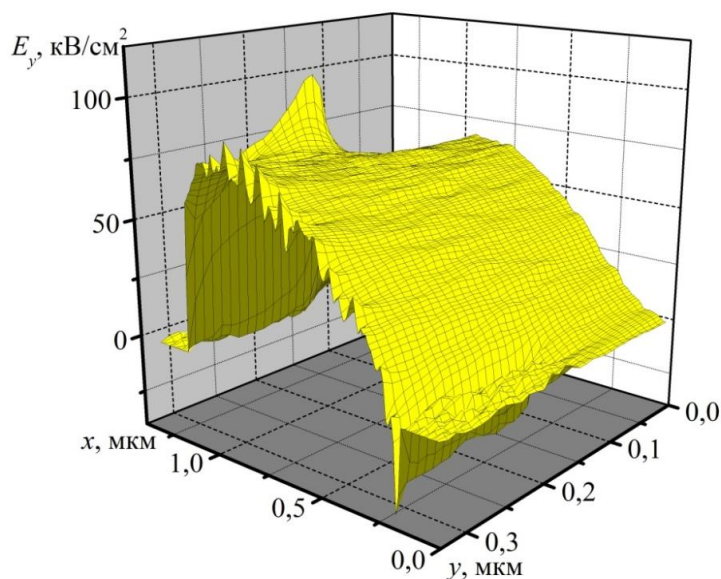


Рисунок 2.12 – Розподіл напруженості електричного поля в області діода.

На рис. 2.12 можна відзначити збурення електричного поля біля межі поділу об'ємний матеріал – моношар, що утворилося внаслідок перерозподілу електронів в моношарі. Слід зазначити що у нелегованому моношарі електричне поле може бути суттєво неоднорідним більшим ніж у легованому за рахунок локалізованого заряду. Типові вольтамперні характеристики діодів, зокрема у випадку з $N_{sd} = 0$, наведені на рис. 2.13.

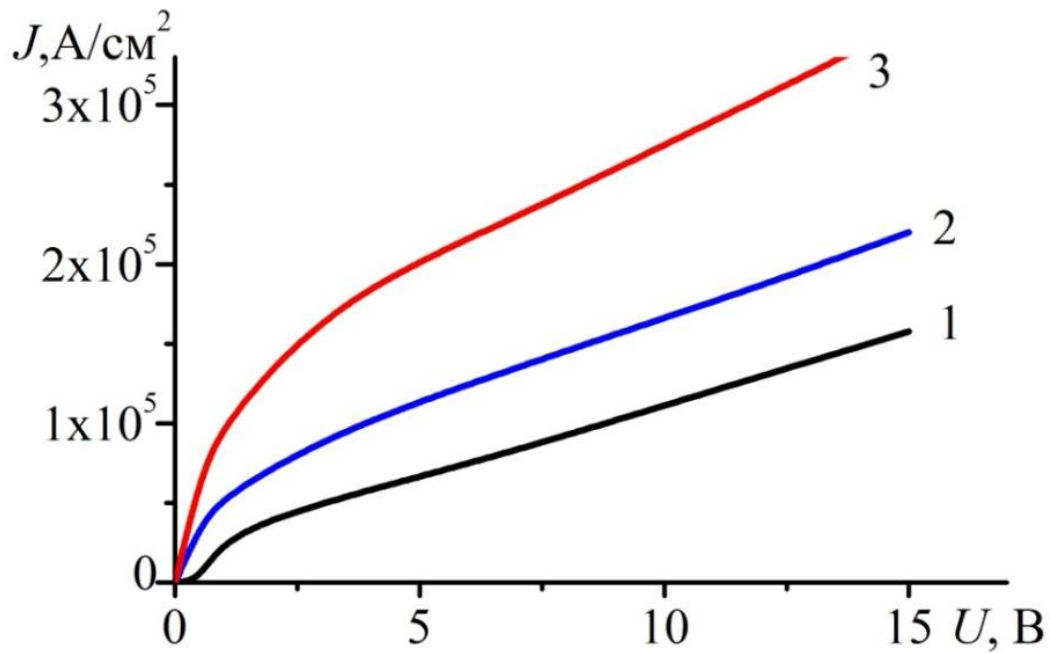


Рисунок 2.13 – Залежність густини струму від напруги: $N_{sd} = 0$:

$$1 - N_d = 10^{22} \text{ м}^{-3}; 2 - N_d = 2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}; 3 - N_d = 4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}.$$

Можна відзначити, що за малих концентрацій в каналі формування області збіднення приводить до появи при малих напругах ділянки “діодного типу”, в якій струм дуже повільно зростає зі збільшенням напруги живлення. За більших значень зміщення на всіх отриманих характеристиках залежність струму від напруги близька до лінійної, без характерної ділянки насичення. При збільшенні рівня легування моношару величина густини струму залежить від рівня легування каналу: за низької концентрації вона вище ніж в структурі, в якій моношар нелегований, що вказує на відчутний вклад провідності моношару в загальний струм діода, за більшої концентрації в каналі зміна струму несуттєва. Зазначимо,

що подібна залежність струму від напруги спостерігалась у субмікронному транзисторі на основі MoS_2 [49].

ВИСНОВКИ

Результати досліджень, проведених в роботі зводяться до наступного.

1. Дослідження 2D матеріалів все ще перебуває у зародковому стані, вперше графен був виділений у 2004 році, а інші матеріали були відкриті зовсім недавно. Перш ніж стане можливим широке впровадження в напівпровідникову промисловість, багато аспектів синтезу, виготовлення та проектування пристроїв буде потребувати значного вдосконалення. Незважаючи на це, конструкції пристроїв швидко розвиваються, і за останні десятиліття було досягнуто величезного прогресу в з'ясуванні нюансів цієї новонародженої галузі.

2. Запропонована та програмно реалізована модель електронного транспорту в структурах змішаної розмірності моношар – об'ємний напівпровідник. В рамках запропонованої моделі досліджено планарні діоди з гетеропереходом 2D MoS₂ – 3D GaN та визначено особливості формування характеристик таких структур в залежності від розмірів, положення елементів моношару та електрофізичних параметрів матеріалів.

3. Показано, що в планарних GaN діодах, що містять гетероперехід MoS₂ наявність моношару призводить до зменшення струму через діод, проте якісно не змінює залежність струму від напруги на відміну від діодів з суцільною бічною границею MoS₂ характеристики якої визначаються переважно відповідними концентраціями легуючих домішок в матеріалах.

4. Зроблено оцінку частотних властивостей планарних GaN – структур, що містять моношари, та показано, що характерний час переходів носіїв заряду між 3D та 2D областями обмежує їх частотні властивості значенням до 150 ГГц. Натомість в структурі з суцільною бічною границею на частотах в сотні гігагерц визначені ділянки з негативною активною складовою імпедансу, положення якої залежить від напруги живлення і зміщується в бік зростання при підвищенні напруги. Наявність широких частотних смуг з постійним імпедансом може знайти застосування для розробки викочастотних навантажень та елементів антенн.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Botsula O.V. Operation Principle and Simulation of Planar Diode with Tunnel n-p-n Border / O.V. Botsula, V.O. Zozulia // Proceedings 2020 IEEE Microwave Theory and Techniques in Wireless Communications (MTTW), Riga, Latvia, – 2020, P. 113 – 117.
2. Prokhorov E.D. Generation efficiency of planar n⁺-n-n⁺ diode with tunnel boundaries / E.D. Prokhorov, O.V. Botsula, O.A. Reutyna // Proceedings 19th Int. Crimean Conference “Microwave & Telecommunication Technology” (CriMiCo’2013), Sevastopol, Crimea, Ukraine – 2013, P. 139 – 140.
3. Botsula O.V. Monte Carlo Modeling of the Diodes with Lateral Resonant Tunneling Border / O.V. Botsula, K.H. Pryhodko, V.O. Zozulia // Proc. the 9-th International Conference on Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals UWBUSIS-2018, Odessa (Ukraine) – 2018, P. 256 – 259.
4. Botsula O.V. Generation of THz Oscillations by Diodes with Resonant Tunneling Boundaries / O.V. Botsula, V.O. Zozulia // Journal of Nano- and Electronic Physics – 2020, – vol. 12, no. 6, P. 06037-1–06037-4.
5. Xu K.Y. Gunn oscillations in a self-switching nanodiode / K.Y. Xu, G. Wang, A.M. Song // Applied Physics Letters – 2008, – 93(23) P. 233506-1 – 233506-3.
6. Wang, J. Recent Advances in 2D Lateral Heterostructures / Wang, J., Li, Z., Chen, H., Deng, G., & Niu, X.// Nano-Micro Letters – 2019, – 11(1) P. 48-1 – 48-31.
7. Gupta P. Layered transition metal dichalcogenides: promising near-lattice-matched substrates for GaN growth / P. Gupta, A.A. Rahman, S. Subramanian, S. Gupta, A. Thamizhavel, T. Orlova, S. Rouvimov, S. Vishwanath, V. Protasenko, M.R. Laskar, H.G. Xing, D. Jena, A. Bhattacharya // Scientific Reports – 2016, – 6 P. 23708-1 – 23708-8.
8. Zhang Z. Interface Engineering of Monolayer MoS₂/GaN Hybrid Heterostructure: Modified Band Alignment for Photocatalytic Water Splitting

Application by Nitridation Treatment / Z. Zhang, Q. Qian, B. Li, K.J. Chen // ACS Applied Materials & Interfaces – 2018, – 10(20) P. 1 – 21.

9. Ruzmetov D. Vertical 2D/3D Semiconductor Heterostructures Based on Epitaxial Molybdenum Disulfide and Gallium Nitride / D. Ruzmetov, K. Zhang, G. Stan, B. Kalanyan, G.P. Bhimanapati //ACS Nano – 2016, – 10(3) P. 3580–3588.

10. Jeong, H. Semiconductor–Insulator–Semiconductor Diode Consisting of Monolayer MoS₂, H-BN, and GaN Heterostructure / H. Jeong, S. Bang, H. Oh, H.J. Jeong, S.-J. An, G.H. Han, H. Kim, K.K. Kim, J.C. Park, Y.H. Lee, G. Lerondel, M.S. Jeong, // ACS Nano – 2015, – 9(10) P. 10032–10038.

11. Tangi M. Determination of Band Offsets at GaN/single-Layer MoS₂ Heterojunction / M. Tangi, P. Mishra, et al // Applied Physics Letters – 2016, – 109 P. 032104-1 – 032104-5.

12. Tangi M. Band Alignment at GaN/Single-Layer WSe₂ Interface / M. Tangi, P. Mishra, C.-C. Tseng, et al // ACS Applied Materials & Interfaces – 2017, – 9(10) P. 1 – 30.

13. Lee E.W. Layer-Transferred MoS₂/GaN PN Diodes / E.W. Lee, C.H. Lee, P.K. Paul, et al. // Applied Physics Letters – 2015, – 107(10) P. 103505-1 – 103505-4.

14. Henck H. Interface Dipole and Band Bending in Hybrid p-n Heterojunction MoS₂/GaN(0001) / H. Henck, et al // Physical Review B – 2018, – 96 P. 115312-1 – 115312-7.

15. Wang J. Thickness-Dependent Phase Stability and Electronic Properties of GaN Nanosheets and MoS₂/GaN van der Waals Heterostructures / J. Wang, H. Shu, P. Liang, N. Wang, D. Cao, X. Chen // Journal of Physical Chemistry C – 2019, 123, P. 3861–3867.

16. Wang, J. Recent Advances in 2D Lateral Heterostructures / Wang, J., Li, Z., Chen, H., Deng, G., & Niu, X. // Nano-Micro Letters – 2019, – 11(1) P. 48-1 – 48-31.

17. Zhang Z. Interface Engineering of Monolayer MoS₂/GaN Hybrid Heterostructure: Modified Band Alignment for Photocatalytic Water Splitting

Application by Nitridation Treatment / Z. Zhang, Q. Qian, B. Li, K.J. Chen // ACS Applied Materials & Interfaces – 2018, – 10(20) P. 1 – 21.

18. Ruzmetov D. Vertical 2D/3D Semiconductor Heterostructures Based on Epitaxial Molybdenum Disulfide and Gallium Nitride / D. Ruzmetov, K. Zhang, G. Stan, B. Kalanyan, G.P. Bhimanapati // ACS Nano – 2016, – 10(3) P. 3580–3588.

19. Jeong, H. Semiconductor–Insulator–Semiconductor Diode Consisting of Monolayer MoS₂, H-BN, and GaN Heterostructure / H. Jeong, S. Bang, H. Oh, H.J. Jeong, S.-J. An, G.H. Han, H. Kim, K.K. Kim, J.C. Park, Y.H. Lee, G. Lerondel, M.S. Jeong, // ACS Nano – 2015, – 9(10) P. 10032–10038.

20. Tangi M. Determination of Band Offsets at GaN/single-Layer MoS₂ Heterojunction / M. Tangi, P. Mishra, et al // Applied Physics Letters – 2016, – 109 P. 032104-1 – 032104-5.

21. Tangi M. Band Alignment at GaN/Single-Layer WSe₂ Interface / M. Tangi, P. Mishra, C.-C. Tseng, et al // ACS Applied Materials & Interfaces – 2017, – 9(10) P. 1 – 30.

22. Lee E.W. Layer-Transferred MoS₂/GaN PN Diodes / E.W. Lee, C.H. Lee, P.K. Paul, et al. // Applied Physics Letters – 2015, – 107(10) P. 103505-1 – 103505-4.

23. Henck H. Interface Dipole and Band Bending in Hybrid p-n Heterojunction MoS₂/GaN(0001) / H. Henck, et al // Physical Review B – 2018, – 96 P. 115312-1 – 115312-7.

24. Wang J. Thickness-Dependent Phase Stability and Electronic Properties of GaN Nanosheets and MoS₂/GaN van der Waals Heterostructures / J. Wang, H. Shu, P. Liang, N. Wang, D. Cao, X. Chen // Journal of Physical Chemistry C – 2019, 123, P. 3861–3867.

25. Poudel Y. Absorption and emission modulation in a MoS₂–GaN (0001) heterostructure by interface phonon–exciton coupling ./ Y. Poudel, J. Sławińska, P. Gopal. et.al // Photonics Research – 2019, – 7(12) – P. 1511 – 1520.

26. W.G. Aulbur, L. Jonsson, and J. Wilkins, in Solid State Physics, edited by F. Seitz, D. Turnbull, and H. Ehrenreich. Academic Press, New York, 2000, Vol. 54, p.1.

27. Hoare D. Monte carlo simulation of real and reciprocal space transfer of electrons in a pseudomorphically strained GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs quantum well /D. Hoare, R.A. Abram, R.W. Kelsall // Solid-State Electronics – 1996, – 39(4) P. 601 – 610.
28. Fischetti M.V. Theoretical Study of Some Physical Aspects of Electronic Transport in nMOSFETs at the 10-nm Gate-Length/ M.V. Fischetti, T.P. O'Regan, S. Narayanan, C. Sachs, S. // IEEE Transactions On Electron Devices – 2007, – 54(9) P. 2116 – 2136.
29. Cassanl E. Hot Carrier Relaxation in Quantum Well Structures using Monte Carlo Simulation / E. Cassanl, S. Galdinl, P. Dollfus, O. Musseau, P. Hesto // Fourth European Conference on Radiation and its Effects on Components and Systems – 1997, – P.79 -85.
30. Dawes J.M. Electron trapping in quantum-well structures / J.M. Dawes, M.G. Sceats // Physical Review B – 1987, – 36(18) P.9604 – 9611.
31. Deveaud B. Capture of electrons and holes in quantum wells / B. Deveaud, J. Shah, T.C. Damen, W.T. Tsang // Applied Physics Letters – 1988, – 52(22) P. 1886 – 1888.
32. Goodnick S.M. Effect of electron-electron scattering on nonequilibrium transport in quantum-well systems / S.M. Goodnick // Physical Review B – 1988, – 37(5) P. 2578 – 2588.
33. Kannan E.S. Charge trapping in a double quantum well system / E.S. Kannan¹, G.-H. Kim¹, I. Farrer, D.A. Ritchie // Journal Of Physics: Condensed Matter – 2008, – 20 P. 455206-1 – 455206-4.
34. Su W.-B. Observing quantum trapping on MoS₂ through the lifetimes of resonant electrons: revealing the Pauli exclusion principle / W.-B. Su, S.-M. Lu, H.-T. Jeng, et al // Nanoscale Advances - 2020, - 2 P. 5848–5856.
35. Laux S.E. On particle-mesh coupling on Monte Carlo device simulation / S.E. Laux // IEEE Transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems – 1996, – 15(10) P. 1266–1277.

36. Joppich W. Multigrid Methods for Process simulation / W. Joppich and S. Mijalkovic // Springer, Verlag, Wien, New York – 1993, 312 P.
37. Ruzmetov D. Van der Waals interfaces in epitaxial vertical metal/2D/3D semiconductor heterojunctions of monolayer MoS₂ and GaN / D. Ruzmetov, A. Davydov, A. Kolmakov, A. Herzing, A. Birdwell // 2D Materials – 2018, – 5(4) P. 045016-1– 045016-15.
38. Neupane M. Role of GaN surface Termination on Structural and Electronic Properties of 2D/GaN and Metal/2D/GaN Heterostructures/ M Neupane, DC Taylor, D. Ruzmetov // APS March Meeting Abstracts – 2018, – P. 15.004.
39. Henck H. Interface dipole and band bending in the hybrid p-n heterojunction MoS₂/GaN(0001) / H. Henck, Z. B. Aziza, O. Zill, D. Pierucci, // Physical Review B – 2017, – 96 P. 115312-1 – 115312-7.
40. O'Regan T.P. Structural and electrical analysis of epitaxial 2D/3D vertical heterojunctions of monolayer MoS₂ on GaN / T.P. O'Regan, D. Ruzmetov, M.R. Neupane, R.A. Burke // Applied Physics Letters – 2017, – 111(5) P. 051602-1 – 051602-5.
41. C. Mattevi, H. Kim, M. Chhowalla, "A Review of Chemical Vapour Deposition of Graphene on Copper", J. Mater. Chem. 2011, 21, 3324.
42. L. Gomez De Arco, Y. Zhang, C. W. Schlenker, K. Ryu, M. E. Thompson, C. Zhou, "Continuous, Highly Flexible, and Transparent Graphene Films by Chemical Vapor Deposition for Organic Photovoltaics", ACS Nano 2010, 4, 2865-73.
43. L. Zhang, A. Zunger, "Evolution of Electronic Structure as a Function of Layer Thickness in Group-VIB Transition Metal Dichalcogenides: Emergence of Localization Prototypes", Nano Letters 2015, 15, 949-957.
44. Y. Rong, Y. Fan, A. Leen Koh, A. W. Robertson, K. He, S. Wang, H. Tan, R. Sinclair, J. H. Warner, "Controlling Sulphur Precursor Addition for Large Single Crystal Domains of WS₂", Nanoscale 2014, 6, 12096-12103.
45. Y. H. Lee, X. Q. Zhang, W. Zhang, M. T. Chang, C. T. Lin, K. D. Chang, Y. C. Yu, J. T. W. Wang, C. S. Chang, L. J. Li, T. W. Lin, "Synthesis of Large-Area MoS₂ Atomic Layers with Chemical Vapor Deposition", Adv. Mater. 2012, 24, 2320-2325.

46. J. Pu, Y. Yomogida, K.-K. Liu, L.-J. Li, Y. Iwasa, T. Takenobu, "Highly Flexible MoS₂ Thin-Film Transistors with Ion Gel Dielectrics", *Nano Lett.* 2012, 12, 4013-4017.
47. L. Britnell, R. V. Gorbachev, R. Jalil, B. D. Belle, F. Schedin, a. Mishchenko, T. Georgiou, M. I. Katsnelson, L. Eaves, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. Leist, a. K. Geim, K. S. Novoselov, L. a. Ponomarenko, "Field-Effect Tunneling Transistor Based on Vertical Graphene Heterostructures", *Science* 2012, 335, 947-950.
48. M. Fontana, T. Deppe, A. K. Boyd, M. Rinzan, A. Y. Liu, M. Paranjape, P. Barbara, "Electron-Hole Transport and Photovoltaic Effect in Gated MoS₂ Schottky Junctions", *Sci. Rep.* 2013, 3, 1634.
49. Peng B. Two-Dimensional MX₂ Semiconductors for Sub-5 nm Junctionless Field Effect Transistors / B. Peng, Z. Wei, Q. Jiantao, Z. Wanli Zhang // *Materials* –11(3) P. 430-1 – 430-9.

ДОДАТОК А

Параметри моношару MoS₂

Параметр	Символ	Значення
Поверхнева густина іонів, г/см ²	ρ	3.1×10^{-7}
Ефективна маса електрона	m^*	$0.48 m_e$
Поперечна швидкість звуку, м/с	c_{TA}	4.2×10^3
Повздовжня швидкість звуку, м/с	c_{LA}	6.7×10^3
Поперечні акустичні (ТА), еВ	Ξ_{TA}	1.6
Повздовжня акустичні (LA), еВ	Ξ_{LA}	2.8
Деформаційний потенціал Поперечні акустичні (ТА), еВ	$D_{K.TA}^1$	5.9
Деформаційний потенціал Повздовжня акустичні (LA), еВ	$D_{K.LA}^1$	3.9
Деформаційний потенціал Поперечна оптична мода (ТО), еВ	$D_{K.TO}^1$	1.9
Деформаційний потенціал Повздовжня оптична мода (LO), еВ	$D_{K.LO}^0$	2.6×10^8
Деформаційний потенціал Однополярна оптична мода,	$D_{\Gamma.HP}^0$	4.1×10^8
Ефективна товщина шару, Å	A	4.41
Енергія фонона, полярна оптична мода, меВ	$\hbar\omega_{LO}$	48
Енергія фонона, неполярна оптична мода, меВ	$\hbar\omega_{HP}$	50