



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-2-14-20>

Оригинальная статья
Original paper

УДК 538.91, 539.143.5

РЕЗИСТОРНАЯ МОДЕЛЬ СЛОИСТЫХ ПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР

ВАН ТУНГ ФАМ, Е. Б. ЧУБЕНКО, В. Е. БОРИСЕНКО

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
(г. Минск, Республика Беларусь)*

Поступила в редакцию 12.10.2022

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2023
Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2023

Аннотация. Предлагается электрические свойства пленочных структур, состоящих из двумерных слоев, образованных нанокристаллическими зернами полупроводника, моделировать эквивалентной схемой. В данной схеме соединенные определенным образом резисторы показывают сопротивление токопроводящих каналов в металлических контактах к ним, материала зерен, межзеренных и межслоевых потенциальных барьеров. Численным моделированием установлено, что распределение тока по площади контактов существенно неоднородно. Плотность тока на периферии контактов может в 3–6 раз превышать этот показатель в их центре. Величины же локальных токов и их распределение по объему слоистых пленок зависят от их зернистости, количества слоев и электронных свойств потенциальных барьеров между зернами и слоями.

Ключевые слова: моделирование, слоистая пленка, эквивалентная схема, резистор, потенциальный барьер, нитрид углерода, нанокристалл.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Благодарность. Авторы признательны А. Л. Данилюку за полезное обсуждение предложенной модели и результатов расчетов по ней. Работа выполнена в рамках проекта БРФФИ Ф22-114.

Для цитирования. Ван Тунг Фам. Резисторная модель слоистых пленочных структур / Ван Тунг Фам, Е. Б. Чубенко, В. Е. Борисенко // Доклады БГУИР. 2023. Т. 21, № 2. С. 14–20. <http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-2-14-20>.

RESISTOR MODEL OF LAYERED FILM STRUCTURES

VAN TUNG PHAM, EVGENY B. CHUBENKO, VICTOR E. BORISENKO

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus)

Submitted 12.10.2022

Abstract. Electric properties of film structures consisting of two-dimensional layers, composed by nanocrystalline grains of a semiconductor are proposed to be modeled with an equivalent scheme, in which resistors indicate electrical resistance of current channels in metallic contacts, grain material, potential barriers between grains and layers. Numerical simulation within the model has shown that there is a nonuniform current distribution over the area of the contacts. Current density at their edges can be 3–6 times higher than in the center. Local currents and their distribution in the film bulk are determined by the grain structure of the film, number of the layers, electronic properties of the barriers between grains and layers.

Keywords: modeling, layered film, equivalent scheme, resistor, potential barrier, carbon nitride, nanocrystal.

Conflict of interests. The authors declare no conflict of interests.

Gratitude. The authors thank A. L. Daniluk for fruitful discussion of the proposed model and numerical results obtained. The work was performed within the grant BRFFR F22-114.

For citation. Van Tung Pham, Chubenko E. B., Borisenko V. E. (2023) Resistor Model of Layered Film Structures. *Doklady BGUIR*. 21 (2), 14–20. <http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-2-14-20> (in Russian).

Введение

Открытие на примере графена [1] принципиальной возможности получать и использовать в электронике, фотонике, фотокатализе двумерные (2D) слоистые структуры стимулировало исследования аналогичных по структуре материалов. Их перечень быстро пополнили дихалькогениды переходных металлов, нитрид бора, графитоподобный нитрид углерода ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) и другие материалы с гексагональной кристаллической решеткой [2, 3]. Большинство этих материалов проявляют полупроводниковые свойства в объемном состоянии. В плоскости слоев таких материалов соседние атомы образуют достаточно сильные, обычно ковалентные связи, в то время как между отдельными слоями мономолекулярной толщины действуют слабые силы Ванн-дер-Вальса. Это определяет электронные, оптические, механические и прочие свойства данных структур. Управление ими представляет актуальную задачу.

Цель проведенных исследований – развитие представлений о протекании электрического тока в многослойных пленочных структурах путем их моделирования с использованием резисторов. При этом впервые учтено наличие отличающихся по электрическим свойствам межзеренных границ в плоскости слоев и межслойных границ, образующих потенциальные барьеры для подвижных носителей заряда.

Модель слоистых пленочных структур

Моделируемая слоистая пленочная структура в двумерном представлении показана на рис. 1. В данной резисторной модели используются два типа блоков: проводящий и изолирующий. Проводящие блоки будут работать как резистор с низким сопротивлением, а изолирующие – как резистор с высоким сопротивлением. Предполагается, что все слои структуры состоят из ориентированных в плоскости контактирующих друг с другом монокристаллических зерен полупроводника. На их границах из-за нарушения периодичности расположения собственных атомов материала или адсорбции примесей образуются межзеренные потенциальные барьеры, влияющие на протекание электрического тока в плоскости каждого слоя.

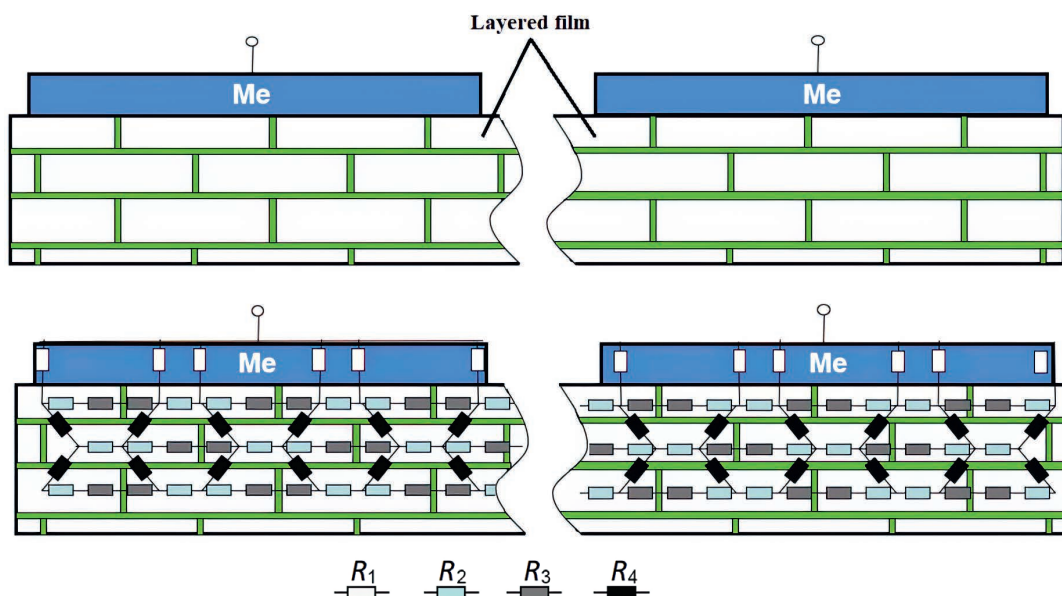


Рис. 1. Слоистая пленочная структура с межзеренными и межслойными границами и ее эквивалентная электрическая схема

Fig. 1. A layered film structure with intergrain and interlayer boundaries and its equivalent electrical circuit

Было принято, что все зерна в слое имеют одинаковую толщину, вследствие чего межслойные границы, возникающие за счет взаимного смещения слоев и возможной адсорбции примесей, оказываются параллельными поверхности пленки. Качественное подтверждение обоснованности таких представлений получено при анализе поперечного сечения многослойных пленок $g\text{-C}_3\text{N}_4$, сформированных методом химического осаждения из газовой фазы как на аморфных стеклянных, так и на монокристаллических кремниевых подложках [4]. Электрические свойства каждого типа границ принимали одинаковыми во всей структуре. Протекание тока в рассматриваемой структуре анализировали в плоскости пленки, используя омические контакты из проводника (Me) на ее поверхности. В этом случае подложку считали изолирующей. Анализ протекания тока перпендикулярно плоскости пленки проводили в предположении хороших токопроводящих свойств подложки и наличия к ней омического контакта.

Предлагаемая эквивалентная схема моделируемой многослойной пленочной структуры (рис. 1) построена из резистивных элементов, отражающих: R_1 – сопротивление токопроводящих каналов из металлического контакта в первый поверхностный слой пленки (предполагается, что количество таких каналов равно $2n$, где n – количество монокристаллических зерен полупроводника, контактирующих с металлическим контактом); R_2 – сопротивление материала кристаллического зерна; R_3 – сопротивление межзеренного барьера; R_4 – сопротивление межслойного барьера. Межзеренные и межслойные барьеры считали симметричными по своим электрическим свойствам. Сопротивления межслойного барьера R_4 и зерна R_2 выбирали равными половинам соответствующих полных величин для учета перекрытия зерен в соседних слоях. В первом приближении все названные сопротивления не зависели ни от приложенного к ним напряжения, ни от протекающего через них тока.

Расчет токов, протекающих через элементы предложенной эквивалентной схемы, осуществляли в программном комплексе Micro-Cap 12. При этом, опираясь на оценки электрических свойств полупроводников и полупроводниковых наноструктур, принимали $R_1 = 0,01$ Ом, $R_2 = 10,0$ кОм. Количество каналов проводимости n с сопротивлением R_1 между металлическим контактом и пленкой изменяли от 2 до 12. Для оценки роли межзеренных и межслойных барьеров сопротивления R_3 и R_4 задавали равными 100, 200 и 300 кОм в сочетаниях, обеспечивающих $R_3 < R_4$, $R_3 = R_4$ или $R_3 > R_4$. Количество межзеренных границ в одном слое между двумя поверхностными контактами принимали равным 14, а количество слоев N в пленке изменяли от 1 до 12. Расчеты выполняли для фиксированного постоянного напряжения 10 В между двумя поверхностными контактами при протекании тока в плоскости пленки или между поверхностным контактом и проводящей подложкой при протекании тока перпендикулярно плоскости пленки.

Результаты исследований и их обсуждение

Ввиду заложенной в модели симметричности электрических свойств всех элементов многослойной пленки, рассчитанные величины протекающих через них токов не зависели от полярности приложенного к контактам напряжения. Распределение токов в многослойной пленке под и вблизи поверхностного контакта к ней при приложении напряжения между двумя поверхностными контактами иллюстрирует рис. 2. Токи в горизонтальных цепях указывают направление, в котором располагается второй, не показанный на рисунке, контакт. Величины и направления токов при приложении напряжения между двумя поверхностными контактами приобретают особенности, связанные с влиянием как межзеренных (через R_3), так и межслойных барьеров (через R_4).

В распределении токов заметны две характерные особенности. Во-первых, максимальный ток через контакт протекает со стороны, ближайшей ко второму поверхностному контакту. Величина этого тока в пять-шесть раз больше тока, проходящего через соседние со стороной области. Во-вторых, направления протекания межслойных токов могут отличаться в соседних областях, как это отмечено на рис. 2. Причем количество каналов с инверсным протеканием тока увеличивается при сопротивлении межзеренных барьеров, превышающем сопротивление межслойных барьеров ($R_3 < R_4$).

В самой пленке, как можно было и ожидать, наибольший ток протекает в первом поверхностном слое. Расчетные данные, приведенные на рис. 3, показывают, что его величина существенно зависит как от межзеренного сопротивления R_3 , так и от количества каналов проводимости n , по которым носители заряда попадают из контакта в этот слой.

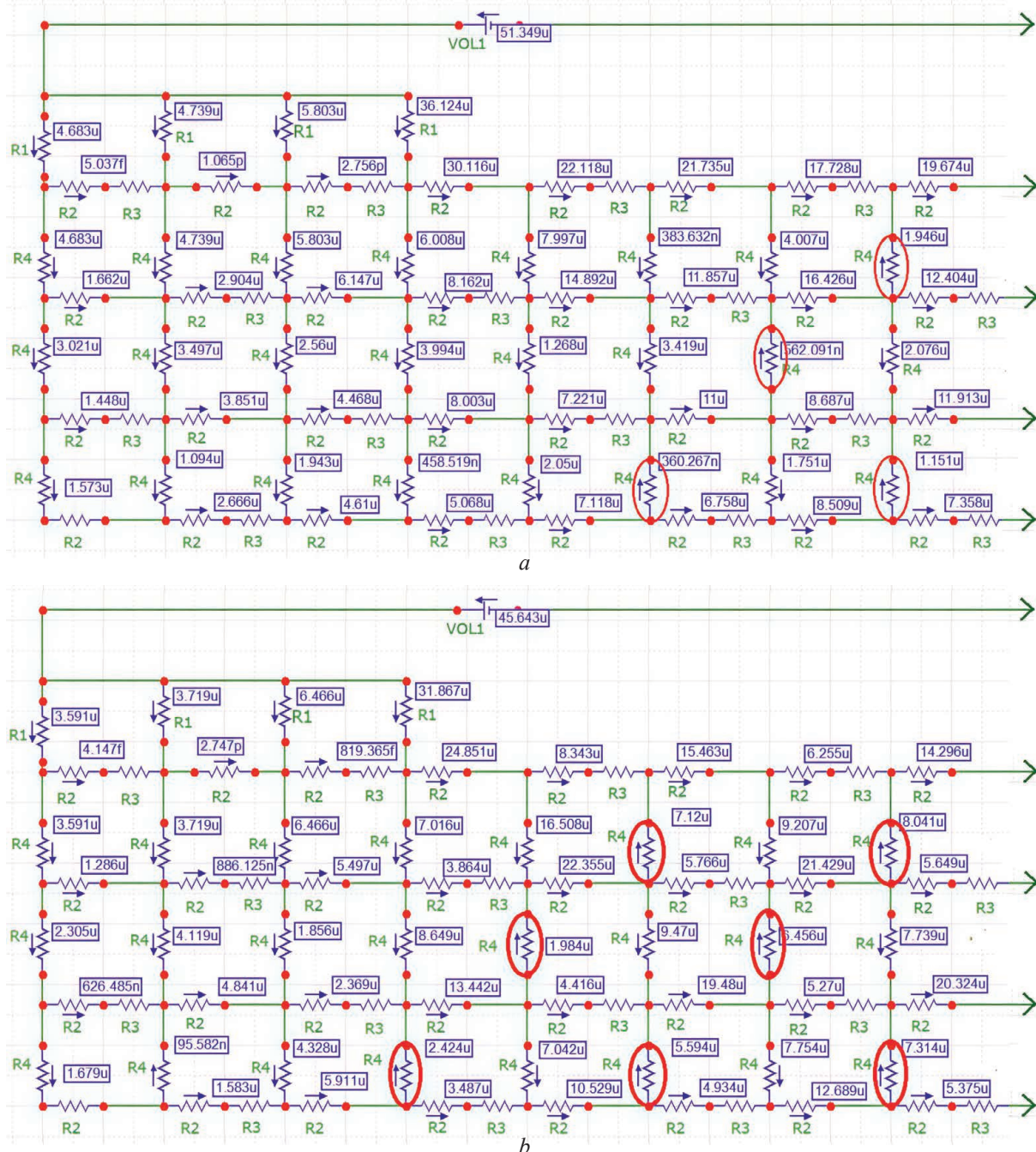


Рис. 2. Распределение токов в области одного из контактов к трехслойной пленке с 12 межзеренными границами в каждом слое при наличии четырех каналов поступления носителей заряда из контакта с сопротивлением R_1 и приложении 10 В между двумя поверхностными контактами: *a* – $R_2 = 10$ кОм, $R_3 = 100$ кОм, $R_4 = 300$ кОм; *b* – $R_2 = 10$ кОм, $R_3 = 300$ кОм, $R_4 = 100$ кОм ($\mu = \mu\text{A}$; $n = \text{nA}$; $p = \text{pA}$; $f = \text{fA}$)
Fig. 2. Current distribution around one of the contacts to three-layers film with 12 intergrain boundaries in each layer and 4 channels for charge carrier from the contact with resistance initiated R_1 by 10 V bias between two surface contacts: *a* – $R_2 = 10$ k Ω , $R_3 = 100$ k Ω , $R_4 = 300$ k Ω ; *b* – $R_2 = 10$ k Ω , $R_3 = 300$ k Ω , $R_4 = 100$ k Ω ($\mu = \mu\text{A}$, $n = \text{nA}$, $p = \text{pA}$, $f = \text{fA}$)

Поскольку величина n коррелирует с количеством кристаллических зерен материала пленки, находящихся под контактом, можно заключить, что зернистость пленки является важным фактором, контролирующим ток в поверхностном слое. В слоях, лежащих под поверхностным слоем, величины протекающих токов уменьшаются в несколько раз. Тем не менее по мере увеличения количества слоев N общий ток возрастает и достигает насыщения при $N = 6\text{--}12$, как это видно из рис. 4. Следует отметить, что в случае однослойного материала резисторы R_4 в эквивалентную схему не включаются, а, следовательно, не влияют на протекающий ток.

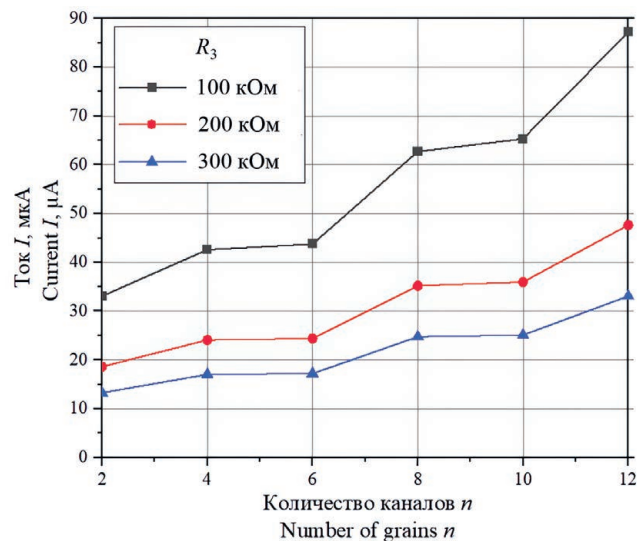


Рис. 3. Зависимость величины тока, протекающего в первом поверхностном слое четырехслойной пленки, от n с сопротивлением R_1 между металлическим контактом и пленкой при различных сопротивлениях R_3 и напряжении 10 В, приложенном между двумя поверхностными контактами ($R_4 = 200 \text{ k}\Omega$)
Fig. 3. Dependence of current flowing in the first surface layer of a four-layers film as a function of the number of n conducting channels with the resistance R_1 between metallic contact and the film with different intergrain resistances R_3 and 10 V bias between two surface contacts ($R_4 = 200 \text{ k}\Omega$)

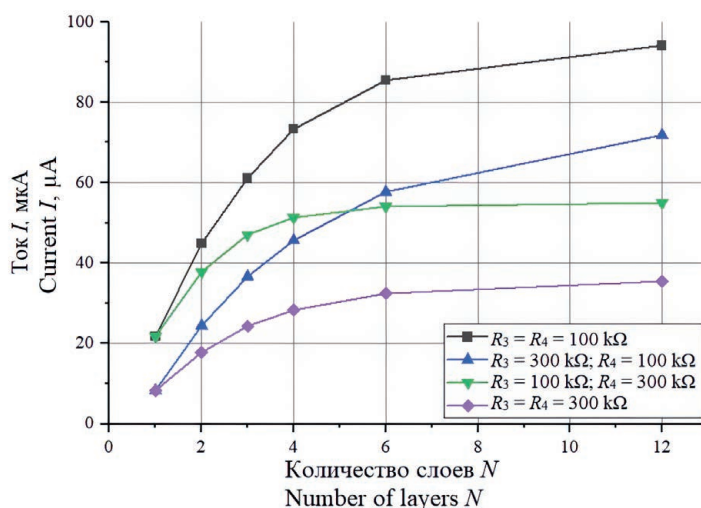


Рис. 4. Зависимость общего тока, протекающего в плоскости слоистой пленки, от количества слоев N при напряжении 10 В для различных R_3 и R_4
Fig. 4. The current flowing in the plane of the layered film as a function of the number of layers N at 10 V for different R_3 and R_4

Значение тока насыщения зависит как от абсолютных значений R_3 и R_4 , так и от их соотношения. Очевидно, что при $R_3 > R_4$, по сравнению со случаем $R_3 < R_4$, большее количество слоев включается в перенос носителей заряда, создавая параллельные каналы для протекания тока. Это не только приводит к возрастанию тока насыщения, но и делает само насыщение с увеличением количества слоев менее выраженным. Величина тока, протекающего перпендикулярно плоскости пленки, т. е. при приложении напряжения между поверхностным контактом и токопроводящей подложкой, контролируется исключительно величиной межслоевого сопротивления R_4 и уменьшается с увеличением количества слоев. Распределение токов в такой структуре показано на рис. 5. Как и в случае протекания тока в плоскости пленки, наибольшая его часть приходится на периферийную область верхнего контакта. Здесь его величина в несколько раз больше, чем в центральной области этого контакта.

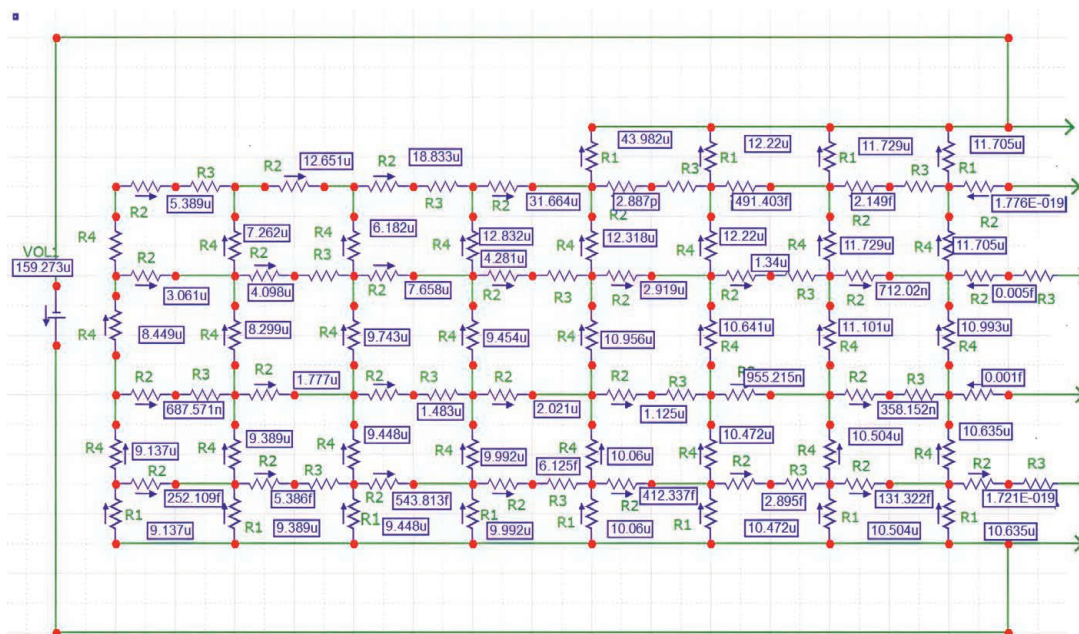


Рис. 5. Распределение токов в области шестислойной пленки при наличии восьми каналов поступления носителей заряда из контакта с сопротивлением R_1 и приложении 10 В между двумя контактами ($R_2 = 10$ кОм, $R_3 = 100$ кОм, $R_4 = 300$ кОм); u, n, p, f – то же, что на рис. 2

Fig. 5. Current distribution in the region of a six-layers film with 8 channels for charge carriers to enter from the top contact with resistance R_1 and 10 V between two contacts ($R_2 = 10$ k Ω , $R_3 = 100$ k Ω , $R_4 = 300$ k Ω); u, n, p, f – the same as Fig. 2

Общий же ток зависит, главным образом, от количества токопроводящих каналов n и количества слоев N в пленке, как это проиллюстрировано на рис. 6.

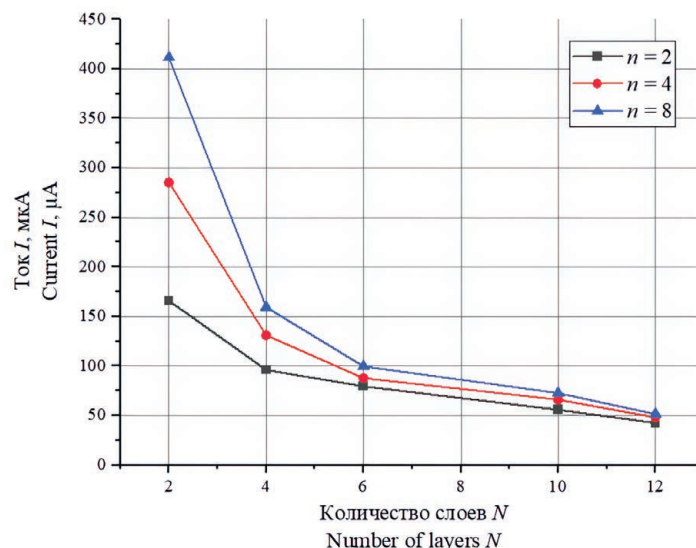


Рис. 6. Зависимость тока, протекающего перпендикулярно плоскости пленки ($R_2 = 10$ кОм, $R_3 = 100$ кОм, $R_4 = 300$ кОм), от N при различных n

Fig. 6. Current flowing perpendicular to the film plane ($R_2 = 10$ k Ω , $R_3 = 100$ k Ω , $R_4 = 300$ k Ω) in dependence on the number N for different numbers n

Обращает на себя внимание и боковое растекание тока в областях пленки, лежащих за пределами вертикальной проекции на них верхнего контакта. Размер этих областей зависит от зернистости пленки, коррелирующей с n , и количества слоев N в ней.

Заключение

Расчеты, проведенные в рамках предложенной резисторной модели, процесса токопереноса в пленках, состоящих из двумерных слоев, образованных нанокристаллическими зернами полупроводника, показали, что наибольшую плотность тока следует ожидать на периферии контактов к ним. В этой связи контакты круглой формы или, по крайней мере, со скругленными краями, являются наиболее предпочтительными для практического использования. Величины же токов и их распределение по объему таких пленок существенно зависят от их зернистости, количества слоев и электронных свойств межзеренных и межслоевых потенциальных барьеров. Представление этих барьеров нелинейными элементами эквивалентной схемы позволит сделать следующий шаг в определении и понимании статических и динамических электрических свойств такого рода структур.

References

1. Novoselov K. S. (2005) Two-Dimensional Atomic Crystals. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 102 (30), 10451–10453. DOI: 10.1073/pnas.0502848102.
2. Wang Y., Wang L., Zhang X., Liang X., Feng Y., Feng W. (2021) Two-Dimensional Nanomaterials with Engineered Bandgap: Synthesis, Properties, Applications. *Nano Today.* 37 (101059). DOI: 10.1016/j.nantod.2020.101059.
3. Wang Y., Liu L., Ma T., Zhang Y., Huang H. (2021) 2D Graphitic Carbon Nitride for Energy Conversion and Storage. *Adv. Funct. Mater.* 31 (34), 2102540 (36 pages). DOI: 10.1002/adfm.202102540.
4. Chubenko E. B., Kovalchuk N. G., Komissarov I. V., Borisenko V. E. (2022) Chemical Vapor Deposition of 2D Crystallized $g\text{-C}_3\text{N}_4$ Layered Films. *J. Phys. Chem. C.* 126 (9), 4710–4714. DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c10561.

Вклад авторов / Authors' contribution

Авторы внесли равный вклад в написание статьи / The authors contributed equally to the writing of the article.

Сведения об авторах

Ван Тунг Фам, аспирант кафедры микро- и нанoeлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

Чубенко Е. Б., к. т. н., доцент, доцент кафедры микро- и нанoeлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

Борисенко В. Е., д. ф.-м. н., профессор, профессор кафедры микро- и нанoeлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,
г. Минск, ул. П. Бровки, 6
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники
E-mail: v.tu2103@gmail.com
Ван Тунг Фам

Information about the authors

Van Tung Pham, Postgraduate at the Department of Micro- and Nanoelectronics of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Chubenko E. B., Cand. of Sci., Associate Professor, Associate Professor at the Department of Micro- and Nanoelectronics of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Borisenko V. E., Dr. of Sci. (Phys. and Math.), Professor, Professor at the Department of Micro- and Nanoelectronics of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,
Minsk, P. Brovki St., 6
Belarusian State University
of Informatics and Radio Electronics
E-mail: v.tu2103@gmail.com
Van Tung Pham