

June 2021

Simulation of self-heating effect in MOSFET based on 2D MoS₂

Atabek E. Atamuratov
Urgench State University, Urgench

Xushnudbek SH. Saparov
Urgench State University, Urgench

A Yusupov
Tashkent University of Information Technologies

Frank Schwierz
Ilmenau University of Technology

Follow this and additional works at: <https://uzjournals.edu.uz/adu>



Part of the [Computer Sciences Commons](#), [Engineering Physics Commons](#), and the [Mathematics Commons](#)

Recommended Citation

Atamuratov, Atabek E.; Saparov, Xushnudbek SH.; Yusupov, A; and Schwierz, Frank (2021) "Simulation of self-heating effect in MOSFET based on 2D MoS₂," *Scientific Bulletin. Physical and Mathematical Research*: Vol. 3 : Iss. 1 , Article 4.

DOI: 07.2

Available at: <https://uzjournals.edu.uz/adu/vol3/iss1/4>

This Article is brought to you for free and open access by 2030 Uzbekistan Research Online. It has been accepted for inclusion in Scientific Bulletin. Physical and Mathematical Research by an authorized editor of 2030 Uzbekistan Research Online. For more information, please contact sh.erkinov@edu.uz.

УДК: 07.2

Эффект саморазогрева в полевых транзисторах на основе двумерного дихалькогенида молибдена

А.Э. Атамуратов¹, Х.Ш. Сапаров¹, А. Юсупов¹, Ф. Швиерц³

¹Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан

²Технологический университет Ильменау, Ильменау, Германия

Получена 15 марта 2021 г. Принята к печати 22 мая 2021 г

Аннотация. В работе моделируется эффект саморазогрева в наномасштабном планарном металл-оксид-полупроводник (МОП) транзисторе на основе двумерного MoS_2 . Для моделирования переходной характеристики двумерного транзистора используется метод подбора эффективной массы электрона. Эффект саморазогрева моделируется с помощью использования термодинамической модели транспорта. Показано, что распределение температуры вдоль канала и температура в середине канала зависят как от степени покрытия канала подзатворным оксидным слоем так и от толщины обратного оксидного слоя.

Ключевые слова: эффективная масса, эффект саморазогрева, температура канала, теплопроводность, двумерный МОП транзистор.

Аннотация. Ушбу ишда наноўлчамли планар икки ўлчовли MoS_2 асосидаги металл – оксид – яримўтказгич (МОЯ) транзисторда ўз-ўзидан қизиш эффекти моделлаштирилди. Икки ўлчовли транзисторнинг ўтиш характеристикасини моделлаштириш учун электроннинг эффектив массасини танлаш усули қўлланилади. Ўз-ўзидан қизиш эффекти термодинамик транспорт модели ёрдамида моделлаштирилган. Канал буйлаб ҳароратнинг тақсимланиши ва канал ўртасидаги ҳарорат каналнинг затвор ости оксид қатлами билан қопланиш даражасига ва орқа оксид қатламининг қалинлигига боғлиқ эканлиги кўрсатилган.

Калит сўзлар: эффектив масса, ўз – ўзидан қизиш эффекти, канал температураси, иссиқлик ўтказувчанлик, икки ўлчовли МОЯ транзистор.

I. ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных тенденций современной электроники является масштабирование размеров полевых транзисторов до нанометровых масштабов. Уменьшение размеров приборов позволит существенно уменьшить потребляемую энергию, а также увеличить степень интеграции интегральных схем содержащих эти приборы. В связи с этой тенденцией имеется два подхода на перспективу масштабирования, в соответствии с одной из которых уже достигается физический предел масштабирования при размерах порядка 10 нм [1. с.1-5.], а во втором подходе утверждается, что есть определенные возможности еще дальше уменьшать размеры транзисторов [2.с.1-3.]. В соответствии со вторым подходом предлагается продолжить масштабировать транзисторы например путем изменения структуры транзисторов или использованием новых, в частности одномерных или двумерных материалов [3.с.1-17, 4.с.8261-8283]. Одним из таких предложений является проектирование полевых транзисторов с изолированным затвором на основе двумерных материалов. Многие из

известных и исследуемых двумерных материалов обладают ненулевой шириной запрещенной зоны, как и в полупроводниках, и следовательно могут быть использованы в качестве канала в полевых транзисторах с изолированным затвором. С другой стороны подвижность носителей в этих материалах в основном имеет умеренные значения, что подталкивает на дополнительные исследования транзисторов на основе двумерных материалов. Здесь имеется два важных аспекта способствующих перспективе исследования двумерных материалов. Во первых это очень тонкие слои двумерных материалов возможные для использования в транзисторах, которые могут способствовать дальнейшему уменьшению размеров транзисторов. Второй аспект связан с свойством механической гибкости двумерных материалов. Это свойство позволит развить гибкую электронику на основе двумерных материалов.

Одним из перспективных двумерных материалов, которые являются потенциально возможными для применения в полевых транзисторах с изолированным затвором являются дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) [5.с.1-5, 6.с.16, 7.с.768-779].

Несмотря на то, что работы в этом направлении находятся на начальной стадии, к настоящему моменту уже есть как экспериментальные работы по изготовлению полевых транзисторов [8.с.3788-3792], так и работы связанные с моделированием характеристик транзисторов на основе двумерных материалов [6.с.38]. Нужно отметить, что в настоящее время, в базе данных коммерческих программ, предназначенных для моделирования характеристик полупроводниковых приборов не имеется параметров двумерных материалов. Поэтому одной из важных задач в области моделирования является разработка специальных методов для моделирования полупроводниковых приборов на основе двумерных полупроводниковых материалов.

В некоторых работах показано, что транзисторы на основе структур металл-оксид-полупроводник (МОП) с каналом из двумерных ДПМ проявляют сравнительно большую стойкость к короткоканальным эффектам, то есть имеют сравнительно малые величины DIBL эффекта (уменьшение потенциального барьера индуцированное стоком) и SS (наклон подпороговой передаточной характеристики) [6.с.16]. Но одним из недостатков таких транзисторов может быть то обстоятельство, что канал транзистора, обычно, как сверху так и с низу граничит оксидным слоем имеющим сравнительно малые величины теплопроводности. Верхний оксидный слой представляет собой подзатворный оксидный слой а нижний является обратным оксидным слоем. Это обстоятельство может привести к уменьшению теплоотвода из канала, выделяющегося при прохождении тока, которое может привести к локализации фононов в канала. Это тем самым может вызвать эффект саморазогрева, который будет влиять на токовые характеристики транзистора. Поэтому одной из важных задач нанoeлектроники является исследование эффекта саморазогрева в МОП транзисторах на основе двумерных материалов (2D МОПТ).

II. СТРУКТУРА ИССЛЕДУЕМОГО ТРАНЗИСТОРА И МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Одним из наиболее исследованных двумерных материалов являются дихалькогениды переходных металлов, в частности дихалькогенид молибдена, поэтому в данной работе моделируется эффект саморазогрева в 2D МОПТ на основе

двумерного MoS_2 (Рис. 1а). Рассматривается зависимость эффекта саморазогрева от геометрии структуры транзистора, в частности от толщины скрытого оксидного слоя и степени покрытия базы транзистора подзатворным оксидным слоем.

База моделируемого транзистора, состоящая из монослойного MoS_2 , имеет толщину 0.65 нм и длину 90 нм. Алюминиевый затвор толщиной 2 нм имеет длину 30 нм. Толщина обратного оксидного слоя SiO_2 варьируется между 50 и 1020 нм.

Двумерное моделирование проводилось с использованием программы TCAD Synopsys Sentaurus. Так как параметры двумерного MoS_2 не включены в базу данных программы, были использованы соответствующие параметры и метод моделирования предложенные в работах [3.с.1-17, 6.с.35]. Для калибровки используемой диффузионно-дрейфовой модели полученные результаты сравнивались с результатами работы [6.с.38] (Рис 1 б).

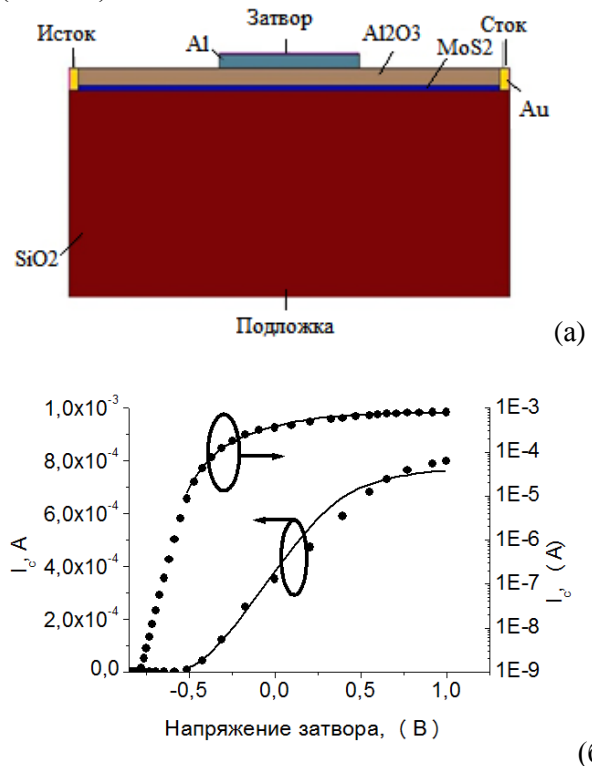


Рис 1. (а) Структура моделируемого МОП транзистора на основе двумерного MoS_2 и (б) калибровка переходной характеристики этого транзистора, полученной с использованием диффузионно-дрейфовой транспортной модели с характеристикой, полученной в работе [6.с.38].

При этом были использованы параметры материала и моделирования показанные в таблице 1, взятые из работ [3.с.1-17, 6.с.35]. В

транспорте рассматриваемой структуры не учитывалось прямое туннелирование носителей от истока к стоку, потому что квантово-механическое моделирование проведенное в работе [9.с.2-9] показывает, что в транспорте носителей от истока к стоку этот механизм не является доминирующим.

Одним из важных параметров определяющих токовые характеристики транзистора является емкость затвора, определяемая квантовой емкостью нанощита, которая в рассматриваемом транзисторе, зависит от плотности состояний в MoS_2 . Плотности состояний объемного и двумерного MoS_2 отличаются и связаны с эффективной массой носителя. Это обстоятельство использовано в указанном выше методе, в котором подбором эффективной массы носителя моделирована плотность состояний объемного MoS_2 , которая даёт такую же зависимость квантовой емкости от плотности состояний как и у рассчитанного теоретически для двумерного MoS_2 [3.с.1-17,6.с.35].

Теоретическая зависимость плотности носителей электронного щита n_{sh}^{2D} и квантовой емкости C_q^{2D} в двумерном случае имеет следующий вид [3.с.1-17]:

$$n_{sh}^{2D} = \sum_i \int_0^\infty g_{2D}^i f(\varepsilon, E_i) d\varepsilon \quad (1)$$

$$C_q^{2D} = \frac{q^2}{\pi \hbar^2} \sum_i \frac{v_i m_{eff}^i}{1 + \exp\left(\frac{E_i - q\varphi_c}{k_B T}\right)} - (E_c - E_f) / q\pi\varepsilon \quad (2)$$

где

$$g_{2D}^i = \frac{v_i m_{eff}^i}{\pi \hbar^2} \quad (3)$$

и

$$f(\varepsilon, E_i) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon + E_i - q\varphi_c}{k_B T}\right)} \quad (4)$$

здесь m_{eff} – эффективная масса электрона и для MoS_2 она равна $0.463 \cdot m_0$ [6.с.27], где m_0 – масса свободного электрона, v_i – фактор вырождения долины, φ_c – потенциал канала определяемый как $-(E_c - E_f) / q$, q – элементарный заряд, ε – кинетическая энергия электронов, g – плотность состояний (g^i – плотность состояний в i -ой

подзоне), f – функция распределения Ферми-Дирака, E_i – положение i -ой подзоны относительно дна зоны проводимости, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура.

При моделировании, для эффективной массы, производится коррекция, умножением её на корректирующий фактор, для достижения такой же зависимости квантовой емкости от плотности состояний как и для двумерного случая. В работе [6.с.35], где для моделирования использована программа TCAD Silvaco Atlas, получено значение корректирующего фактора равное 4. В нашей работе был использован TCAD Synopsys Sentaurus и для достижения согласия с результатами работы [6.с.35] полученное значение корректирующего фактора составляет 8 (таблица 1).

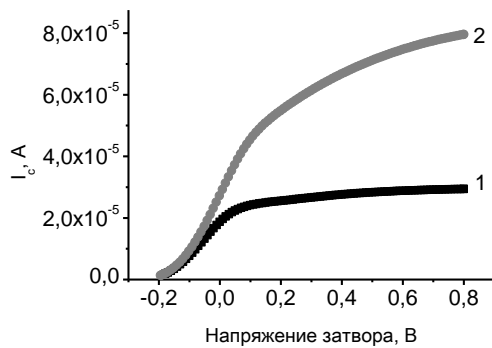
Таблица 1. Параметры двумерного MoS_2 и параметры моделирования использованные при моделировании переходной характеристики МОП транзистора на основе двумерного MoS_2

III. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ.

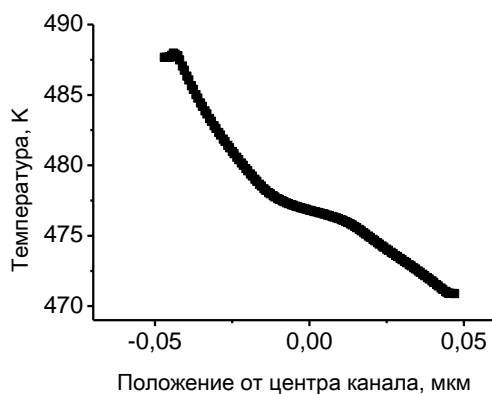
Результаты сравнения передаточной характеристики 2D MoS_2 МОПТ полученной в данной работе с результатами работы [6.с.38] приведены на рисунке 1(б).

Учитывая, что длина транзистора (расстояние от истока до стока) и длина затвора достаточно большие, для рассмотрения эффекта саморазогрева использовалась термодинамическая модель транспорта. При этом за основу взяты как параметры использованные при калибровке переходной характеристики так и термодинамические параметры двумерного MoS_2 . Предполагая, что температура транзистора при работе имеет значения больше чем 300 К и учитывая, что согласно результатам работы [10.с.455-460] в диапазоне температур выше 300 К теплопроводность и теплоемкость изменяются очень слабо, в термодинамической модели использованы их значения не зависящие от температуры и равные соответственно $34 \frac{W}{K \cdot m}$ [10, 11] и $24 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$ [10.с.455-460]. На рисунке 2а приведены переходные вольтамперные характеристики транзистора без учета и с учетом саморазогрева. Наблюдаемое изменение ВАХ, согласно [12.с.63-68], связано

с изменением подвижности носителей и емкости связи затвор-исток, вызванного повышением температуры канала. На рисунке 2б приведено распределение температуры вдоль канала транзистора. Заметная разница температур около истока и стока связано с различием плотности тока около истока и стока в канале. Горизонтальная ступенька, проявляющаяся в середине канала, соответствующая подзатворной области, связана с большей скоростью отвода тепла через затвор в середине канала. Наблюдаемые температуры канала (до 500 К) являются существенно меньшими по сравнению с температурами наблюдаемыми в вертикальных полевых транзисторах с изолированным затвором на основе структур кремний-на-изоляторе (КНИ) (до 900 К) с примерно такими же геометрическими параметрами: длина транзистора до 120 нм, длина затвора 20 нм [12.с.63-68].



(а)



(б)

Рис.2. (а) Переходная характеристика МОП транзистора на основе 2D MoS_2 полученная без учета (кривая 1) и с учетом эффекта саморазогрева с использованием термодинамической модели транспорта (кривая 2); (б) распределение температуры в центре вдоль канала при полном покрытии канала слоем Al_2O_3

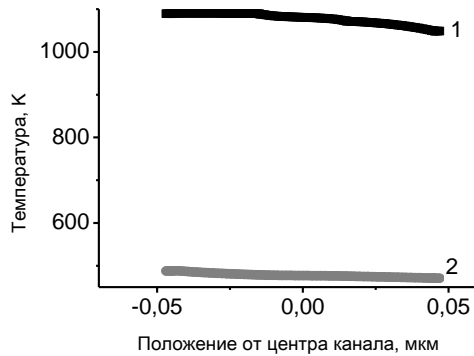
Температура и его распределение в канале зависит от скорости отвода тепла и поэтому от материалов контактирующих с каналом и их толщины. Степень покрытия верхней поверхности канала подзатворным оксидным слоем сильно влияет на температуру в канале. На рисунке 3а приведено распределение температуры вдоль середины канала как при полном покрытии верхней поверхности канала подзатворным оксидом алюминия (рис 3а кривая 1), так и при покрытии только подзатворной области поверхности канала оксидом алюминия (рис 3а, кривая 2). Видно, что при только частичном покрытии поверхности канала оксидом алюминия температура канала существенно больше. Это связано с тем, что часть поверхности канала, непокрытая оксидом алюминия, покрыта слоем воздуха, у которого теплопроводность намного ниже чем у оксида алюминия. Теплопроводность воздуха имеет значения от 0.0084 до $0.0915 \frac{W}{K \cdot m}$ в диапазоне

температур от 90 К до 1473 К, а теплопроводность оксида алюминия от 40 до $7 \frac{W}{K \cdot m}$ в диапазоне температур от 300 К до 2000 К. Видно, что теплопроводность оксида алюминия на 2-3 порядка выше чем у воздуха и это приводит к значительно большей скорости отвода тепла из канала при его полном покрытии подзатворным оксидом алюминия, чем при частичном покрытии. И это отражается в сравнительно низкой температуре канала.

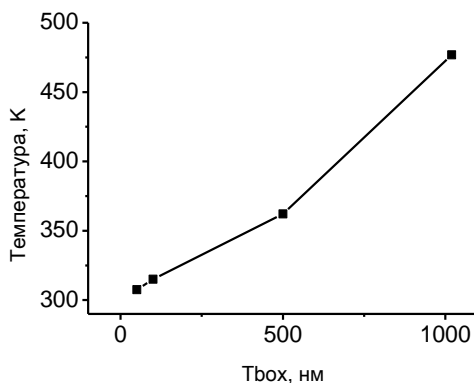
Рассматривалось также влияние толщины T_{box} обратного оксидного слоя 2D MoS_2 МОП транзистора на температуру в середине канала (Рис 3 б). Уменьшение температуры с уменьшением T_{box} связано с уменьшением расстояния между каналом и контактом к обратному оксидному слою которое способствует к большей скорости отвода тепла из оксида. Линейность зависимости температуры канала от T_{box} соответствует приведенной в [13.с.827-828] зависимости изменения температуры канала от толщины обратного оксидного слоя для вертикальных полевых транзисторов с изолированным затвором на основе структур кремний-на-изоляторе (5):

$$\Delta T = \frac{(P_t \cdot T_{box})}{K_b \cdot A} \quad (5)$$

здесь, K_b – теплопроводность материала обратного оксидного слоя, P_i – мощность отводимого тепла, A – площадь поверхности контакта к обратному оксидному слою.



(a)



(б)

Рис.3. (а) распределение температуры вдоль центра канала при частичном (кривая 1) и полном (кривая 2) покрытии канала слоем Al_2O_3 ; (б) зависимость температуры в центре канала от толщины обратного оксидного слоя.

V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении можно отметить, что эффект саморазогрева в МОЯ транзисторах на основе двумерных MoS_2 является сравнительно слабым по сравнению с КНИ FinFET транзисторами с примерно такими же геометрическими параметрами. Однако эффект саморазогрева является очень чувствительным к модификациям структуры транзистора, в частности сильно зависит от материала и степени покрытия двумерного канала подзатворным оксидным слоем. Это обстоятельство может быть использовано при разработке оптимальной структуры МОП транзистора на основе двумерных материалов устойчивых к эффекту саморазогрева. Зависимость изменения температуры канала от толщины обратного оксидного слоя является линейной, что согласуется с результатами анало-

гичной зависимости для вертикальных полевых транзисторов с изолированным затвором на основе структур кремний-на-изоляторе.

Simulation of self-heating effect in MOSFET based on 2D MoS_2

Atabek E. Atamuratov¹, Xushnubbek SH. Saparov¹, A. Yusupov², Frank Schwierz³

¹Urgench State University, Urgench

²Tashkent University of Information Technologies.

³Imenau University of Technology

Annotation. One of the main trends of today's electronics is the decreasing the sizes of MOSFET up to nanometer scale. In this connection there are two main views to the perspective of scaling. According to one of them limit of scaling is reached at sizes 10 nm order, however according to second view, still there are opportunity to decrease transistor to more lower sizes. In accordance with second approach it is suggested to continue the size scaling by modification the transistor structure or by using the new materials, particularly one or two dimensional materials. One of such suggestions is the designing of MOSFET on the basis of two dimensional dichalcogenides of transition metals (DTM).

However, one of disadvantages of such devices can be circumstance that the top as well as the bottom of the transistor channel has borders with oxide layers. Upper oxide layer is gate oxide layer and bottom oxide layer is back oxide layer. Because of low heat conductivity of the oxides, this condition can lead to decreasing the heat flow from the channel, during flow of current, in comparison with bulk MOSFET that results in self-heating effect (SHE), which influence to characteristics of the transistor. Therefore it is interesting and important to consider self-heating effect in MOSFET based on two dimensional DTM.

Two dimensional MoS_2 is most considered DTM as channel in MOSFETs, therefore in this work the self heating effect is simulated in MOSFET based on two dimensional MoS_2 . SHE dependence on degree of covering the channel by gate oxide and on the thickness of back oxide of the transistor is considered.

2D simulation is carried out with using the Advanced TCAD Sentaurus. The parameters of 2D MoS_2 is not included in data base of the used soft, therefore for simulation the characteristics of 2D MoS_2 based MOSFET the parameters and methods suggested in literature was used.

The channel of simulated transistor based on monolayer MoS_2 with thickness 0.65 nm and length 90 nm. Aluminum gate has thickness 2 nm and

length 30 nm. The thickness of SiO₂ back oxide is varied between 50 and 1020 nm.

At simulation the electron effective mass is corrected by some factor for reaching the same dependence of quantum capacitance on DOS as in theoretical two dimensional case. The length of transistor and gate length is enough long, therefore in simulation for accounting the SHE the thermodynamic model was used. The simulation have performed on the base of the parameters used in calibration as well as on the basis of thermodynamic parameters of 2D MoS₂.

From simulation study of 2D MoS₂ based MOSFET of perspective of self heating it is observed that channel temperatures in this devices is lower with respect to SOI FinFET with approximately the same geometries. However channel temperatures in 2D MoS₂ based MOSFET is very sensitive to modification of transistor structure.

References:

- [1] D.J. Wardynski. December 19, 2019. End Of Moore's Law – What's Next For The Future Of Computing. Pp 1-5. <https://www.brainspire.com/blog/end-of-moores-law-whats-next-for-the-future-of-computing>. | Published
- [2] Samuel K. Moore. 31 May 2019. Another Step Toward the End of Moore's Law Samsung and TSMC move to-5 nanometer manufacturing. Pp 1-3. <https://spectrum.ieee.org/semiconductors/devices/another-step-toward-the-end-of-moores-law>. Spectrum
- [3] Cedric Nanmeni Bondja, Zhansong Geng, Ralf Granzner, Jörg Pezoldt & Frank Schwierz. (2016). Simulation of 50-nm Gate Graphene Nanoribbon Transistors. Electronics 5, 3 pp.1-17; doi:10.3390/electronics5010003
- [4] F. Schwierz, J. Pezoldt and R. Granzner. 2015. Two-dimensional materials and their prospects in transistor electronics. Nanoscale, 7, pp. 8261–8283
- [5] Jiahao Kang, Wei Liu, & Kaustav Banerjee. (2014). High-performance MoS₂ transistors with low-resistance molybdenum contacts. Appl. Phys. Lett., 104, pp. 093106 - 1- 5.
- [6] Zhansong Geng. Simulation von Grafen-Nanoribbon-und MoS₂ Transistoren. Masterarbeit. TU Ilmenau, 2016, pp. 3-84
- [7] Gianluca Fiori1, Francesco Bonaccorso, Giuseppe Iannaccone, Tomás Palacios, Daniel Neumaier, Alan Seabaugh, Sanjay K. Banerjee & Luigi Colombo. (2014). Electronics based on two-dimensional materials, Nature nanotechnology. october | vol 9 |, pp.768 – 779.
- [8] H. Fang, S. Chuang, T. C. Chang, K. Takei, T. Takahashi, & A. Javey. (2012). "High-Performance Single Layered WSe₂ p-FETs with Chemically Doped Contacts", Nano Letters, vol. 12, pp. 3788-3792.
- [9] S. Thiele, W. Kinberger, R. Granzner, G. Fiori & F. Schwierz, (2018). The prospects of transition metal dichalcogenides for ultimately scaled CMOS., Solid State Electronics, 143, pp. 2–9. <https://doi.org/10.1016/j.sse.2017.11.004>
- [10] Dipankar Sahan, Santanu Mahapatra. (2016). Analytical insight into the lattice thermal conductivity and heat capacity of monolayer MoS₂. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. September, Volume 83, Pages 455-460. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2016.01.013>
- [11] R. Yan, J. R. Simpson, S. Bertolazzi, J. Brivio, M. Watson, X. Wu, A. Kis, T. Luo, A. R. H. Walker & H. G. Xing. January 2014. Thermal conductivity of Monolayer Molybdenum Disulfide Obtained from Temperature – Dependent Raman Spectroscopy, ACS Nano. 8, pp. 986–993.
- [12] Rajeev Pankaj Nelapati, Sivasankaran K. (2018). Impact of self-heating effect on the performance of hybrid FinFET. Microelectronics Journal, 76, pp. 63–68.
- [13] L.J. McDaid, S. Hall, P.H. Mellor, W. Eccleston & J.C. Alderman. (1989). Physical origin of negative differential resistance in SOI transistors, Electron. Lett., 25 (13). pp. 827–828.

Сведения об авторах

Атамуратов Атабек Эгамбердиевич, доктор наук (DSc) по физико-математическим наукам, Ургенчский государственный университет, кафедра физики, доцент.

Сапаров Хушнудбек Шарипбаевич, Ургенчский государственный университет, кафедра физики, докторант.

E – mail: xushnudsaparov@gmail.com

Ахмаджон Юсупов, доктор физико-математических наук, профессор кафедры электроники и радиотехники Ташкентского университета информационных технологий имени Аль-Хорезми

E – mail: ayus@mail.ru

Франк Швиерц, PhD. Технологический университет Ильменау.

E – mail: frank.schwierz@tu-ilmenau.de

Таблица 1. Параметры двумерного MoS₂ и параметры моделирования использованные при моделировании переходной характеристики МОП транзистора на основе двумерного MoS₂

Ширина запрещенной зоны (эВ)	Относительная диэлектрическая проницаемость	Подвижность электрона при низком поле, (см ² /В·с)	параметр в зависимости подвижности от поля	Работа выхода электрона, (эВ)	V _{sat} , скорость насыщения носителей, (см/с)	Корректирующий фактор	Эффективная масса (m ₀)
1.8	3	125	2.8	4.82	1x10 ⁷	8	0.463