

ارائه ساختار و بهبود عملکرد دیودهای تونلی تشدیدی یکپارچه مبتنی بر GNR غیرمتمقارن همراه با

غیرفعال سازی هیدروژنی

حسینی، سیدابراهیم¹؛ خوش باطن، مهدی²

¹دانشیار مهندسی برق، دانشکده مهندسی دانشگاه فردوسی، مشهد، chosseini@um.ac.ir

²دانشجوی دکتری مهندسی برق، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، m.khoshbaten@stu.um.ac.ir

چکیده

ساختارهای تشکیل شده از گرافن، به علت خواص الکتریکی و حرارتی مناسبی که از خود نشان داده‌اند، گزینه‌ی مناسبی به منظور جایگزینی در نسل جدید ادوات الکترونیکی می‌باشند. یکی از این ادوات، دیودهای دارای شیب منفی در مشخصه خروجی است؛ که از آن در مدارهای فرکانس بالا و کم مصرف می‌توان استفاده کرد. در این مقاله، یک ساختار غیرمتمقارن دیود تونلی تشدیدی با استفاده از نانونوارهای گرافن (AHP-RTD) که با هیدروژن غیرفعال شده‌اند، پیشنهاد شده است. همچنین اثرات پارامترهای مختلف هندسی و نیز ایجاد عدم تقارن نسبی بر بهبود کمیت PVR، در این مقاله بررسی خواهد شد. شبیه‌سازی‌های کوانتومی توسط معادلات انتقال تابع گرین غیرتعادلی نشان می‌دهد که با تنظیم و ایجاد عدم تقارن نسبی، می‌توان PVR را از 12 تا 21 ارتقا داد.

Proposing and Performance Enhancement of a new Structure of Integrated Resonant Tunneling Diodes Based on Asymmetric Hydrogen-Passivated GNR

Hosseini, Seyyed Ebrahim¹; Khoshbaten, Mahdi²

¹ Associate Professor of Electrical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad,

² PhD student of Electrical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

Abstract

Graphene based electron devices are suitable candidates for future electronics due to excellent electrical properties. Devices with negative differential resistance (NDR) in the output characteristics exhibit potential applications in high frequency and low power electronics. In this paper a non-symmetric resonant tunneling diode (RTD) based on Graphene nano-ribbon (GNR) is proposed. The effect of structural parameters on the device NDR is investigated. Simulations based on NEGF shows that RTD with non-symmetric barriers peak to valley ratio (PVR) of 21 is achieved which is higher than that of symmetric structure.

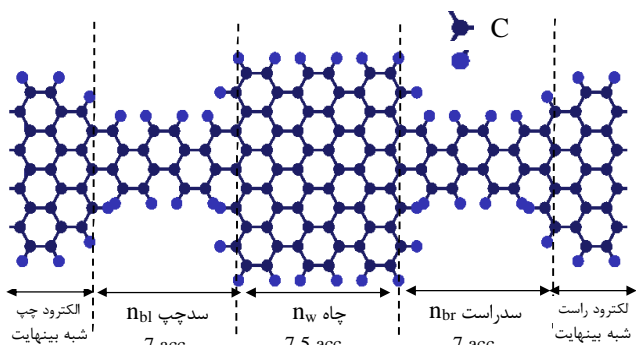
PACS No.: 72, 73, 85

مقدمه

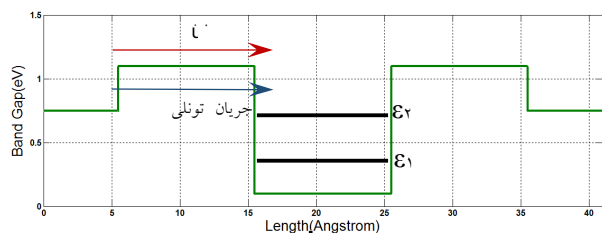
استفاده می‌شود. ایراد چنین ساختارهایی، ابعاد بزرگ و مخصوصا مشکلات ناشی از تماس چند ماده مختلف است که باعث به وجود آمدن نقص‌های سطحی و حالت‌های انرژی ناشی از عدم تطابق اندازه سلول واحد هر ماده می‌شوند.

با وجود گرافن می‌توان چنین ساختارهایی را به صورت یکپارچه اما با ویژگی‌های هندسی (پهنای) متفاوت ایجاد نمود. از جمله کارهای انجام شده در این حوزه، ایجاد سدهای عایق دوگانه با استفاده از زیرلایه‌ای مناسب با گرافن [4-5]، استفاده از

دیودهای تونلی رزونانسی (RTD)¹، به علت امکان کاربردشان در مدارهای فرکانس بالا، توجه بسیاری را به خود جلب کرده اند [3-1] از جمله ویژگی‌های آن‌ها عبارتند از: کم مصرف بودن، قابلیت کار در فرکانس‌های بالا و کاهش پیچیدگی مداری به علت وجود مقاومت منفی (NDR)² [1]. در ساختارهای مرسوم ناهمگون³، برای ساخت چنین دیودی، از اتصال چند نوع نیمه‌هادی با شکاف باند مختلف با ابعاد در حدود چند صد نانومتر



شکل 1: ساختار پیشنهادی به صورت متقارن. $C-H=1.101\text{\AA}$ و $acc=1/42\text{\AA}$



شکل 2: ساختار باند هدایت در حالت تعادل

شکل 2 به خوبی چاه پتانسیل ایجاد شده را نشان می‌دهد. در چاه پتانسیل، سطوح انرژی گسسته می‌شود و براساس ارتفاع این چاه، تعداد سطوح گسسته متفاوت است که فرض بر این است که اولین سطح انرژی بخش غالب جریان را شکل می‌دهد [11]. این فرض با توجه به ارتفاع سد نسبتاً کم ساختار، منطقی است. جریان‌های غالب در کل جریان، جریان گرمایونی و جریان تونلی است. در ولتاژهای بایاس کوچک که سد پتانسیل بزرگی در مقابل عبور الکترون‌ها در باند هدایت وجود دارد، جریان گرمایونی کوچک بوده و قابل صرف نظر است. در این ولتاژهای بایاس، با توجه به طول کوچک GNR، جریان تونلی در هنگامی که انرژی حامل‌های ورودی با دو سطح انرژی چاه پتانسیل مطابقت نمایند، ضریب عبور بالایی را در طیف انتقال به نمایش خواهد گذاشت؛ در بقیه ولتاژها، عبور بسیار کم خواهد بود. این پدیده باعث ایجاد شیب منفی در منحنی مشخصه خواهد گردید.

محاسبات عددی

محاسبات با تقسیم فضای k به تعداد $1 \times 8 \times 64$ به صورت خودسازگار به همراه حل معادله پواسون انجام شده است. با فرض وجود کانال متصل به دو الکتروده شبه بی‌نهایت (چپ و راست)، تابع گرین معوق⁶ به صورت رابطه (1) است.

$$G^r = [(E + i\eta)I - H_{ch} - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (1)$$

ساختارهای نقاط کوانتومی [6] به منظور بهبود شیب، قراردادن دو ساختار گرافن در تعامل با هم به شکل پشته [7] که توسط گیت قابل تنظیم باشد قابل ذکر است [8].

ما در این مقاله، به بررسی ساختاری یکپارچه متشکل از نانونوارهای گرافن با ابعاد هندسی نامتقارن خواهیم پرداخت (AHP-RTD)⁴ و پارامترهای مختلف موثر بر عملکرد و نقش آن در شیب منفی را بررسی می‌کنیم. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از معادلات انتقال کوانتومی توسط تابع گرین غیرتعادلی انجام شده است. چنین ساختار هندسی را می‌توان به صورت آزمایشگاهی ایجاد نمود [9]. غیرفعال‌سازی با هیدروژن (شغال شدن پیوندهای آزاد کربن در لبه‌های نانوریون) به علت تغییر شکاف باند، بر انتقال الکترون تاثیر دارد و باعث کاهش ⁵PVR می‌شود. بنابراین می‌بایست چنین عاملی در شبیه‌سازی‌ها در نظر گرفته شود.

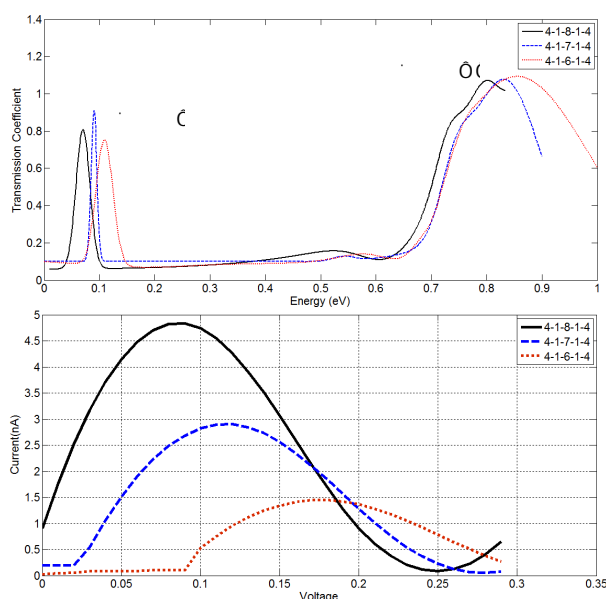
مقاله به صورت زیر سازماندهی شده است. در بخش دوم به بررسی ساختار پیشنهادی، بخش سوم روش محاسباتی و پارامترهای آن و در بخش چهارم و پنجم، به بررسی نتایج و ارائه نتیجه‌گیری خواهیم پرداخت.

ساختار پیشنهادی

ساختار پیشنهادی (AHP-RTD) متشکل از GNR با دو سد و یک چاه پتانسیل است، که با هیدروژن غیرفعال شده‌اند. شکل 1 نوع متقارن را با مشخص‌سازی اندازه‌ها بر حسب بردار واحد به نمایش می‌گذارد. الکترودها نیز از جنس گرافن و با فرض نیمه-بی‌نهایت بودن در شبیه‌سازی‌ها به کار گرفته شده است. همچنین جهت بهبود نسبت جریان قله به دره می‌توان ساختار را با غیرمتقارن سازی بهبود داد و به مشخصه بهتری دست پیدا نمود. ضریب عدم تقارن را با n_{br} / n_{bl} یا پهنای سد راست به سد چپ مشخص می‌کنیم. نوار هدایت این ساختار در شکل 2 نمایش داده شده است. البته باید در نظر داشت که رابطه‌ی شکاف باند با عرض گرافن خطی نیست و حساسیت بسیاری به شرایط مرزی و عرض ساختار موجود دارد. به طور کلی، ساختارهایی با تعداد حلقه‌های کربنی $3p+2$ (در اینجا عدد صحیح است)، دارای شکاف باند کمی هستند [10]. اغلب بر اساس آزمایشات انجام شده، حداقل نیاز به شکاف باند 0.4 الکترون-ولت برای عملکرد مناسب قطعه ضروری است.

حضور پیک انتقال در حدود انرژی 0/07 تا 1/2 الکترون-ولت نشان دهنده‌ی سطح انرژی چاه پتانسیل است. با رسیدن بایاس ورودی به این پتانسیل، قله‌ی جریانی در خروجی خواهیم داشت و سپس جریان کاهش خواهد یافت. بدین ترتیب شیب منفی در مشخصه ظاهر خواهد شد.

با کاهش اندیس چاه پتانسیل (کاهش عرض) از مقدار 8 به 6، به دلیل افزایش ارتفاع سد چاه، تعداد سطوح گسسته کاهش یافته و مقدار سطح انرژی درون چاه [11] افزایش می‌یابد. این امر به نوبه خود باعث افزایش ولتاژی خواهد شد که جریان به قله‌ی خود می‌رسد.



شکل 3: نمودار ضریب عبور (بالا) و مشخصه جریان ولتاژ (پائین). اندیس 4-1-8-1-4 از چپ به راست: اندیس تعداد حلقه‌های کربن مربوط به الکتروژن چپ-سد چپ-چاه پتانسیل-سد راست-الکتروژن راست.

با کاهش بیشتر اندیس به مقدار 5 و 4، به دلیل شکاف باند مساوی با همان مقادیر اندیس‌های 8 و 7، نمودارها تکرار می‌گردد که برای وضوح رسم نشده است. کاهش بیشتر این اندیس، اختلاف پتانسیل را از 0,4 الکترون-ولت کمتر کرده و باعث از بین رفتن شیب منفی می‌گردد. مقادیر PVR برای این سه اندیس به ترتیب برابر با 10، 12/5 و 4/7 هستند. به عبارت دیگر، با کوچک شدن ساختار، مقدار دره و قله جریان کاهش یافته، ولی PVR افزایش می‌یابد. در نتیجه یک بهینه‌سازی برای دست یافتن به بهترین حالت قله جریان، دره جریان و مقدار PVR می‌تواند انجام

در رابطه (1)، η کمیت بی‌نهایت کوچک، G^r ماتریس همیلتونی، Σ انرژی الکترودها هستند. Σ ، پهن‌شدگی⁷ را به عنوان نتیجه‌ای از کوپل بین کانال و الکترودها توصیف می‌کنند که به صورت رابطه (2) تعریف می‌گردند:

$$\Sigma_L = \beta_L^+ g_L \beta_L \quad \Sigma_R = \beta_R^+ g_R \beta_R \quad (2)$$

در رابطه (2)، g تابع گرین سطحی الکترودها و β ماتریس کوپل است. احتمال انتقال حامل‌ها می‌تواند به صورت رابطه (3) محاسبه شود:

$$T(E) = \text{Trace}[\Gamma_L G^r \Gamma_R G^{r+}] \quad (3)$$

$$\Gamma_{L,R} = i[\Sigma_{L,R} - \Sigma_{L,R}^+]$$

که Γ تابع پهن‌شدگی است.

در مدل TB برای گرافن، سه پیوند σ ، تشکیل پیکربندی sp^2 را می‌دهند. به نحوی که ارییتال‌های $2p_z$ عمود بر صفحه گرافن هستند که دارای پیوندهای کووالانسی π می‌باشند. جهت تعیین خواص الکترونیکی، از همیلتونی TB الکترون‌های پیوندی π به صورت رابطه (4) استفاده شده است:

$$\hat{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \quad (4)$$

در معادله بالا، $\langle i,j \rangle$ ، مشخص کننده اتم‌های نزدیک‌ترین همسایه‌ی کربن-کربن یا کربن-هیدروژن هستند. t نیز پارامتری است که وابسته به جنس هر کدام از i و j هاست که به صورت زیر تعیین شده است [10].

جدول 1: پارامتر t

tcc	tHH	tCH
2,35	0	1,63

در این جدول، t_{xy} ، پارامتر جهش⁸ برای همسایه نزدیک اتم‌های x و y هستند. x و y نشان دهنده‌ی اتم‌های کربن و هیدروژن می‌باشند. در معادلات، در نظر گرفتن حالت پرودیکی در جهت عمود بر انتشار صحیح نبوده و باید سطح فرمی مربوط به هیدروژن قرار داده شود.

نتایج

ابتدا با ثابت نگه‌داشتن پهنای سد و چاه و فرض ساختار متقارن، با تغییر ارتفاع چاه پتانسیل (تغییر عرض نانوریون)، به بررسی نمودار انتقال و منحنی مشخصه خروجی می‌پردازیم. اندیس‌ها در شکل 3 ساختار را به صورت خلاصه معرفی می‌کنند.

یابد. این بهبود به این علت ناشی می‌شود که با وجود مقادیر گسسته درون چاه پتانسیل و اثر پهن‌شدگی، مقداری نشتی به صورت جریان تونلی در ساختار وجود دارد که با افزایش پهنای سد می‌توان این مقدار را کاهش داد (کاهش دره جریان). اما در ولتاژهای بایاس تشدید، اثر این پهنای بر مقدار عبور الکترون‌ها بسیار ناچیز است (کاهش قله). البته این اثر بر مقدار دره شاخص‌تر است و در مجموع مقدار PVR را می‌تواند بهبود دهد.

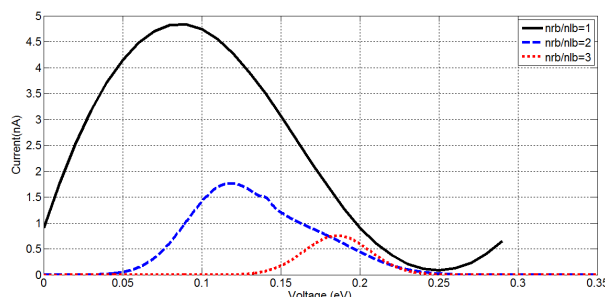
مرجع‌ها

- [1] L.L. Chang, E.E. Mendez, C. Tejedor: "Resonant Tunneling in Semiconductors: Physics and Applications"; plenum press. (1991)
- [2] N.J. Hoboken: "Resonant-Tunneling Diode, in Complete Guide to Semiconductor Devices"; 2th edition, John Wiley & Sons, Inc. (2009)
- [3] H. Mizuta, T. Tanoue: "The Physics and Applications of Resonant Tunneling Diodes"; Cambridge University Press.
- [4] V.H. Nguyen, F. Mazzamuto, A. Bournel, P. Dollfus; "Resonant tunneling diode based on graphene/h-BN heterostructure";
- [5] F. Al-Dirini, M.H. Farugue, N.A. Avanapillai, E. Skafidas; "All-Graphene Planar Double Barrier Resonant Tunneling Diodes"; *journal of the electron devices society* 2, No. 5 (2014) 118-122.
- [6] F. Al-Dirini, A.M. Mahmood, M.H. Farugue, N. Thas, E. Skafidas; "All-Graphene Planar Double-Quantum-Dot Resonant Tunneling Diodes"; *journal of the electron devices society* 4, No. 1 (2016) 30-39.
- [7] B. Fallahazad, et al; "Gate-Tunable Resonant Tunneling in Double Bilayer Graphene Heterostructures"; *Nano Lett.*, 25(2015) 1-4.
- [8] J. Gaskell, et al; "Graphene-hexagonal boron nitride resonant tunneling diodes as high-frequency oscillators"; *Applied Physics Letters* 107, 103105 (2015) 1-4.
- [9] L. Tapasztó, et al.; "Tailoring the atomic structure of graphene nanoribbons by scanning tunnelling microscope lithography"; *nature nanotechnology* 3, (2008) 397-401.
- [10] M. Noei, et al.; "A Computational Study on the Electronic Properties of Armchair Graphene Nanoribbons Confined by Boron Nitride"; *Japanese Journal of Applied Physics* 51, 035101 (2012) 1-6.
- [11] Supriyo Datta: "Quantum Transport: Atom to Transistor"; Cambridge Press (2005)

پانوشته‌ها

1. Resonance Tunneling Diode
2. Negative Differential Resistance
3. HeteroStructure
4. Asymmetric Hydrogen Passivated RTD
5. Peak to Valley Ratio
6. Retarded None Equilibrium Green's Function
7. Broadening
8. Hopping

گردد. در گام بعد، با تغییر پهنای سد سمت راست نسبت به سمت چپ یا n_{br}/n_{bl} ، با مقدار 2 و 3، به بررسی عدم تقارن بر مشخصه خروجی خواهیم پرداخت. نسبت با مقدار 1 یا همان حالت متقارن، به منظور مقایسه افزوده شده است (شکل 4).



شکل 4: مشخصه جریان-ولتاژ برای ساختار نامتقارن برای چند مقدار نسبت پهنای سد سمت راست بر پهنای سد سمت چپ

با افزایش پهنای سد، عبور الکترون‌ها در پتانسیل‌های بالاتری برای غلبه بر طول بیشتر اتفاق می‌افتد. همین‌طور کنترل روی حفره‌های تزریق شده از الکترون‌ها سمت راست افزایش می‌یابد و طبق ضریب عبور، حامل‌های اقلیت حفره از سمت راست کاهش می‌یابد. این دو رویه باعث ایجاد دو اثر می‌گردد. (1) افزایش پتانسیل: این پتانسیل به مرور به سمت پتانسیل ایجاد کننده‌ی جریان گرمایونی پیش می‌رود. (2) مقدار جریان قله و دره نیز هم‌زمان کاهش می‌یابند. منتها در کل اثر کاهش جریان دره بر شاخص PVR بیشتر است و مقادیر چنین کمیتی را به ترتیب به 17 و 22 افزایش می‌دهد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، دیود با شیب منفی در منحنی مشخصه جریان-ولتاژ به صورت یکپارچه توسط نانو نوارهای کربنی با غیرفعال‌سازی توسط هیدروژن با ابعاد زیر 5 نانومتر بررسی شده است. شبیه‌سازی‌های کوانتومی توسط معادلات انتقال غیرتعادلی گرین نشان می‌دهد که در حالت سدهای متقارن می‌توان به PVR از 5 الی 12 دست یافت. همچنین با غیرمتقارن‌سازی ساختار به صورت نسبی، این کمیت می‌تواند در بهترین حالت تا 21 ارتقا