



# مطالعه نانوترانزیستور اثر میدان-خازن منفی بر پایه ماده فروالکتريک دو بعدی $\text{In}_2\text{Se}_3$

مریم سلیمانی | مهدی پورفتح\*

دانشکده مهندسی برق، دانشگاه تهران، تهران، ایران

**چکیده:** این پژوهش، مطالعه‌ای بر نانوترانزیستور اثر میدان-خازن منفی بر پایه ماده فروالکتريک دو بعدی  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  به منظور کاهش تاب زیر آستانه ارائه می‌دهد. گذار فاز و همچنین دمای کوری تک لایه  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مونت-کارلو بررسی شد. محاسبات نشان داد دمای کوری  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  بالاتر از دمای اتاق است و بنابراین این ماده انتخابی برای کاربرد در نانو ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی امیدوار کننده است. در ادامه، مشخصات ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی با کانال  $\text{MoS}_2$  و ماده فروالکتريک  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  با استفاده از استخراج ثابت‌های لاندائو این فروالکتريک بررسی شد. در این ترانزیستور تاب زیر آستانه در حدود  $27\text{--}59\text{ mV/dec}$  برای فروالکتريک با ضخامت  $5\text{--}25\text{ nm}$  بدست آمد، که می‌توان با استفاده از لایه عایق نازک‌تر با مقادیر بالای  $K$  تاب زیر آستانه را کاهش بیشتری داد.

**واژگان کلیدی:** نانوترانزیستور اثر میدان-خازن منفی، دمای کوری، فروالکتريسیته، گذار فاز، مواد دو بعدی،  $\text{In}_2\text{Se}_3$ .

pourfath@ut.ac.ir

برای افزایش نسبت جریان حالت روشن به خاموش، لازم است شیب ناحیه زیرآستانه بیشتر باشد که معادل کم بودن تاب زیر آستانه است. در این مقاله، با استفاده از نانو ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی شیب ناحیه زیر آستانه را افزایش می‌دهیم که به بوسیله آن بتوان ولتاژ منبع را کاهش و در نتیجه در توان دینامیکی ترانزیستورها صرفه‌جویی شود. ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی که ماده فروالکتريکی مضاعف بر دروازه خود دارد، بدین منظور استفاده می‌شود [۱-۳]. ساختار ذکر شده معمولاً به دو صورت وجود دارد: ساختار فلز-فروالکتريک-عایق-نیم‌رسانا [۴] و ساختار فلز-فروالکتريک-فلز-عایق-نیم‌رسانا [۵] که در این نوع لایه فلز میانی پتانسیل سطح یکنواختی فراهم می‌کند که برای شبیه‌سازی قطبش‌پذیری و تعیین ولتاژ درونی در آزمایش مؤثر است و چگالی بار مشابهی را بر سطح فروالکتريک

## ۱- مقدمه

افزایش تعداد ترانزیستورهای موجود بر مدارهای مجتمع امروزی دچار محدودیت هایی است. یکی از عوامل محدودیت این است که با افزایش چگالی ترانزیستورها در سطح یک مدار مجتمع، توان اتلافی که به حرارت تبدیل می‌شود، افزایش شدیدی می‌یابد. در صورتیکه که ولتاژ منبع کاهش یابد، توان مصرفی کاهش می‌یابد، ولی یکی از موانع کاهش ولتاژ منبع، زیاد بودن تاب ناحیه زیر آستانه<sup>۱</sup> (SS) است. در دمای اتاق مقدار کمینه تاب زیر آستانه برابر  $64\text{ mV/dec}$  است. در عمل به دلیل کوچک بودن خازن دروازه در مقابل خازن کانال، تاب زیر آستانه عموماً بیشتر از این مقدار است که برای عملکرد افزاره نامطلوب است. به عبارتی

<sup>1</sup> Subthreshold swing



ابتدا دینگ [۲۶] و همکارانش به صورت نظری وجود قطبش الکتریکی در خارج و داخل صفحه  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  را در دمای اتاق پیش‌بینی کردند که پس از آن به صورت تجربی این پیش‌بینی تایید شد [۲۷-۲۸]. پس از آن، کیو [۲۹] و همکارانش تغییر قطبش فرو الکتریک و حلقه پسماند در دمای اتاق را برای این ماده مشاهده نمودند و ساختار دو بعدی آن (در حدود تک‌لایه) را به عنوان نازک‌ترین ماده فروالکتریک معرفی کردند.

اگرچه  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  به عنوان یک نامزد امید بخش برای کاربردهای متفاوت مورد مطالعه قرار گرفته است، اما هنوز رفتار گذار فاز در این ماده به منظور کاربرد در ترانزیستور اثرمیدان-خازن منفی مورد بررسی واقع نشده است. در اینجا رفتار گذار فاز  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  با استفاده از محاسبات اصول اولیه بررسی شده و ثابت‌های لاندائو در طی گذار فاز استخراج شده است. همچنین دمای کوری با استفاده از شبیه‌سازی مونت-کارلو و اصول اولیه-دینامیک مولکولی به دست آمده است. در پایان، با مدل‌سازی ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی قابلیت فروالکتریک  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  برای بهبود عملکرد ترانزیستور بررسی شده است.

## ۲- روش محاسبات

در این پژوهش، محاسبات نظریه تابعی چگالی در چهارچوب فرمول‌بندی تابع موج تخت [۳۰-۳۱] با استفاده از بسته شبیه‌سازی VASP<sup>۲</sup> [۳۲] انجام شده است. بهینه‌سازی ساختاری و محاسبه خواص الکترونیکی  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  با استفاده از تقریب گرادیان تعمیم یافته برای جامدات GGA-PBEsol [۳۳] انجام شده است. به عنوان حد همگرایی محاسبات خودسازگار، نیروهای بر اتم‌ها کمتر از  $0.001 \text{ eV}/\text{\AA}$  در نظر گرفته شده‌اند. انرژی قطع  $500 \text{ eV}$  و مش بندی  $1 \times 12 \times 12$  در فضای  $k$  برای نمونه‌برداری از منطقه بریلوئن استفاده شد. برهم‌کنش‌های واندروالسی با استفاده از DFT-D3 مدل شدند [۳۴]. به دلیل ساختار نامتقارن  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  و کاهش برهم‌کنش تصاویر دوره‌ای، تصحیح دوقطبی در محاسبات لحاظ شد [۳۵].

قطبش الکتریکی خارج از صفحه با استفاده از محاسبات فاز بری استاندارد [۳۶-۳۷] ارزیابی شده است. همچنین روش NEB<sup>۳</sup>

و دروازه درونی فراهم می‌سازد [۸-۶]. بدین ترتیب خازن منفی که از ترکیب قطبش و میدان الکتریکی خارجی در مواد فروالکتریک به دست می‌آید سبب کاهش تاب زیر آستانه می‌شود. مبنای فیزیکی این پدیده با A. K. Jonscher بحث شده است [۹]. به منظور پایداری خازن منفی رفتار پسماند فروالکتریک که از مشخصه‌های این ماده است، باید حذف شود. این مورد در صورت افزایش ضخامت فروالکتریک به منظور بهبود عملکرد افزاره مشاهده می‌شود [۱۰].

در این افزاره خازن دروازه ترکیب سری خازن عایق دروازه و خازن فروالکتریک است و کاهش خازن فروالکتریک و افزایش خازن عایق دروازه عملکرد افزاره را بهبود می‌بخشد. بطوریکه با افزایش ضخامت فروالکتریک، نسبت جریان روشن/خاموش ثابت، جریان روشن بیشتری بدست می‌آید. همچنین، به منظور افزایش خازن عایق دروازه، کاهش ضخامت آن و استفاده از موادی با ضریب دی الکتریک بالا مؤثر خواهد بود. امروزه نیم‌رساناهای دوبعدی به عنوان کانال ترانزیستور مورد توجه زیادی قرار دارند [۱۱]. در این بین دی‌کلکوژنهای فلزات واسطه مانند  $\text{MoS}_2$  و  $\text{MoSe}_2$  توانسته‌اند تاب زیر آستانه کمتر از  $64 \text{ mV/dec}$  را در حضور فروالکتریک بسیاری در ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی [۴] نشان دهند. در مطالعه‌ای دیگر بر ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی دو بعدی با کانال فسفر سیاه، در دمای پایین و تاب زیر آستانه  $27 \text{ mV/dec}$  بدست آمده است [۱۲]. همچنین فروالکتریک‌های متفاوت معدنی [۱۳-۱۴]، آلی [۴] و واندروالسی [۱۵-۱۶] در ترانزیستورهای اثر میدان-خازن منفی مورد استفاده واقع شده‌اند.

ماده فروالکتریک  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  یکی از نامزدهای مهم به منظور کاربرد در دیودها [۱۴-۱۵] ترانزیستورهای اثر میدان [۱۷]، حافظه‌های غیرفرار [۱۸] و ساختارهای ناهمگون [۲۱-۱۹] است. این ماده دارای چندین فاز بسته به دما و شرایط آماده‌سازی دارد [۲۲-۲۳]: فاز  $\alpha$  که متعلق به گروه  $R3m160$  (ساختار رومبوهدرال) است در دمای اتاق پایدار است [۲۴]، فاز  $\beta$  که متعلق به گروه  $\bar{R}3m166$  (ساختار رومبوهدرال) است در دمای بالاتر از  $473 \text{ K}$  پایدار است [۲۴-۲۵] و فاز  $\beta'$  (ساختار مونوکلینیک) شبه پایدار است [۲۵] و تنها بین  $333 \text{ K}$  و  $473 \text{ K}$  به شکل توده و پوسته نازک وجود دارد.

<sup>۲</sup> Vienna Ab initio Simulation Package

<sup>۳</sup> Nudged Elastic Band

$$(۲) N_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} D(E)f(E - E_f) dE$$

$D(E)$  چگالی حالات محلی در قله سد انرژی و  $f(E - E_f)$  تابع فرمی در حالت تعادل است. هنگامی که ولتاژی به دروازه و چاه اعمال گردد (چشمه زمین در نظر گرفته شده است)، پتانسیل ذاتی در قله سد انرژی  $U_{scf}$  خواهد شد و حالات با دو سطح فرمی متفاوت اشغال خواهند شد. حالات با بردار موج یا سرعت مثبت با چشمه پر می‌شوند با توجه به:

$$N_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} D(E)f_1(E) dE \quad (۲)$$

حالات با بردار موج یا سرعت منفی با چاه پر می‌شوند با توجه به:

$$N_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} D(E)f_2(E) dE \quad (۳)$$

در رابطه بالا  $f_{1/2}(E) = f(E + U_{scf} - E_{F1/2})$ . با دانستن  $U_{scf}$ ، محل سطوح فرمی و  $D(E)$  می‌توانیم چگالی الکترون‌ها در قله سد انرژی را به صورت  $N = N_1 + N_2$  محاسبه کنیم.

با صرفنظر از بارهای متحرک در کانال، پتانسیل لاپلاس در قله سد ناشی از ولتاژ اعمالی پایانه‌ها به صورت زیر خواهد بود:

$$U_L = -q(\alpha_G V_G + \alpha_D V_D + \alpha_S V_S) \quad (۴)$$

$\alpha$  ها کنترل چشمه، چاه و دروازه را مشخص می‌کنند و با روابط زیر مشخص می‌شوند:

$$\alpha_G = \frac{C_G}{C_\Sigma} \quad \alpha_D = \frac{C_D}{C_\Sigma} \quad \alpha_S = \frac{C_S}{C_\Sigma} \quad (۵)$$

در رابطه (۵)،  $C_\Sigma$  ترکیب موازی سه خازن است. در ترانزیستور اثر میدان اکسید-فلز-نیم رسانا MOSFET<sup>۴</sup> بسیار ایده‌آل که دروازه کنترل کننده است،  $\alpha_G = 1$  و  $\alpha_D$  و  $\alpha_S$  هر دو صفر هستند. قسمت دوم محاسبات شامل صفر کردن سه پایانه و در نظر گرفتن پتانسیل ناشی از بارهای متحرک در قله سد انرژی است که به صورت زیر خواهد بود:

$$U_P = \frac{q^2}{C_\Sigma} \Delta N \quad (۶)$$

به طور فیزیکی ولتاژ اعمالی مثبت وارد شده به چاه و دروازه، انرژی پتانسیل در قله سد را که  $U_L$  بود پایین خواهد آورد اما به علت پتانسیل  $U_P$  بارهای متحرک پتانسیل بالا می‌رود. بنابراین  $U_{scf}$  به صورت زیر نوشته خواهد شد:

[۳۸] برای تعیین مسیر گذار با کمینه انرژی و تعیین سد انرژی پتانسیل در حالت گذار به کار گرفته شد. این روش بر پایه بهینه سازی تعدادی از ساختارهای میانی در امتداد مسیر واکنش، عمل می‌کند. هر ساختار کمینه انرژی ممکن در مسیر واکنش را پیدا می‌کند، در حالی که ساختارها به مانند یک زنجیره الاستیک عمل می‌کنند. در حین بهینه سازی، تنها نیروی ناشی از فنر در طول مسیر واکنش است که به اتم‌ها اعمال می‌شود. محاسبه NEB زمانی متوقف می‌شود که مجموع این نیروها صفر شود یا به پایین‌تر از حد هم‌گرایی برسد. در ادامه با استفاده از این روش، انرژی کل با لاندائو-گینزبرگ توصیف می‌شود [۳۹]:

$$E = \sum_i \frac{A}{2} p_i^2 + \frac{B}{4} p_i^4 + \frac{C}{6} p_i^6 + \frac{D}{2} \sum_{(i,j)} (p_i - p_j)^2 \quad (۱)$$

که در آن  $p_i$  قطبش در سلول  $i$ ،  $B$ ،  $C$ ،  $D$  ضرایب لاندائو و  $(i, j)$  نشان‌دهنده نزدیکترین سلول‌های همسایه هستند. سه عبارت اول از نمودار پتانسیل دوگانه و عبارت آخر با استفاده از نظریه میدان میانگین و با در نظر برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها تقریب زده می‌شود. براساس این هامیلتونی مؤثر و پارامترهای بدست آمده، روش مونت-کارلو با الگوریتم متروپولیس برای تعیین دمای کوری به کار گرفته شد. بدین ترتیب شرایط مرزی دوره‌ای با اندازه شبکه  $64 \times 64$  در  $10^5$  گام برای تعادل‌رسانی حرارتی و پس از آن  $10^5$  گام دیگر برای اندازه‌گیری در نظر گرفته شده است. همچنین دمای کوری با استفاده از محاسبات اصول اولیه-دینامیک مولکولی برای ابرسلول  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> با اندازه  $5 \times 3$  نیز محاسبه شده است. برای این محاسبات پایه و شبه پتانسیل‌های مشابه با محاسبات نظریه تابعی چگالی انتخاب شدند، که پیشتر بیان شده است.

در این پژوهش، به منظور مدل سازی ترانزیستور از روش قله سد انرژی استفاده شده است [۴۰-۴۲]. در یک ترانزیستور بالیستیک حالات واقع شده در قله سد انرژی توسط چشمه و هم با چاه پر می‌شوند. در مدل ترابرد کوانتومی، چگالی حالات محلی قابل پر شدن با چشمه و چاه را می‌توان مستقیماً با استفاده از تابع طیفی محاسبه کرد. در مدل نیمه کلاسیک چگالی حالات محلی با رابطه  $E(k)$  نیم‌رسانا که با پتانسیل ذاتی در قله سد انرژی تعیین خواهند شد. چگالی الکترون‌های در حالت تعادل در قله سد انرژی به صورت زیر خواهد بود.

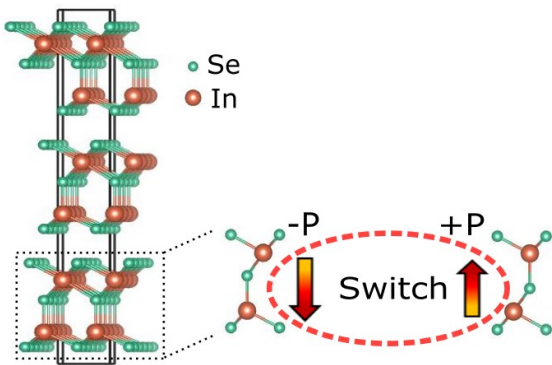
<sup>4</sup> Metal-oxide semiconductor field effect transistor

$$SS = \frac{\partial V_G}{\partial(\log_{10} I_D)} = \frac{\partial V_G}{\partial \Psi_S} \frac{\partial \Psi_S}{\partial(\log_{10} I_D)} = \left(1 + \frac{C_S}{C_{Ins}}\right) \left(\frac{k_B T}{q} \ln 10\right) \quad (13)$$

که در آن  $C_{Ins}$  خازن عایق دروازه و  $C_S$  خازن کانال است.

### ۳- نتایج و بحث

ساختار کریستالی  $\alpha$  با در نظر گرفتن سه لایه با انباشت  $ABC$  در جهت محور  $z$  بررسی شده است، شکل ۱. همچنین یک ناحیه خلأ ضخیم در امتداد جهت  $z$  به منظور شبیه‌سازی تک‌لایه و چندلایه کریستال  $\alpha$  در نظر گرفته شده است. پس از بهینه‌سازی انرژی، فاصله بین لایه‌ها در ساختارهای  $\alpha$  حدود  $2/55 \text{ \AA}$  بدست آمد.



شکل ۱: ساختار واندروالسی  $\alpha$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  و سلول واحد مرتبط با آن. دو ساختار پایدار تک لایه این ماده که دارای قطبش مخالف  $(+P, -P)$  هستند و می‌توانند با حرکت اتم Se و تغییر جهت اتم‌های بالایی تک لایه به دیگری تبدیل شوند.

گذار فاز به معنی تغییر از یک فاز یا حالت ماده به حالتی دیگر در یک سیستم ترمودینامیکی است. هنگام تغییر فاز در یک ماده بعضی از مشخصه آن ماده تغییر می‌کنند که این تغییرات در نتیجه شرایط خارجی مانند دما، فشار و ... رخ می‌دهند. تغییر فاز همچنین موجب بروز برخی تغییرات در تقارن می‌شود. برای استفاده از تک‌لایه  $\alpha$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  در عمل، این ماده باید دمای کوری نسبتاً بالایی در گذار فاز داشته باشد به طوری که قطبش آن در دمای اتاق ماندگار باشد. گذار فاز ساختاری و فروالکتریسته تک‌لایه  $\alpha$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی و با شبیه‌سازی‌های مونت-کارلو و اصول اولیه-دینامیک مولکولی بررسی شده است.

$$U_{scf} = U_p + U_L = -q(\alpha_G V_G + \alpha_D V_D + \alpha_S V_S) +$$

که  $U_C = \frac{q}{C_S}$  با حل مکرر معادلات شماره ۷-۲، چگالی حامل‌ها و پتانسیل ذاتی در قله سد انرژی مشخص خواهد شد. در نهایت جریان چاه با استفاده از رابطه زیر محاسبه خواهد شد:

$$I_D = \int_{-\infty}^{+\infty} J(E)[f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (8)$$

در  $J(E)$  چگالی جریان است که برای انرژی‌های  $E < U_{scf}$  و  $E > U_{scf}$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$J(E) = \frac{1}{2} q \left( \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2E}{m^*}} \right) D(E) \quad (9)$$

در رابطه بالا  $D(E)$  چگالی حالات محلی است.

همچنین از این مدل برای شبیه‌سازی ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی استفاده می‌شود. برای مدل کردن پویایی قطبش فروالکترونیک از معادله لاندائو-خلتتیکوو  $LK^{\Delta}$  استفاده می‌شود [۲]:

$$\rho \frac{d\vec{p}}{dt} + \nabla_{\vec{p}} F = 0 \quad (10)$$

که  $\rho$  و  $\vec{p}$  به ترتیب مقاومت ویژه و قطبش می‌باشند. همچنین  $F$  انرژی گیبس مواد فروالکترونیک به عنوان تابعی از قطبش مطابق رابطه زیر بیان می‌شود:

$$F = Ap^2 + Bp^4 + Cp^6 - \vec{E}_{ext} \cdot \vec{p} \quad (11)$$

که  $A$ ،  $B$  و  $C$  ضرایب لاندائو و  $E_{ext}$  میدان الکتریکی خارجی است. در نهایت ولتاژ دروازه ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی به صورت زیر تقریب زده می‌شود:

$$V_G = V_{Int} + [2AQ_G + 4BQ_G^3] t_{Fe} \quad (12)$$

که  $V_{Int}$  ولتاژ درونی، جمله دوم افت ولتاژ در فروالکترونیک،  $t_{Fe}$  ضخامت فروالکترونیک و  $Q_G$  چگالی بار دروازه است.

در نهایت تاب زیر آستانه به صورت ذیل قابل محاسبه می‌باشد:

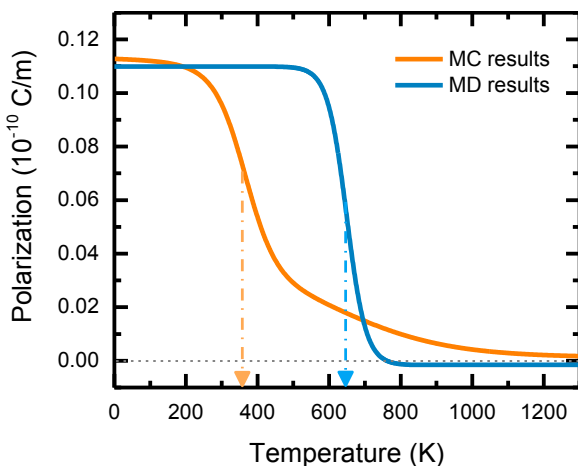
<sup>5</sup> Landau-Khalatnikov

تفاوت بین محاسبات مونت-کارلو و دینامیک مولکولی اصول اولیه می‌تواند از مدهای فونونی در محاسبات دینامیک مولکولی اصول اولیه ناشی شود، که به طور واقع بینانه‌تری سد انرژی بین فازهای فروالکتریک و پارالکتریک در دمای محدود را لحاظ می‌کند. شایان ذکر است که دمای کوری بالاتر از دمای اتاق، تک لایه  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  را به عنوان ماده فروالکتریک مناسب برای کاربردهای متفاوت مانند قطعات فروالکتریکی خازن منفی، ترانزیستورهای اثر میدان، حافظه‌ها و حسگرها ارائه می‌دهد.

جدول ۱: سد پتانسیل ( $E_G$  (eV)، پلاریزاسیون خود بخودی  $P_S$  ( $10^{-10}$  C/m) در دمای صفر و پارامترهای استخراج شده از انرژی لاندائو در معادله (۱) برای تک‌لایه  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ .

$\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$	$E_G$	$P_S$	$(\times 10^2) A$	$(\times 10^2) B$	$C$ ( $\times 10^6$ )	D
1L	۱/۰۹	۰/۱۱	-۲/۸۸	۶/۸۷	۱/۳۶	۱/۶۸

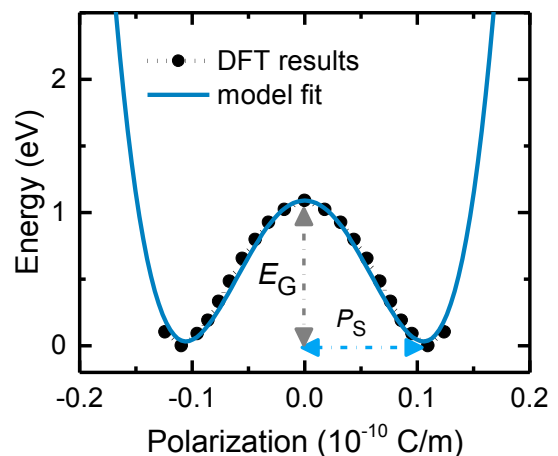
شکل ۴- (الف)، ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی بر مبنای کانال  $\text{MoS}_2$  و فروالکتریک  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  را نشان می‌دهد. شکل ۴- (ب)، مدل خازنی ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی را نشان می‌دهد، به طوریکه  $C_{Fe}$ ،  $C_{ImS}$  و  $C_S$  به ترتیب خازن‌های لایه فروالکتریک، لایه دی‌الکتریک و نیم رسانا هستند.



شکل ۳: وابستگی دمایی قطبش به دما در محاسبات مونت-کارلو و دینامیک مولکولی اصول اولیه.

به منظور محاسبه دمای کوری مؤثر با استفاده از روش مونت-کارلو، لازم است سیستم توسط نظریه لاندائو توصیف شود. با استفاده از روش NEB و تغییر مستقیم جایگاه اتم سلنیوم مرکزی، نمایه انرژی تعویض قطبش فروالکتریک به عنوان تابعی از قطبش برای تک‌لایه  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  در شکل ۲ نمایش داده شده است. سد تعویض قطبش بدست آمده برای این ماده در حدود  $1/0.9$  eV است. این انرژی نسبتاً بزرگ، متناسب با انرژی تغییر فاز فروالکتریک در دمای گذار است. سه پارامتر اول لاندائو  $(C, B, A)$  در معادله ۱ با برازش یک چاه پتانسیل دوگانه بر نمودار انرژی تعویض قطبش شده در مسیر تعویض قطبش بدست می‌آیند. برای استخراج پارامتر لاندائو چهارم در معادله ۱ (D)، نظریه میدان میانگین با در نظر گرفتن برهمکنش دوقطبی-دوقطبی بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها تقریب زده شده است. تمامی پارامترهای لاندائو استخراج شده در معادله ۱ در جدول ۱ فهرست شده است.

دمای کوری بدست آمده با استفاده از محاسبات مونت-کارلو بر مبنای هامیلتونی مؤثر و پارامترهای لاندائو استخراج شده، برای تک‌لایه حدود  $355$  K است، شکل ۳. برای بدست آوردن دمای کوری با استفاده از پاسخ پیروالکتریک، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اصول اولیه  $\text{AIMD}^6$  برای تک‌لایه انجام شد. دمای کوری محاسبه شده با این روش  $650$  K می‌باشد که با نتایج محاسبات مونت-کارلو متفاوت است، شکل ۳. نتایج محاسبات در این شکل پس از برازش ارائه شده است.



شکل ۲: چاه پتانسیل دوگانه به عنوان تابعی از قطبش در تک‌لایه  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  و  $E_G$  سد پتانسیل و قطبش خودبه خودی هستند.

<sup>6</sup> Ab-initio molecular dynamics

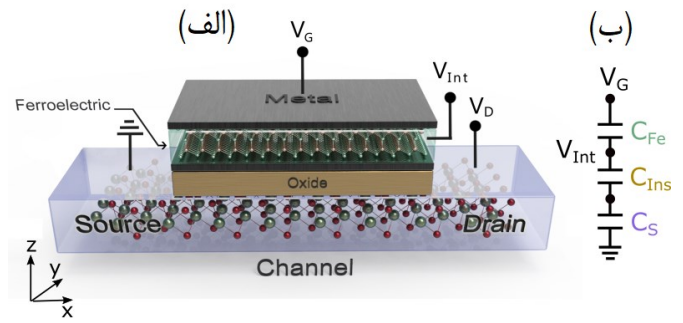


چگالی بار خالص که ناشی از تفاوت مقدار قطبش  $p$  و چگالی بار پوشیده شده  $\sigma$  است، تعیین می‌شود:

$$\Delta V_{FE} = \frac{(\sigma-p)t_{FE}}{\epsilon} \quad (15)$$

که  $\epsilon$  ثابت دی‌الکتریک و  $t_{FE}$  ضخامت فروالکتریک است. ما اکنون بر پاسخ گذرای بارهای ناشی از قطبش و اثر پوشش (ناشی از حرکت الکترون و حفره در جهت مخالف به منظور کاهش میدان قطبش زدایی) تمرکز می‌کنیم. همانطور که توسط کاتالان و همکارانش [۴۴] گزارش شده است، فرایند تغییر قطبش بسیار سریع‌تر از فرایند پوشش بارها می‌تواند رخ دهد. در حالی که زمان تغییر قطبش را می‌توان در گستره زیر نانوثانیه بدست آورد [۴۶-۴۵]، پوشیدگی بارها نیازمند زمان بیشتری برای تنظیم مجدد خود در حالت قطبش جدید است. به طور خاص، زمان مشخصه توزیع مجدد بارهای غربال شده بر روی فروالکتریک به عوامل متعددی مانند خصوصیات دی‌الکتریک، فروالکتریک و واسطها، الکتروود و به خصوص پارامترهای مدار خارجی بستگی دارد. این زمان معمولاً چند نانوثانیه یا بیشتر است [۴۷]. از این رو، خازن منفی می‌تواند زمانی تشخیص داده شود که قطبش (تا حدی) تغییر کند، اما پوشیدگی بارها هنوز کامل نشده باشد. با این همه، بررسی این پدیده در بحث خازن منفی مستلزم بررسی میکروسکوپی و دینامیکی سیستم است.

همانطور که در شکل ۵-الف) نشان داده شده است، برای ترانزیستور اثر میدانی مبتنی بر تک لایه  $MoS_2$  تاب زیر آستانه تقریباً  $67 \text{ mV/dec}$  است و برای ترانزیستور اثر میدانی-خازن منفی با ضخامت‌های فروالکتریک  $5 \text{ nm}$ ،  $15$  و  $25$  مقادیر تاب زیر آستانه به ترتیب برابر  $59 \text{ mV/dec}$ ،  $43$  و  $27$  می‌شوند. به منظور مقایسه با نتایج عملی، در ادامه مقادیر تاب زیر آستانه برای ادوات مشابه گزارش شده است. برای ترانزیستورهای اثر میدانی-خازن منفی با کانال‌های  $MoS_2$  و  $MoSe_2$  و در حضور فروالکتریک بسپاری با ضخامتی بین  $50$ - $300 \text{ nm}$ ، تاب زیر آستانه‌ای در حدود  $24$ - $51 \text{ mV/dec}$  گزارش شده است [۴]. همچنین، در مطالعه‌ای دیگر بر روی افزاره با کانال فسفر سیاه و فروالکتریک  $SrBi_2Nb_2O_9$  با ضخامت  $400 \text{ nm}$ ، تاب زیر آستانه‌ای حدود  $27 \text{ mV/dec}$  حاصل شده است. عملکرد این افزاره و تاب زیر آستانه آن با استفاده از فروالکتریک ضخیم‌تر و



شکل ۴: الف) طرحواره ترانزیستور اثر میدانی-خازن منفی با  $MoS_2$  به عنوان ماده کانال و  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  به عنوان ماده فروالکتریک. ب) مدل خازن معادل برای ترکیب دروازه، فرو الکتتریک و عایق در ساختار فلز-فروالکتریک-فلز-عایق-نیمه‌رسانا.

خازن کلی دروازه در این ترانزیستور اثر میدانی-خازن منفی شامل ترکیب سری  $C_{FE}$ ،  $C_{Ins}$  و  $C_S$  است:

$$\frac{1}{C} = \left( \frac{1}{C_{FE}} + \frac{1}{C_{Ins}} + \frac{1}{C_S} \right) \quad (13)$$

در این ترانزیستور ولتاژ دروازه داخلی  $V_{Int}$  به دلیل اثر خازن منفی می‌تواند افزایش یابد. رابطه بین ولتاژ و خازن ترانزیستور اثر میدانی-خازن منفی بدین صورت است:

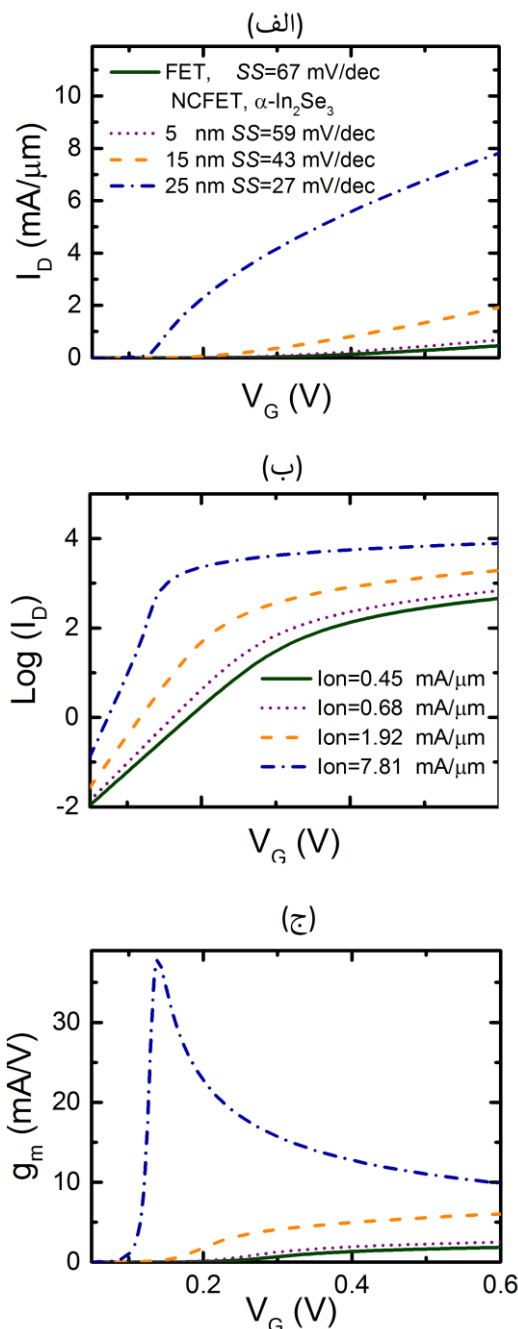
$$\frac{\partial V_G}{\partial V_{Int}} = 1 - \frac{C_{FET}}{|C_{FE}|} \quad (14)$$

در یک ترانزیستور اثر میدانی-خازن منفی، میدان ناشی از اعمال ولتاژ خارجی  $V_G$ ، قطبش را در فروالکتریک ایجاد می‌کند. چگالی بار خالص درون خازن فروالکتریک، که به عنوان تفاوت بین بار سطحی ناشی از قطبش و قطبش زدایی تعریف می‌شود، افت ولتاژ را در  $V_{FE}$  فروالکتریک مشخص می‌کند. خازن منفی زمانی ظاهر می‌شود که بارهای سطحی قطبیده به دلیل حضور میدان قطبش زدایی در طول تعویض قطبش کاملاً حذف نمی‌شوند [۴]. این نشان می‌دهد که افت ولتاژ در فروالکتریک منفی است و  $V_{FET} > V_G$  است به طوری که  $V_G = V_{FET} + V_{FE}$  که  $V_{FET}$  ولتاژ در سطح ترانزیستور است. بنابراین چگالی بار مشابه را می‌توان در کانالی با یک ولتاژ دروازه کوچک‌تر بدست آورد که منجر به شیب بیشتر از  $64 \text{ mV/dec}$  می‌شود [۴۳]. در حضور ولتاژ اعمالی دروازه، میدان اعمالی، قطبش را در داخل فروالکتریک القا می‌کند. همچنین، میدان قطبش زدایی مرتبط با تغییر قطبش در برابر میدان اعمال شده، القا می‌شود. در ادامه، برای کاهش این میدان بارهای الکتریکی شارش می‌کنند. بنابراین میدان خالص درون خازن فروالکتریک با استفاده از

فروالکترونیک  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> مدل‌سازی شد. نتایج نشان داد که با استفاده از فروالکترونیک  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> با ضخامت بین ۲۵-۵۰ nm، تاب زیر آستانه‌ای در حدود ۲۷-۵۹ mV/dec حاصل می‌شود.

## سپاسگزاری

این طرح پژوهشی توسط صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور (INSF)، حمایت شده است.



شکل ۵: (الف)  $I_D$ - $V_G$  برای ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی بر مبنای کانال MoS<sub>2</sub> و فروالکترونیک  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> با ضخامت‌های متفاوت در  $V_D=0.6$  V با لایه عایق SiO<sub>2</sub> با ضخامت ۳ nm. (ب) تغییرات  $\log(I_D)$  و (ج)  $g_m$  با  $V_G$ .

لایه عایق نازک‌تر با مقادیر بالای  $\kappa$  بهبود قابل توجهی را نشان داده است [۱۲]. همچنین، برای ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی دیگری بر پایه کانال MoS<sub>2</sub> و ماده فروالکترونیک واندروالی CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> با ضخامت ۲۱ nm، تاب زیر آستانه‌ای حدود ۵۷ mV/dec حاصل شده است، که با افزایش ضخامت فروالکترونیک این کمیت تا ۲۸ mV/dec کاهش یافت [۱۷].

با افزایش ضخامت لایه فروالکترونیک، عملکرد افزاره به دلیل کاهش  $C_{FE}$  ( $|C_{FE}| \approx C_{FET}$ ) افزایش می‌یابد. به علاوه یک روش مستقیم برای بهبود عملکرد افزاره، افزایش ظرفیت لایه عایق است. وابستگی  $C_{INS}$  به EOT نشان می‌دهد که عایق‌های دروازه نازک‌تر منجر به تاب زیر آستانه کوچک‌تر می‌شوند، همچنین، با استفاده از موادی با مقادیر بالای  $\kappa$ ، تاب زیر آستانه کاهش بیشتری می‌یابد.

در شکل ۵-ج) می‌توان مشاهده کرد که با استفاده از لایه نازک‌تر فروالکترونیک، رسانایی کاهش می‌یابد و مقدار کمینه آن در مقادیر بزرگ‌تر ولتاژ دروازه در توافق با نتایج تجربی اتفاق می‌افتد. در شکل ۶-الف)، در شرایطی که  $|C_{FE}| > C_{FET}$  و  $C_{FET}$  تا حد ممکن به  $|C_{FE}|$  نزدیک شود، بزرگترین افزایش در جریان روشن و کاهش در تاب زیر آستانه وجود دارد. در شکل ۶-ب) می‌توان مشاهده کرد که با استفاده از لایه عایق نازک‌تر و یا لایه عایق با مقادیر بالای  $\kappa$ ، تاب زیر آستانه می‌تواند به مقدار کم‌تر از ۶۴ mV/dec برسد.

## ۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ترانزیستور خازن منفی بر پایه فروالکترونیک  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> ارزیابی شد. برای استفاده از این ماده در ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی، پارامترهای متفاوت با استفاده از نمودارهای گذار فازی که توسط نظریه لاندائو توصیف شده‌اند، بدست آمد. شبیه‌سازی مونت-کارلو برای بدست آوردن دمای کوری بکار گرفته شد و شبیه‌سازی اصول اولیه-دینامیک مولکولی با محاسبه پاسخ‌دهی پیروالکترونیک در گذار فاز به منظور تخمین دمای کوری به کار گرفته شد. بر طبق این محاسبات، دمای کوری بالاتر از دمای اتاق بدست آمد که نشان می‌دهد، تک لایه  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> برای کاربردهای متفاوت در ادوات فروالکترونیک مناسب است. سرانجام ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی بر پایه کانال MoS<sub>2</sub>

based ferroelectric polymer gating,” npj 2D Materials and Applications, 1(1), 1-7, 2017.

[5] J. Jo, W. Y. Choi, J. D. Park, J. W. Shim, H.Y. Yu, C. Shin, “Negative capacitance in organic/ferroelectric capacitor to implement steep switching MOS devices,” Nano letters, 15(7), 4553-4556, 2015.

[6] F. Xue, W. Hu, K. C. Lee, L. S. Lu, J. Zhang, H. L. Tang,... & C. H. Lien, “Room-Temperature Ferroelectricity in Hexagonally Layered  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Nanoflakes down to the Monolayer Limit,” Advanced Functional Materials, 28(50), 1803738, 2018.

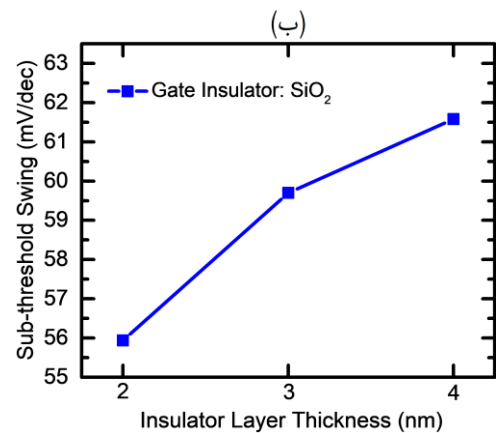
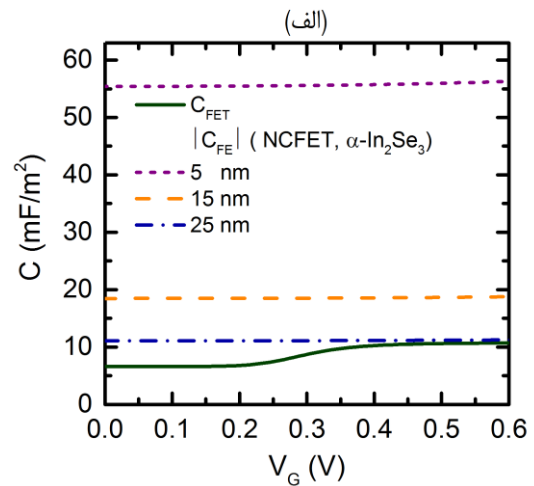
[7] G. Pahwa, T. Dutta, A. Agarwal, Y. S. Chauhan, “Physical insights on negative capacitance transistors in nonhysteresis and hysteresis regimes: MFMIS versus MFIS structures,” IEEE Transactions on Electron Devices, 65(3), 867-873, 2018.

[8] A. Aziz, S. Ghosh, S. Datta, S. K. Gupta “Physics-based circuit-compatible SPICE model for ferroelectric transistors,” IEEE Electron Device Letters, 37(6), 805-808, 2016.

[9] A. K. Jonscher, “The physical origin of negative capacitance,” Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics, 82(1), 75-81, 1986.

[10] M. Hoffmann, M. Pešić, S. Slesazek, U. Schroeder, T. Mikolajick, “On the stabilization of ferroelectric negative capacitance in nanoscale devices,” Nanoscale, 10(23), 10891-10899, 2018.

[11] J. Kang, W. Cao, X. Xie, D. Sarkar, W. Liu, K. Banerjee, “Graphene and beyond-graphene 2D crystals for next-generation green electronics,” In Micro-and Nanotechnology Sensors, Systems,



شکل ۶: (الف) خازن ترانزیستور اثر میدان-خازن منفی بر مبنای کانال MoS<sub>2</sub> و فروالکترونیک  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> با ضخامت‌های متفاوت در  $V_D=0/6$  با لایه عایق SiO<sub>2</sub> با ضخامت ۳ nm. (ب) مقدار تاب زیر آستانه برای ضخامت‌های متفاوت لایه عایق.

### مراجع

[1] A. M. Ionescu, H. Riel, “Tunnel field-effect transistors as energy-efficient electronic switches,” nature, 479(7373), 329-337, 2011.

[2] S. Salahuddin, S. Datta, “Use of negative capacitance to provide voltage amplification for low power nanoscale devices,” Nano letters, 8(2), 405-410, 2008.

[3] V. Zhirnov, R. K. Cavin, “Negative capacitance to the rescue?,” Nature Nanotechnology, 3(2), 77-78, 2008.

[4] X. Wang, et al., “Two-dimensional negative capacitance transistor with polyvinylidene fluoride-



heterostructure of two-dimensional  $\text{WSe}_2/\text{In}_2\text{Se}_3$ ,” *Nanotechnology*, 31, 065203, 2020.

[20] J. He, T. Li, L. Zhang, D. He, Y. Wang, H. Ding, ... & H. Zhao, “Efficient Energy Transfer in  $\text{In}_2\text{Se}_3$ - $\text{MoSe}_2$  van der Waals Heterostructures,” *ACS Omega*, 3, 11930–11936, 2018.

[21] G. Han, Z.-G. Chen, J. Drennan, J. Zou, “Indium selenides: structural characteristics, synthesis and their thermoelectric performances,” *Small*, 10, 2747–2765, 2014.

[22] L. Debbichi, O. Eriksson, S. Lebègue, “Two-dimensional indium selenides compounds: An ab initio study,” *Journal of Physical Chemistry Letters*, 6, 3098–3103, 2015.

[23] K. Osamura, Y. Murakami, Y. Tomiie, “Crystal Structures of  $\alpha$ - and  $\beta$ -Indium Selenide,  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ,” *Journal of the Physical Society of Japan*, 21, 1848–1848, 1966.

[24] H. D. Lutz, M. Fischer, H.P. Baldus, R. Blachnik, “Zur polymorphie des  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ,” *Journal of the Less Common Metals*, 143, 83–92, 1988.

[25] C. Manolikas, “New results on the phase transformations of  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ,” *Journal of Solid State Chemistry*, 74, 319–328, 1988.

[26] W. Ding, et al. “Prediction of intrinsic two-dimensional ferroelectrics in  $\text{In}_2\text{Se}_3$  and other III 2-VI 3 van der Waals materials,” *Nature Communications*, 8, 1–8, 2017.

[27] C. Cui, W. Hu, W. X. Yan, C. Addiego, W. Gao, Y. Wang, ... & L. J. Li, “Intercorrelated in-plane and out-of-plane ferroelectricity in ultrathin two-dimensional layered semiconductor  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ,” *Nano letters*, 18, 1253–1258, 2018.

and Applications VI (Vol. 9083, p. 908305). International Society for Optics and Photonics, 2014, June.

[12] F. Liu, Y. Zhou, Y. Wang, X. Liu, J. Wang, H. Guo, “Negative capacitance transistors with monolayer black phosphorus,” *npj Quantum Materials*, 1(1), 1-6, 2016.

[13] O. F. Shoron, S. Raghavan, C. R. Freeze, S. Stemmer, “ $\text{BaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$  heterostructures for ferroelectric field effect transistors,” *Applied Physics Letters*, 110(23), 232902, 2017.

[14] S. Wan, Y. Li, W. Li, X. Mao, W. Zhu, H. Zeng, “Room-temperature ferroelectricity and a switchable diode effect in two-dimensional  $\alpha$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  thin layers,” *Nanoscale*, 10, 14885–14892, 2018.

[15] R. Peng, Y. Ma, S. Zhang, B. Huang, L. Kou, Y. Dai, “Self-doped p–n junctions in two-dimensional  $\text{In}_2\text{X}_3$  van der Waals materials,” *Materials Horizons*, 7, 504–510, 2020.

[16] M. Si, A.K. Saha, S. Gao, G. Qiu, J. Qin, Y. Duan, J. Jian, ... & D.Y. Peide, “A ferroelectric semiconductor field-effect transistor,” *Nature Electronics*, 2, 580–586, 2019.

[17] X. Wang, P. Yu, Z. Lei, C. Zhu, X. Cao, F. Liu, ... & Z. Liu, “Van der Waals negative capacitance transistors,” *Nature communications*, 10(1), 1-8, 2019.

[18] S. Wan, Y. Li, W. Li, X. Mao, C. Wang, C. Chen, ... & H. Zeng, “Nonvolatile ferroelectric memory effect in ultrathin  $\alpha$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$ ,” *Advanced Functional Materials*, 29, 1808606, 2019.

[19] B. Liu, B. Tang, F. Lv, Y. Zeng, J. Liao, S. Wang, Q. Chen, “Photodetector based on

- [36] R. Resta, M. Posternak, A. Baldereschi, "Towards a quantum theory of polarization in ferroelectrics: The case of  $\text{KNbO}_3$ ," *Physical review letters*, 70, 1010, 1993.
- [37] R. Resta, D. Vanderbilt, "Theory of polarization: A modern approach," in *Topics in Applied Physics*, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 31–68, 2007
- [38] G. Henkelman, B. P. Uberuaga, H. Jónsson, "A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths," *Journal of chemistry letters*, 113, 9901–9904, 2000.
- [39] R. Fei, W. Kang, L. Yang, "Ferroelectricity and Phase Transitions in Monolayer Group-IV Monochalcogenides," *Physical review letters*, 117(9), 097601, 2016.
- [40] S. M. Tabatabaei, M. Noei, K. Khaliji, M. Pourfath, M. Fathipour, "A first-principles study on the effect of biaxial strain on the ultimate performance of monolayer  $\text{MoS}_2$ -based double gate field effect transistor," *Journal of Applied Physics*, 113(16), 163708, 2013.
- [41] L. Liu, S.B. Kumar, Y. Ouyang, J. Guo, "Performance limits of monolayer transition metal dichalcogenide transistors," *IEEE Transactions on Electron Devices*, 58(9), 3042-3047, 2011.
- [42] A. Rahman, J. Guo, S. Datta, M.S. Lundstrom, "Theory of ballistic nanotransistors," *IEEE Transactions on Electron Devices*, 50(9), 1853-1864, 2003.
- [43] K. Ng, S. J. Hillenius, A. Gruverman, "Transient nature of negative capacitance in ferroelectric field-effect transistors," *Solid State Communications*, 265, 12-14, 2017.
- [28] Y. Zhou, D. Wu, Y. Zhu, Y. Cho, Q. He, X. Yang,... & K. Lai, "Out-of-plane piezoelectricity and ferroelectricity in layered  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  nanoflakes," *Nano letters*, 17, 5508–5513, 2017.
- [29] F. Xue, W. Hu, K. C. Lee, L. S. Lu, J. Zhang, H. L. Tang, & X. Zhang, "Room-Temperature Ferroelectricity in Hexagonally Layered  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  Nanoflakes down to the Monolayer Limit," *Advanced Functional Materials*, 28, 1803738, 2018.
- [30] P. E. Blöchl, "Projector augmented-wave method," *Physical Review B Condens. Matter*, 50, 17953–17979, 1994.
- [31] G. Kresse, D. Joubert, "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method," *Physical Review B Condens. Matter*, 59, 1758–1775, 1999.
- [32] G. Kresse, J. Furthmüller, "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set," *Physical Review B Condens. Matter*, 54, 11169–11186, 1996.
- [33] J.P. Perdew, et al., "Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces," *Physical review letters*, 100, 136406, 2008.
- [34] S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, "A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu," *Journal of Chemical Physics*, 132, 154104, 2010.
- [35] J. Neugebauer, M. Scheffler, "Adsorbate-substrate and adsorbate-adsorbate interactions of Na and K adlayers on Al (111)," *Physical Review B*, 46, 16067, 1992.

- [44] G. Catalan, D. Jiménez, A. Gruverman, “Negative capacitance detected,” *Nature materials*, 14(2), 137-139., 2015.
- [45] J. Li, B. Nagaraj, H. Liang, W. Cao, C. H. Lee, R. Ramesh, “Ultrafast polarization switching in thin-film ferroelectrics. *Applied physics letters*, 84(7), 1174-1176, 2004.
- [46] J. F. Scott, C.A. P.De Araujo, “Ferroelectric memories,” *Science*, 246(4936), 1400-1405., 1989.
- [47] P. K. Larsen, G. L.M. Kampschöer, M. J. E. Ulenaers, G.A. C.M. Spierings, R. Cuppens, “Nanosecond switching of thin ferroelectric films,” *Applied physics letters*, 59(5), 611-613, 1991.



# Negative-Capacitance Field Effect Nano Transistor Based on a Two-Dimensional Ferroelectric $\text{In}_2\text{Se}_3$

Maryam Soleimani | Mehdi Pourfath\*

School of Electrical and Computer Engineering, University College of Engineering, University of Tehran

**Abstract:** This work proposes and presents a study of a negative-capacitance field effect nano transistor (NCFET) based on two dimensional  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  as the ferroelectric in order to reduce the sub-threshold swing. Phase transition as well as Curie temperatures of monolayer  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  were studied, by employing Monte Carlo and ab-initio molecular dynamics simulations. The estimated Curie point is above room temperature, making monolayer  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  a promising candidate for negative-capacitance field effect nano transistor devices. The Landau constants of monolayer  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  are extracted which were utilized for analyzing the characteristics of a negative capacitance-field effect transistor with a monolayer  $\text{MoS}_2$  as the channel material. Sub-threshold swings in the range of 27-59 mV/dec for ferroelectric thicknesses between 25-5 nm were achieved.

**Keywords:** Negative capacitance-field effect nano transistor, Curie temperatures, Ferroelectricity, Phase transition, Two dimensional materials,  $\text{In}_2\text{Se}_3$ .