

В.Г. ЛИТОВЧЕНКО,<sup>1</sup> А.І. КУРЧАК,<sup>1</sup> М.В. СТРИХА<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України  
(Просп. Науки, 41, Київ 03680)

<sup>2</sup> Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, факультет радіофізики,  
електроніки та комп'ютерних систем  
(Просп. Академіка Глушкова, 42, Київ 03022)

## ТЕОРЕТИЧНА МОДЕЛЬ ДЛЯ ЕФЕКТУ НЕГАТИВНОЇ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОЇ ПРОВІДНОСТІ У 2D НАПІВПРОВІДНИКОВИХ МОНОШАРАХ

УДК 539

*Вперше адаптовано для 2D напівпровідникових моношарів типу MoS<sub>2</sub> та WS<sub>2</sub> просту теоретичну модель розігріву електронів у системі з двома долинами. Показано, що така модель добре описує наявні експериментальні дані щодо ефекту негативної диференціальної провідності в моношарі WS<sub>2</sub> й підтверджує можливість створення на таких структурах нового покоління діодів Ганна. Частоти, які може бути отримано на таких діодах, становлять порядку 10 ГГц і вище, що робить такі діоди потенційно привабливими для низки практичних застосувань.*

*Ключові слова:* диференціальна провідність, напівпровідникові моношари типу MoS<sub>2</sub> та WS<sub>2</sub>.

Уперше отриманий у 2004 році атомний моношар вуглецю графен є напівметалом [1]. Відтак у його характеристиках складно реалізувати суттєво відмінні стани “0” та “1”, що стало принциповою перешкодою на шляху створення на базі графену елементної бази для нової електроніки. Численні спроби наділити графен напівпровідниковими властивостями (шляхом гідрогенізації, створення нанострічок, внесення дефектів тощо – див. [2] і посилання в ній) виявилися малоуспішними з погляду подальших приладних застосувань.

Протягом останніх років, однак, інтенсивно синтезуються й вивчаються інші моношари з напівпровідниковими властивостями (MoS<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub> та інші халькогеніди перехідних металів, чорний фосфор BP тощо – див., наприклад, [3, 4]). Найвідоміші з цього класу матеріалів моношари MoS<sub>2</sub> та WS<sub>2</sub> є прямозонними напівпровідниками з шири-

ною забороненої зони  $E_g \sim 1,7$  еВ та  $E_g \sim 1,8$  еВ відповідно і з екстремумами зони провідності й валентної зони, розташованими в точках  $K, K'$  гексагональної зони Бріллюена [5], подібно до того, як це має місце в графені.

Як показують розрахунки, проведені з першопринципів методом функціонала густини, спектр зони провідності цих матеріалів містить також бічний екстремум ( $T$ -долину) з енергією приблизно на  $\Delta E \sim 0,2$  еВ і  $\Delta E \sim 0,08$  еВ більшою від енергії дна зони, розташований у напрямку від точок  $K, K'$  до центра зони Бріллюена  $\Gamma$  (рис. 1). Енергетичний спектр поблизу обох екстремумів параболічний. Наявність двох підзон зони провідності, нижчої (позначаємо її індексом 1) і вищої (2), у яких для ефективних мас двовимірних електронів виконується співвідношення  $m_1 < m_2$  [5], дає підстави очікувати можливості реалізації в 2D моношарах типу WS<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub> ефекту негативної диференціальної провідності, пов'язаного з заселенням розігрітими полем електронами вищої долини

© В.Г. ЛИТОВЧЕНКО, А.І. КУРЧАК,  
М.В. СТРИХА, 2018

з більшою ефективною масою [6]. Зазначмо, що такий ефект у “традиційних” квантових гетероструктурах вже спостерігався раніше [7], а останнім часом його вивчали в квантових гетероструктурах, які включали багат шаровий фосфорен і дисульфід ренію [8] та графен (ультратонкий графіт) і нітрид бору [9].

Нарешті, зовсім нещодавно негативну диференціальну провідність було вперше експериментально виявлено і в моношарах  $WS_2$  [10]. Показано, що у випадку ненапруженого моношару ефект не відбувається через замалу енергетичну відстань між долинами  $\Delta E \sim 0,08$  eV, бо за кімнатної температури заселення електронами  $T$ -долини починається вже при мінімальних значеннях полів між витоком і стоком. Однак при прикладенні двовісного стиску, коли значення  $\Delta E \sim 0,1$  eV і дещо вище, ефект негативної диференціальної провідності починає виразно виявлятися в залежності струму через польовий транзистор від поля між витоком і стоком.

Оскільки виявлений ефект може відкрити значні перспективи для створення НВЧ приладів у діапазоні десятків ГГц і вище, важливим є створення зручної для використання напівфеноменологічної моделі для його опису, подібної до тієї, яка широко використовується для тривимірних матеріалів [6].

У випадку перерозподілу розігрітих полем електронів між долинами  $K(1)$  і  $T(2)$  густину струму через напівпровідник може бути записано як:

$$J = e(\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2) \varepsilon = env, \quad (1)$$

де для концентрацій електронів у двох підзонах має місце співвідношення  $n_1 + n_2 = n$ ,  $\varepsilon$  – напруженість електричного поля,  $v$  – усереднена дрейфова швидкість електронів. Співвідношення концентрацій у підзонах пов’язане з енергією  $\Delta E$  і температурою гарячих електронів  $T_e$  очевидним виразом [6]:

$$\frac{n_2}{n_1} = R \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT_e}\right), \quad (2)$$

де множник  $R$  описує співвідношення числа доступних квантових станів у підзонах 2 та 1. З урахуванням того, що виродження  $K$ -долини  $g_1 = 2$ , а виродження  $T$ -долини  $g_2 = 6$  [5], а також стандартних виразів для 2D густин станів у випадку параболического спектра  $D_{2D} = \frac{g_{1,2} m_{1,2}}{\pi \hbar^2}$ , одержуємо

$$R = 3 \frac{m_2}{m_1} \gg 1. \quad (3)$$

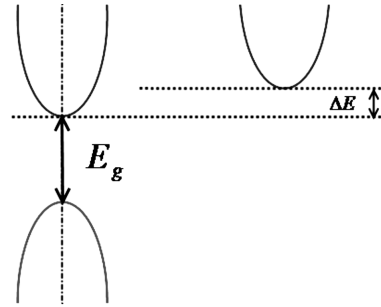


Рис. 1. Структура зони провідності в моношарах халькогенідів перехідних металів: наявність  $K$ - і  $T$ -долин зумовлює можливість ефекту негативної диференціальної провідності

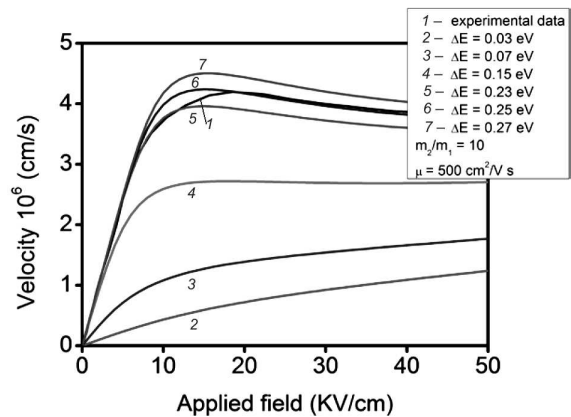


Рис. 2. Розрахована згідно з (4) залежність дрейфової швидкості в  $WS_2$  для температури  $T = 300$  К для різних значень  $\Delta E$ : 0,03 eV (крива 1); 0,07 eV (2); 0,15 eV (3); 0,23 eV (4); 0,25 eV (4); 0,27 eV (5). Крива 6 – експериментальна залежність тієї ж швидкості за даними [10]

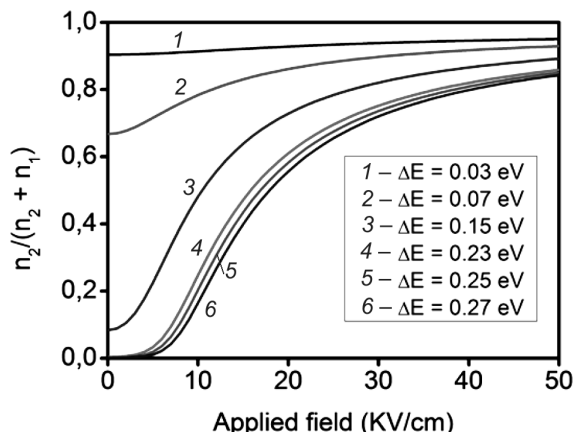
У наближенні часу релаксації енергії  $\tau_e$  залежність дрейфової швидкості від поля можемо записати в стандартному вигляді:

$$v = \mu_1 \varepsilon \left[ 1 + \frac{n_2}{n_1} \right]^{-1}, \quad (4)$$

де електронна температура в (2), що входить до (4), записується як:

$$T_e = T + \frac{3e\tau_e \mu_1}{3k} \varepsilon^2 \left[ 1 + \frac{n_2}{n_1} \right]^{-1}. \quad (5)$$

На рис. 2 наведено обчислену з урахуванням (2), (3), (5) залежність дрейфової швидкості (4) в  $WS_2$  для температури  $T = 300$  К для різних значень  $\Delta E$  від 0,03 eV до 0,27 eV. На рис. 3 наведено розраховане співвідношення концентрації електронів



**Рис. 3.** Розраховане співвідношення концентрації електронів у верхній  $T$ -долині  $n_2$  до загальної концентрації електронів у зоні провідності  $n$  від електричного поля  $\epsilon$  при  $T = 300$  К

у верхній  $T$ -долині  $n_2$  до загальної концентрації електронів у зоні провідності  $n$  від електричного поля  $\epsilon$  при тій самій кімнатній температурі.

При розрахунках використано значення  $\tau_e = 10^{-12}$  с,  $\mu_1 = 500$  см<sup>2</sup>/Вс,  $m_2/m_1 = 10$ . Ці значення для  $\Delta E = 0,25$  eВ забезпечують добру відповідність із експериментальною кривою й корелюють із тими значеннями, які наводяться щодо WS<sub>2</sub> в літературі (див. [10]). Звернімо увагу, що значення співвідношення ефективних мас в  $K$  і  $T$  у відповідності до цифр, наведених у [9] ( $0,32m_0$  і  $0,75m_0$  відповідно), є дещо нижчим, однак ці цифри стосуються лишень околиць екстремумів і не враховують збільшення маси в  $T$ -долині з енергією.

Як видно з рис. 2, залежність  $v(\epsilon)$  набуває вигляду кривої з максимумом, а співвідношення  $n_2/n$  при полях, що відповідають максимуму, починає зростати, (це відповідає інтенсивному заселенню розігрітими електронами верхньої долини зони провідності) починаючи з певного порогового значення  $\Delta E \sim 0,15$  eВ, що також якісно відповідає результатам [10]. При нижчих значеннях  $\Delta E$ , як видно з рис. 3, електрони інтенсивно переходять до верхньої долини вже при мінімальних значеннях електричного поля  $\epsilon$ , й ефект негативної диференціальної провідності відсутній.

Таким чином, уперше адаптована нами до 2D напівпровідникових моношарів типу MoS<sub>2</sub> та WS<sub>2</sub>

проста теоретична модель розігріву електронів у системі з двома долинами [6] добре описує наявні експериментальні дані й підтверджує можливість створення на таких структурах нового покоління діодів Ганна. Частоти, які може бути отримано на таких діодах, легко оцінити зі співвідношення:

$$f \sim \frac{v}{L}, \tag{6}$$

де  $L$  – довжина каналу діода. Для значень, що відповідають системі, яка вивчалася в [10] ( $v = 4 \times 10^6$  см/с,  $L = 5$  мкм) отримуємо частоти порядку 10 ГГц, що робить такі діоди потенційно привабливими для низки практичних застосувань.

Викладена в цій роботі модель дозволяє також оцінити перспективність створення Ганнівських діодів на інших 2D напівпровідникових моношарах та тонких квантових ямах, базованих як на традиційних матеріалах електроніки, так і на алотропах вуглецю “між графеном і графітом”, що, як було показано нами в [11], також можуть мати корисні напівпровідникові властивості.

1. S. Das Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, E. Rossi. Electronic transport in two dimensional graphene. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
2. В.Г. Литовченко, М.В.Стріха, М.І.Клюй. Модифіковані графеноподібні плівки як новий клас напівпровідників зі змінною шириною забороненої зони. *УФЖ* **56**, 178 (2011).
3. P. Miro, M.Audiffred, T.Heine. An atlas of two dimensional materials. *Chem. Soc. Rev.* **43**, 6537 (2014).
4. Xinming Li, Li Tao, Zefeng Chen, Hui Fang, Xuesong Li, Xinrang Wan, Jian-Bin Xu, Hongwei Zhu. Graphene and related two-dimensional materials: Structure-property relationship for electronics and optoelectronics. *Appl. Phys. Rev.* **4**, 021306 (2017).
5. O.V. Yazyev, A. Kis. MoS<sub>2</sub> and semiconductors in the flatland. *Materials Today* **18**, 20 (2015).
6. S.M Sze. *Physical Devices in Semiconductors* (John Wiley and Sons, 1981).
7. *Negative Differential Resistance and Instabilities in 2-D Semiconductors*. Edited by N. Balkan, B.K. Ridley, A.J. Vickers (Plenum Press, 1993).
8. Jaewoo Shim, Seyong Oh, Dong-Ho Kang, Seo-Hyeon Jo, M.H. Ali, Woo-Young Choi, Keun Heo, Jaeho Jeon, Sungjoo Leem Minwoo Kim, Young Jae Song, Jin-Hong Park. Phosphorene/rhenium disulfide heterojunction-based negative differential resistance device for multi-valued logic. *Nature Commun.* **7**, 13413 (2016).

9. Y. Zhao, Z. Wan, U. Hetmaniuk, N.P. Anantram. Negative differential resistance in graphene boron nitride heterostructure controlled by twist and phonon-scattering [ArXiv: 1702.04435 (2017)].
10. G. He, J. Nathawat, C.-P. Kwan, H. Ramamoorthy, R. Somphonsane, M. Zhao, K. Gosh, U. Singiseti, N. Perea-Lopez, C. Zhou, A.L. Elias, M. Terrones, Y. Terrones, Y. Gong, X. Zhang, R. Vajtai, P.M. Ajayan, D.K. Ferry, J.P. Bird. Negative differential conductance and hot-carrier avalanching in monolayer WS<sub>2</sub> FETs. *Sci. Rep.* **7**, 11256 (2017).
11. V. Lytovchenko, A. Kurchak, M. Strikha. The semi-empirical tight-binding model for carbon allotropes “between diamond and graphite”. *J. Appl. Phys.* **115**, 243705 (2014).

Одержано 22.05.18

V.G. Lytovchenko, A.I. Kurchak, M.V. Strikha

THEORETICAL MODEL  
FOR NEGATIVE DIFFERENTIAL CONDUCTANCE  
IN 2D SEMICONDUCTOR MONOLAYERS

S u m m a r y

A simple theoretical model of electron heating in a system with two valleys is applied for the first time to describe 2D semiconductor monolayers of the MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub> types. The model is demonstrated to describe sufficiently well the available experimental data on the negative differential conductance effect in a WS<sub>2</sub> monolayer. It confirms a possibility to fabricate Gunn diodes of a new generation based on the structures concerned. Such diodes are capable of generating frequencies of an order of 10 GHz and higher, which makes them attractive for many practical applications.