

Effect of double vacancy defect position on the Zigzag Phosphorene Nanoribbon Tunneling FETs

Hadi Owlia ^{1*}, Mohammad Bagher Nasrollahnejad ²

^{1*} Department of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, Ardakan University, P.O. Box 184, Ardakan, Iran

² Department of Electrical Engineering, Gorgan Branch, Islamic Azad University, Gorgan, Iran

E-mail: howlia@ardakan.ac.ir, MB.Nasrollahnejad@iau.ac.ir

Abstract

In this study, the effect of the position of a double-vacancy defect on the electrical performance of phosphorene nanoribbon tunneling field-effect transistors (TFETs) with a zigzag edge has been investigated. By varying the defect position along the length and width of the transistor channel, it was observed that the presence of defects in six studied positions—three along the length ("near source", "center", and "near drain") and three along the width ("center", "in between" and "near edge")—leads to a reduction in the transistor's on/off current ratio. The best performance is observed in the structure where the defect is located at the "in between" position of the channel width, with an on/off current ratio of 1600. Furthermore, the cut-off frequency decreases in all cases, with the smallest reduction occurring when the defect is positioned at the "in between" and "near edge" locations along the channel width, amounting to less than 10%. The calculations were performed using the Slater-Koster quasi-empirical method with DFTB-CP2K parameters. These findings demonstrate that the position of the double-vacancy defect has a significant impact on the electrical performance of phosphorene nanoribbon TFETs and should be considered an important factor in the design and fabrication of such transistors.

Keywords

Double Vacancy Defect, Phosphorene Nanoribbon, Tunneling Transistor, CP2K Method.

Introduction

Structural defects are unavoidably present in silicene and graphene, significantly affecting their electronic and structural properties. These defects have been extensively studied in various papers. However, the investigation of defects in phosphorene has received less attention so far. Due to its low-symmetry lattice, phosphorene exhibits various types of defects, which form more easily compared to silicene and graphene. In this paper, for the first time, the effect of the double-vacancy defect position on phosphorene nanoribbon tunneling FETs is investigated. The use of a tunneling structure in this study is justified by the fact that tunneling field-effect transistors (TFETs) are well-suited for designing low-power circuits.

Proposed Work and Methodology

The PNR-TFET investigated in this study features a phosphorene nanoribbon with a zigzag edge (ZPNR) as the channel material, sandwiched between two oxide layers with a dielectric constant of 3.9. The equivalent oxide thickness (EOT) is 0.5 nm. The ZPNR has a channel width and length of 2.3 nm and 3.3 nm, respectively. The channel is assumed to be intrinsic. Two gate terminals modulate carrier tunneling. The source and drain regions are doped with concentrations of $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ and $-5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, respectively. To model and analyze the electronic properties of phosphorene, an accurate definition of the system's Hamiltonian is required. For this purpose, we use the CP2K software package, an open-source molecular dynamics and electronic structure tool for performing atomistic simulations of molecular, liquid, solid-state, and biological systems.

Conclusion

The effect of the double-vacancy defect position on the performance of phosphorene nanoribbon tunneling field-effect transistors with zigzag edges was investigated. The results showed that the defect reduces the on-state current in all six positions, with the highest reduction occurring at the center of the channel length and width. The on/off current ratio decreases in all cases, with the best performance observed when the defect is in the middle of the channel width. The cut-off frequency also decreases in all cases, with the lowest reduction occurring when the defect is in the middle or near the edge of the channel width. These findings suggest that a defect in the middle of the channel width has the least negative impact on both digital and analog performance. Future studies could explore the effect of nanoribbon width variations to assess the generalizability of these results.

تأثیر موقعیت نقص دو حفره‌ای بر عملکرد ترانزیستورهای اثر میدانی تونلی نانونوار فسفرینی با لبه زیگزاگ

هادی اولیا

استادیار، گروه مهندسی برق، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اردکان، اردکان، ایران

محمد باقر نصراله نژاد

استادیار، گروه مهندسی برق، واحد گرگان، دانشگاه آزاد اسلامی، گرگان، ایران

چکیده

در این پژوهش، تأثیر موقعیت نقص دو حفره‌ای بر عملکرد الکتریکی ترانزیستورهای اثر میدانی تونلی نانونوار فسفرینی با لبه زیگزاگ بررسی شده است. با تغییر موقعیت نقص در طول و عرض کانال ترانزیستور، مشاهده شد که وجود نقص در سه موقعیت طولی ("نزدیک سورس"، "مرکز" و "نزدیک درین") و سه موقعیت عرضی ("مرکز"، "میانه" و "نزدیک لبه") مورد بررسی، منجر به کاهش نسبت جریان روشن به خاموش ترانزیستور می‌شود. بهترین عملکرد در ساختاری با نقص در موقعیت میانه عرض کانال مشاهده می‌شود که این نسبت برابر ۱۶۰۰ می‌باشد. علاوه بر این، فرکانس قطع در همه حالات کاهش یافته و کمترین کاهش در حالت قرارگیری نقص در موقعیت میانه و لبه عرض کانال رخ می‌دهد که این مقدار کمتر از ۱۰٪ می‌باشد. برای انجام محاسبات، از روش شبه تجربی Slater-Koster با استفاده از پارامترهای DFTB-CP2K بهره گرفته شده است. این یافته‌ها نشان می‌دهند که موقعیت نقص دو حفره‌ای تأثیر قابل توجهی بر عملکرد الکتریکی ترانزیستورهای اثر میدانی تونلی نانونوار فسفرینی دارد و می‌تواند به عنوان یک عامل مهم در طراحی و ساخت این نوع ترانزیستورها مورد توجه قرار گیرد.

کلمات کلیدی

نقص دو حفره‌ای، نانونوار فسفرینی، ترانزیستور تونلی، روش CP2K

نام نویسنده مسئول: هادی اولیا

ایمیل نویسنده مسئول: howlia@ardakan.ac.ir

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۳/۰۹/۱۳

تاریخ(های) اصلاح مقاله: ۱۴۰۴/۰۱/۲۸

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۴/۰۴/۰۹

۱- مقدمه

نانو مواد دوبعدی بسیار نازک همچون گرافین [۱، ۲]، سیلیسین [۳]، دی سولفید مولیبدن [۴]، نیتريد برن هگزاگونال [۵] و نیتريد کربن گرافیتی [۶] اخیراً توجه زیادی را بعلت دارا بودن ویژگی‌های ممتاز و کاربردهای بالقوه، به خود جلب کرده‌اند. گرافین بعنوان یک ماده دوبعدی شبه فلزی با ساختار شبکه کندوی عسل، ویژگی‌های الکترونی برجسته‌ای از قبیل رسانایی حرارتی عالی و قابلیت تحرک حامل‌های بالا را دارا می‌باشد.

با این وجود شکاف باند صفر مانعی برای استفاده از گرافین بعنوان کانال ترانزیستورها ایجاد کرده است و باعث کاهش نسبت جریان روشن به خاموش در این ترانزیستورها شده است که عملکرد گرافین را در کاربردهای دیجیتال چالش برانگیز کرده است. مسائل مشابه گرافین در سیلیسین هم وجود دارد که بیشترین تشابه خواص را با گرافین دارد اما دارای ساختار لانه زنبوری کم‌انداز است [۳]. اخیراً فسفرین سیاه بخاطر ویژگی‌های الکترونی متمایزش، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است [۷]. فسفرین خواص الکترونی برجسته‌تری نسبت به گرافین و سیلیسین دارد. شکاف باند مستقیم فسفرین حدود ۱ الکترون ولت است. ترانزیستورهای اثر میدانی بر پایه فسفرین دارای نسبت جریان روشن به خاموش بالای 10^5 می‌باشند. علاوه بر این فسفرین تنها نانو ماده دوبعدی پایدار است که می‌تواند بصورت مکانیکی در آزمایشگاه ورقه

ورقه شود [۸]. علیرغم همه ویژگی‌های ممتاز فسفرین، مشخصات الکتریکی آنها معمولاً در حضور نقص‌ها تأثیر می‌پذیرد. نقص‌ها بصورت غیر قابل اجتنابی در ساختار گرافین و سیلیسین حضور دارند و روی خواص الکترونی آنها اثر گذارند که این موارد بوسیله مقالات متعددی بررسی شده است [۹-۱۵]. با این وجود در مورد تأثیر نقص‌ها در فسفرین بررسی کمی صورت گرفته است. بخاطر ساختار شبکه‌ای با تقارن پایین، نقص‌های مختلفی در فسفرین وجود دارد. با این وجود نقص‌ها در فسفرین در مقایسه با گرافین و سیلیسین راحت‌تر شکل می‌گیرند [۱۶].

در دمای T، چگالی نقص ناحیه‌ای $N_{\text{Defect}} (\text{m}^{-2})$ در نانو ماده دوبعدی با استفاده از رابطه آرنیوس بدست می‌آید [۱۶]:

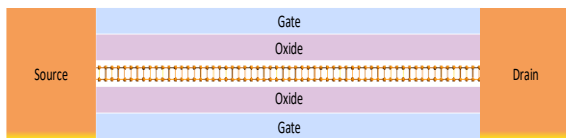
$$N_{\text{defect}} = N_{\text{conv}} \cdot \exp(-E_f / k_B T) \quad (1)$$

که N_{conv} چگالی ناحیه‌ای اتم‌ها در ساختار نانو ماده دوبعدی متعارف می‌باشد. E_f انرژی شکل‌گیری نقص ایجاد شده در نانوماده و k_B ثابت بولتزمن می‌باشد. برای ساختار متعارف گرافین، فسفرین و سیلیسین، چگالی‌های ناحیه‌ای به ترتیب با مقادیر $3.79 \times 10^{19} \text{ m}^{-2}$ ، $2.62 \times 10^{19} \text{ m}^{-2}$ و 1.55×10^{19} برابرند. با محاسبه چگالی ناحیه‌ای پی برده می‌شود که نقص‌های ساختاری، چگالی ناحیه‌ای بالاتری در فسفرین دارند و به سادگی در آن شکل می‌گیرند. در این مقاله، برای اولین بار تأثیر موقعیت نقص دو حفره‌ای بر روی عملکرد ترانزیستور

CP2K بر اساس روش Kohn-Sham (KS) based DFT-GGA می‌باشد [۲۳]. در روش DFTB، همیلتونی به کمک مجموعه‌ای از پارامترهای شبه تجربی اصلاح می‌شود. انرژی جنبشی الکترونی T، انرژی پتانسیل هسته‌ای V_{nuc} (شامل برهمکنش الکترون‌ها با هسته فسفرین) و انرژی پتانسیل الکترونی V_{elec} (شامل پتانسیل خارجی و برهمکنش الکترون-الکترون) بخش‌های تشکیل‌دهنده همیلتونی می‌باشند. همیلتونی کلی فسفرین بصورت زیر تعریف می‌شود:

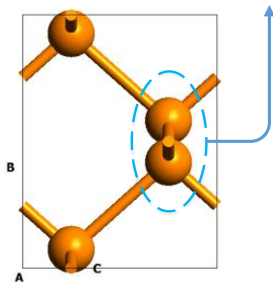
$$H = T + V_{elec} + V_{nuc} \quad (۳)$$

با ادغام ابزار CP2K و پارامترهای شبیه‌سازی در نرم‌افزار Atomistix Toolkit (ATK) برای فسفرین سیاه می‌توان به بررسی خواص الکترونیکی و دینامیکی این ماده دوبعدی پرداخت [۲۴]. نرم‌افزار ATK یکی از قدرتمندترین ابزارهای شبیه‌سازی در حوزه نانوالکترونیک و فیزیک ماده چگال است که امکان انجام محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) را فراهم می‌کند. در این مطالعه، از CP2K برای انجام محاسبات کوانتومی دقیق بر روی فسفرین سیاه استفاده می‌شود. برای این منظور، ابتدا نسخه مناسب از CP2K نصب شده و مسیر اجرایی آن در ATK تعیین می‌شود. سپس، ساختار اولیه فسفرین سیاه در قالب استاندارد در محیط ATK بارگذاری شده و تنظیمات مناسب برای تابع محاسباتی و مجموعه پایه انتخاب می‌شود.

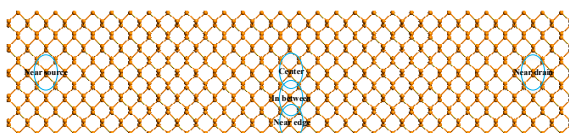


(الف)

موقعیت ایجاد نقص دو حفره ای در هر سلول واحد



(ب)



(ج)

شکل ۱- (الف) ساختار ترانزیستور اثرمیدانی تونلی نانونوار فسفرینی، (ب) سلول واحد فسفرین سیاه و (ج) موقعیت‌های مختلف نقص در راستای طول و عرض کانال

در ادامه، پارامترهای کلیدی شبیه‌سازی شامل مقدار چگالی قطع مش که محدوده امواج صفحه‌ای مورد استفاده در محاسبات را مشخص می‌کند، شرایط همگرایی خودسازگاری (SCF Convergence) که برای دقت محاسبات باید به‌درستی تعیین شود و شبکه نقاط k (K-Point Sampling)

اثرمیدانی تونلی نانونوار فسفرینی (PNR-TFET) بررسی می‌شود. دلیل استفاده از ساختار تونلی این است که برای طراحی مدارات با توان مصرفی پایین مناسب است [۱۷]. ادامه مقاله بصورت زیر ارائه می‌شود: ساختار قطعه و روش‌های محاسباتی بکار رفته در بخش ۲ بحث می‌شوند. نتایج شبیه‌سازی‌ها در بخش ۳ بررسی می‌شود. در پایان، نتایج در بخش ۴ خلاصه و جمع‌بندی می‌شود.

۲- ساختار قطعه و روش‌های محاسباتی

PNR-TFET نشان داده شده در شکل ۱ (الف) [۱۸] نشان می‌دهد که نانونوار فسفرینی با لبه زیگزاگ (ZPNR) به‌عنوان ماده کانال در نظر گرفته شده است و لایه ZPNR بین دو لایه اکسید با ثابت دی الکتریک $\epsilon_r = 3/9$ فشرده شده است. ضخامت اکسید معادل (EOT) 0.5 نانومتر است (EOT) یا ضخامت اکسید معادل، به ضخامت لایه اکسید سیلیکون اشاره دارد و معمولاً برای توصیف ضخامت اکسید در ترانزیستورهای اثر میدانی به کار می‌رود. با کاهش ضخامت پد عایق جریان نشتی افزایش می‌یابد و به یک مشکل جدی تبدیل می‌شود. برای حل این مشکل، استفاده از مواد جایگزین ضروری است. این مواد جدید، با داشتن ثابت دی الکتریک بالاتر، امکان استفاده از لایه‌های نازک‌تر را فراهم می‌کنند، در حالی که همچنان عملکرد مناسبی برای اکسید گیت حفظ شده و از افزایش جریان نشتی جلوگیری می‌شود. عرض و طول کانال به ترتیب برابر $2/3$ و $3/3$ نانومتر است. این ساختار کنترل شارش جریان و تونل زنی موثر حامل‌های بار را تسهیل می‌کند. کانال ذاتی در نظر گرفته شده است. دو پایانه گیت میزان تونل زنی حامل‌ها را تنظیم می‌کنند. اتصالات از گسترش دوپ شده فسفرین ساخته شده‌اند. به نواحی سورس و درین بترتیب با چگالی‌های ناخالصی $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ و $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ناخالصی افزوده شده است. در این ساختار اتم‌های لبه پهنای کانال نانونوار پسپو نشده‌اند.

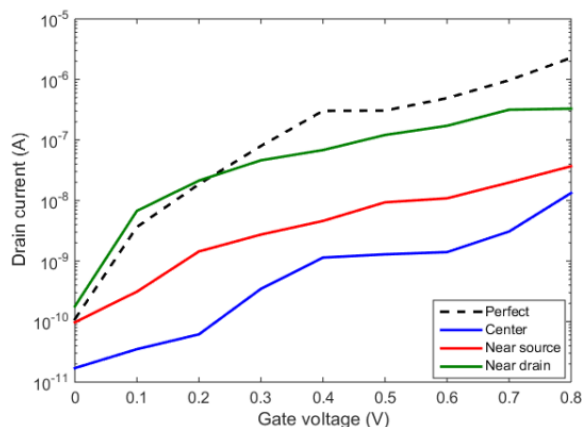
فسفرین سیاه دارای ساختاری لایه‌ای است که در آن اتم‌های فسفر به‌صورت ورقه‌های مواج در یک آرایش راست‌گوشه‌ای قرار دارند [۱۹]. این ماده در گروه فضایی C_{6v} متبلور می‌شود. این گروه فضایی نشان‌دهنده یک شبکه بلوری اورتورومبیک (راست‌گوشه‌ای) مرکزدار است که دارای تقارن‌های خاصی از جمله صفحه‌های تقارنی و مراکز وارونگی می‌باشد. سلول واحد اولیه فسفرین شامل چهار اتم فسفر است (شکل ۱ (ب)). بردارهای شبکه اولیه به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned} a &= (4.26\text{\AA}, 0, 0), b = (0, 4.3\text{\AA}, 0), \\ c &= (0, 0, 3.31\text{\AA}) \end{aligned} \quad (۲)$$

برای ایجاد یک سوپرسل در فسفرین سیاه، بردارهای جدید شبکه با ضرایب $1 \times 5 \times 3$ اعمال می‌شوند.

برای مدل کردن و آنالیز خواص الکترونی فسفرین، تعریف دقیقی از همیلتونی سیستم لازم است. در این مقاله از بسته نرم‌افزاری CP2K جهت این منظور استفاده شده است. در CP2K، همیلتونی نقش کلیدی در توصیف دینامیک سیستم مورد بررسی دارد. CP2K، یک بسته نرم‌افزاری با ساختار الکترونیکی و دینامیکی منبع باز است که قادر به انجام شبیه‌سازی‌های اتمی سیستم‌های ملکولی، مایع، حالت جامد و بیولوژیکی می‌باشد [۲۰]. در این نرم‌افزار، روش‌های محاسباتی بر پایه روش‌های تنگ‌بست بر پایه تابع چگالی (DFTB) می‌باشد [۲۱]. CP2K از DFTB بعنوان یکی از روش‌های محاسباتی جهت مطالعه خواص الکترونی سیستم‌ها استفاده می‌کند [۲۲]. DFTB روشی است که محاسبات DFT را با ساده‌سازی محاسبات ساختار الکترونی تخمین می‌زند. بیشتر کاربردهای با

راستای طول کانال نشان می‌دهد (شکل ۱(ج)). همانطور که در شکل نشان داده شده است، قرار گرفتن نقص دوحفره‌ای در هر سه موقعیت، باعث کاهش جریان روشن ترانزیستور می‌شود، که بیشترین کاهش مربوط به حالتی است که نقص در مرکز طول کانال قرار گرفته است، در حالی که جریان خاموشی وقتی که نقص نزدیک درین است، افزایش می‌یابد و در دو وضعیت دیگر، جریان خاموشی، کاهش می‌یابد که بیشترین کاهش جریان خاموشی مربوط به موقعیت نقص مرکز است.



شکل ۲- مشخصه‌های جریان درین بر حسب ولتاژ گیت با جابجایی نقص در طول کانال ($V_{DS}=0.5V$).

همانطور که در نمودارها مشاهده می‌شود در تمامی حالات جریان گیت با افزایش ولتاژ گیت افزایش می‌یابد. دلیل آن این است که اختلاف بین تراز فرمی کانال و تراز فرمی اتصالات با تغییر ولتاژ گیت در فسفرین تغییر می‌کند و این امر محدوده انتقال حامل‌ها را در مناطقی با چگالی حالات محلی (LDOS) بالاتر قرار می‌دهد. به منظور بررسی دقیق‌تر رفتار انتقال حامل‌ها، و قتیکه حامل‌ها در طول کانال ZPNR سیر می‌کنند، نمودار LDOS در این مقاله بررسی می‌شود. شکل ۳ نمودار LDOS را برای ساختار متعارف و ساختار در سه موقعیت مختلف نقص، مقایسه می‌کند. وقتی ولتاژ گیت صفر است، محدوده انتقال الکترون در میانه شکاف باند قرار می‌گیرد و شکاف باند مانع انتقال حامل‌ها به سمت درین می‌شود که منجر به کاهش جریان خاموشی می‌شود.

شکل ۴ نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (Energy Resolved Current Spectrum) را در حالت خاموشی نشان می‌دهد. سطح زیر نمودار متناسب با مقدار جریان درین می‌باشد. همانطور که در شکل نشان داده شده است در حالتی که نقص در مرکز است، سطح زیر نمودار کمترین مقدار را دارد و هرچه سطح زیر نمودار افزایش یابد، جریان خاموشی نیز افزایش می‌یابد. از نتایج دو نمودار قبلی می‌توان دریافت که دو نوع انتقال الکترونی در ایجاد جریان نقش دارند. جریان ناشی از انتقال اول که در محدوده انرژی بالاتر قرار دارد به دلیل انتقال حامل‌ها در اثر تونل زنی در سد سورس است. درحالی که جریان ناشی از انتقال دوم در محدوده انرژی پایین‌تر به دلیل تونل زنی میان سورس و درین روی می‌دهد.

که برای شبیه‌سازی سیستم‌های دوره‌ای مورد نیاز است، تنظیم می‌شوند. پس از انجام شبیه‌سازی، نتایج به‌دست آمده شامل خواص الکترونیکی، توابع چگالی و انرژی کل مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد. استفاده از CP2K در Atomistix Toolkit برای بررسی فسفرین سیاه امکان انجام شبیه‌سازی-های دقیق و کارآمد در مقیاس نانو را فراهم آورده و پژوهشگران را قادر می‌سازد تا درک عمیق‌تری از رفتار الکترونیکی و دینامیکی این ماده به‌دست آورند. جزئیات روابط و پارامترهای شبیه‌سازی شده در ادامه بیان می‌شوند.

تابع گرین بازگشتی/پیشرفته در NEGF بصورت زیر تعریف می‌شود [۲۵، ۲۶]:

$$G^r/a = (EI - H - \Sigma_S - \Sigma_D)^{-1} \quad (4)$$

که Σ_S و Σ_D ماتریس‌های خودانرژی برای اتصالات سورس و درین می‌باشند. برای تعیین پتانسیل الکترواستاتیکی که در این ساختار، از توزیع بار تاثیر می‌پذیرد، از حل خودسازگار معادله پواسون با فرمولاسیون NEGF استفاده می‌شود [۲۷-۳۱].

در این مقاله، چگالی قطع مش 150Ry استفاده شده است و نمونه برداری نقطه K از نوع Monkhorst-Pack بصورت $16 \times 16 \times 1$ جهت شبیه‌سازی قطعه استفاده شده است. محاسبات در دمای ۳۰۰ درجه کلون انجام شده است. ضریب انتقال $T(E, k_x)$ برای k_x و انرژی E داده شده برابر است با [۳۲-۳۷]:

$$T(E, k_x) = \text{Tr} [G^r(E, k_x), \Gamma_S(E, k_x), G^a(E, k_x), \Gamma_D(E, k_x)] \quad (5)$$

$$\Gamma_{S/D}(E, k_x) = i(\Sigma_{S/D}^r(E, k_x) - \Sigma_{S/D}^a(E, k_x)) \quad (6)$$

که پهن شدگی اتصالات می‌باشد، و

$$\Sigma_{S/D}^{r/a}(E, k_x) \quad (7)$$

ماتریس‌های خود انرژی می‌باشند. جریان الکتریکی با استفاده از روش لندر-بوتیکر محاسبه می‌شود [۲۷].

$$I = \int J(E) dE \quad (8)$$

که $J(E)$ طیف جریان energy-resolved می‌باشد و بصورت زیر تعریف می‌شود.

$$J(E) = \frac{2q}{h} [f(E - E_{FS}) - f(E - E_{FD})] T_r(E) \quad (9)$$

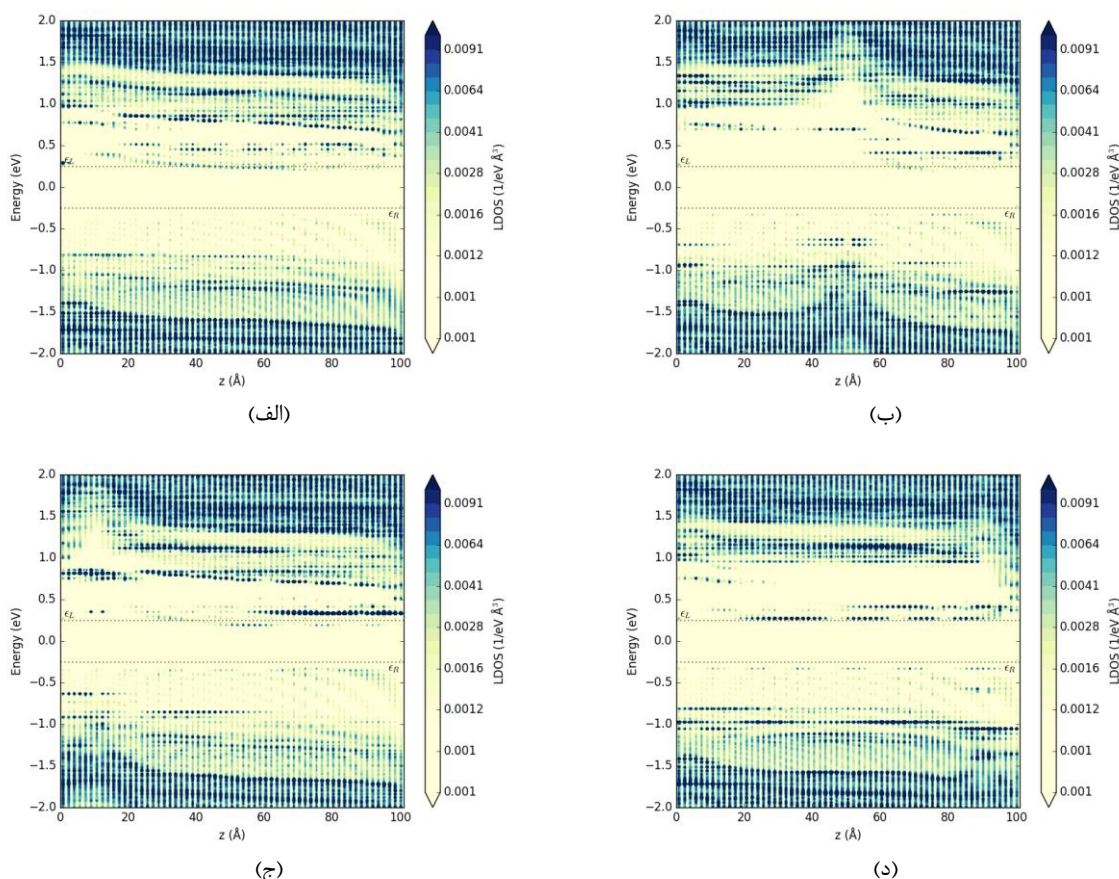
که $T_r(E)$ میزان انتقال در تراز انرژی معین و $E_{FS/D}$ تراز فرمی در اتصال است.

جهت تضمین صحت نتایج و ارزیابی‌ها، ساختار پایه به همراه مشخصات فوق‌الذکر از یک مقاله معتبر اقتباس شده است [۳۸، ۳۹]. در این پژوهش، نتایج مقاله با یک کار شبیه‌سازی معتبر تطبیق داده شده است.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- بررسی تغییر موقعیت نقص در راستای طول کانال

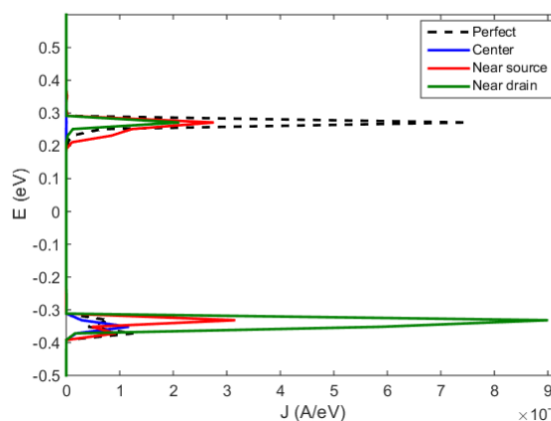
شکل ۲ مشخصه جریان درین بر حسب ولتاژ گیت را برای ساختار ایده‌آل و ساختارهای با حضور نقص در سه موقعیت مختلف "نزدیک به سورس" (Near source) و "مرکز" (Center) و "نزدیک به درین" (Near drain) در



شکل ۳- نمودار چگالی حالات محلی (LDOS) در حالت خاموشی (الف) متعارف (ب) نقص در مرکز (ج) نقص نزدیک سورس (د) نقص نزدیک درین ($V_{DS}=0.5V$).

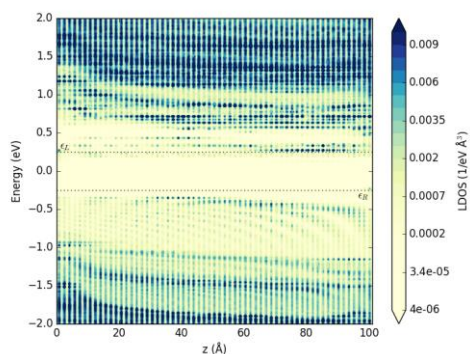
سورس به درین از طریق ناحیه ظرفیت کانال کمک نماید بشرطی که این ناحیه در حوالی پنجره انرژی سورس و درین (میان ترازهای فرمی سورس و درین) قرار گیرد. به عنوان مثال ترازهای ایجاد شده در نقص نزدیک به درین بخوبی به تونل زنی میان درین و سورس کمک نموده‌اند. این نتایج با خروجی شکل ۲ همخوانی دارد و بیشترین مقدار سطح زیر نمودار مربوط به حالتی است که نقص نزدیک درین است که در این حالت بیشترین جریان خاموشی را نیز مطابق شکل ۲ نشان می‌دهد.

شکل ۵ نمودار LDOS را در حالت روشن نشان می‌دهد. وقتی ولتاژ گیت افزایش می‌یابد، لبه باند هدایت به انرژی‌های پایین‌تر شیف می‌یابد و انتقال حامل در ناحیه هدایت کانال قرار می‌گیرد. زمانی که تعداد حالت‌ها افزایش می‌یابد، الکترون‌های بیشتری از سمت سورس به سمت درین حرکت می‌کنند و در نتیجه جریان افزایش می‌یابد. نقص توزیع چگالی حالات محلی را در زیرباندهای باند هدایت به هم می‌ریزد [۹] و نواحی با این نقص حالت‌های جایگزیده ایجاد می‌کنند که حامل‌ها را در مسیر انتقال به دام می‌اندازند [۱۰] و منجر به کاهش ظرفیت انتقال و نهایتاً کاهش جریان الکتریکی در حالت روشن می‌شوند. شکل ۶ نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (Energy Resolved Current Spectrum) را در حالت روشن نشان می‌دهد. همانطور که در شکل نشان داده شده است

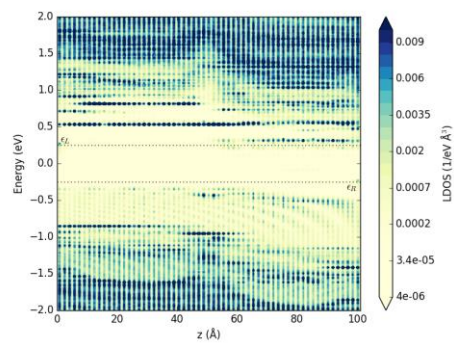


شکل ۴- نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (energy resolved current spectrum) را در حالت خاموش و با جابجایی نقص در طول کانال ($V_{DS}=0.5V$).

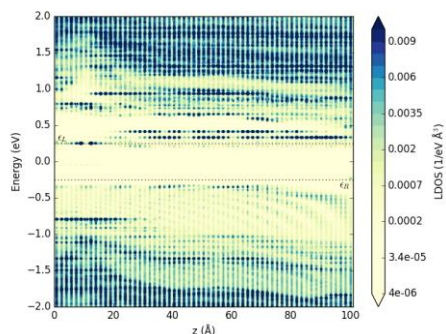
نقص‌ها در طول کانال، تونل زنی باند به باند را کاهش می‌دهند. در واقع اینگونه نقص‌ها حالت‌های جایگزیده (localized states) در ناحیه هدایت کانال ایجاد می‌کنند که انتقال باند به باند را در فصل مشترک سورس کانال کاهش می‌دهند. از طرفی دیگر طیف جریان نشان می‌دهد که ترازهای ایجاد شده در اثر ایجاد نقص دو حفره‌ای می‌تواند به انتقال حامل‌ها از



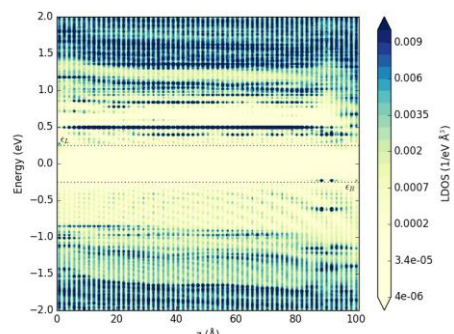
(الف)



(ب)

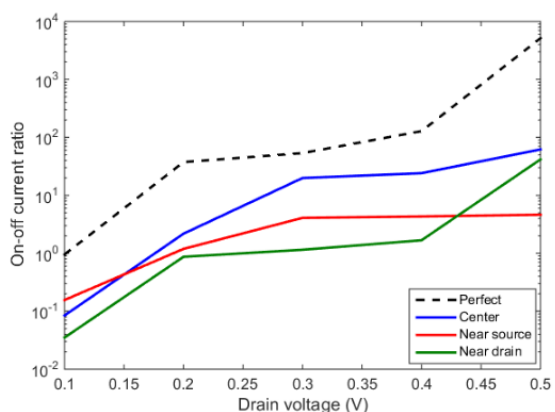


(ج)

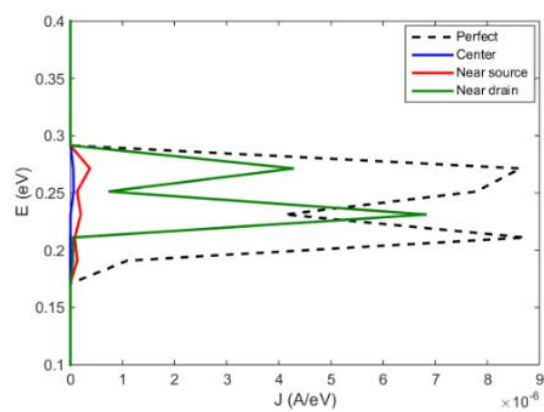


(د)

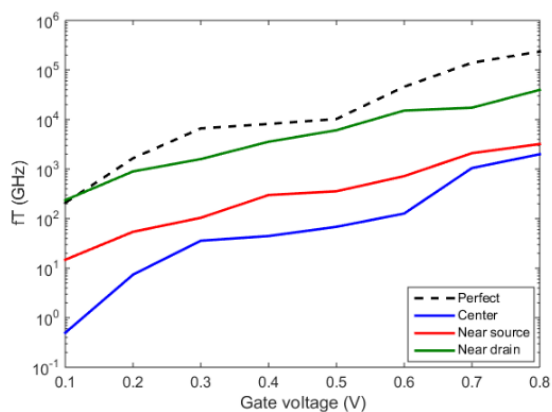
شکل ۵- نمودار چگالی حالات محلی (LDOS) در حالت روشن (الف) متعارف (ب) نقص در مرکز (ج) نقص نزدیک سورس (د) نقص نزدیک درین ($V_{DS}=0.5V$).



شکل ۷- نمودار نسبت جریان روشن به خاموش بر حسب ولتاژ درین با جابجایی نقص در طول کانال.

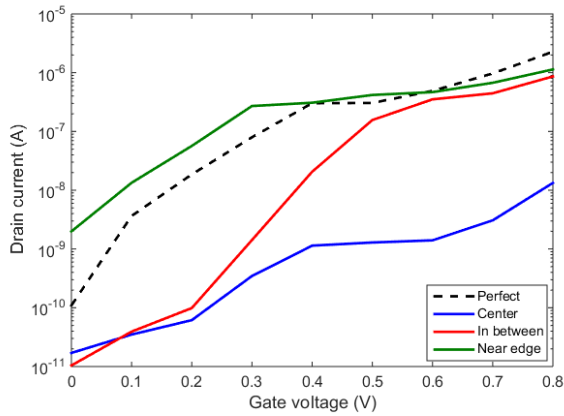


شکل ۶- نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (energy resolved current spectrum) در حالت روشن و با جابجایی نقص در طول کانال ($V_{DS}=0.5V$).

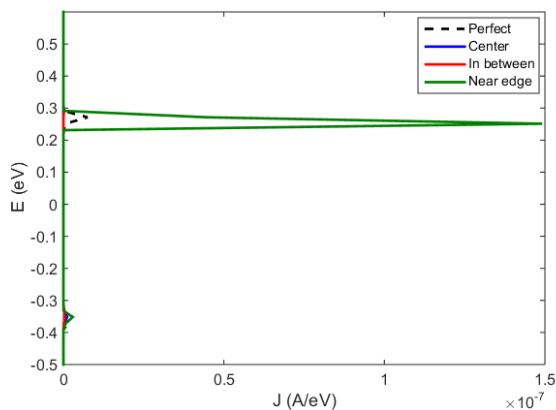


شکل ۸- نمودار فرکانس قطع بر حسب ولتاژ گیت با جابجایی نقص در طول کانال ($V_{DS}=0.5V$).

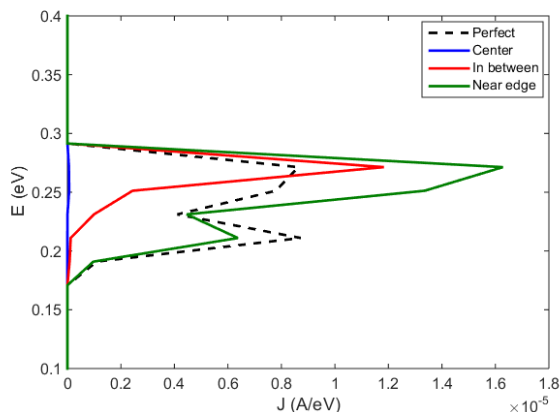
در حالتی که نقص در مرکز است، سطح زیر نمودار کمترین مقدار را دارد و هرچه سطح زیر نمودار افزایش یابد، جریان روشن نیز افزایش می‌یابد که این رفتار نیز با نتایج شکل ۲ همخوانی دارد. شکل ۷ نمودار نسبت جریان روشن به خاموش را نشان می‌دهد که در هر سه موقعیت نقص، نسبت جریان روشن به خاموش کاهش می‌یابد که کمترین کاهش مربوط به حالتی است که نقص در مرکز طول کانال قرار دارد و به مقدار تقریبی ۵۰ می‌رسد. کاهش بیشتر جریان خاموشی در این حالت عامل کاهش کمتر نسبت جریان روشن به خاموش است.



شکل ۹- مشخصه‌های جریان درین بر حسب ولتاژ گیت با جابجایی نقص در عرض کانال ($V_{DS}=0.5V$).



شکل ۱۰- نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (energy resolved current spectrum) را در حالت خاموش و با جابجایی نقص در عرض کانال ($V_{DS}=0.5V$).



شکل ۱۱- نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (energy resolved current spectrum) در حالت روشن و با جابجایی نقص در عرض کانال ($V_{DS}=0.5V$).

که در آن موارد اثر تونل زنی سورس به درین برجسته بود. جریان روشن نیز در دو حالت مرکز و میانه عرض کانال کاهشی می‌باشد که بیشترین کاهش مربوط به حالتی است که نقص در مرکز قرار دارد. شکل ۱۱ نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (Energy Resolved Current

به عبارتی دیگر زمانی که نقص در مرکز کانال واقع شود تاثیر مشابهی را بر روی جریان‌های خاموش و روشن ترانزیستور با ایجاد حالت‌های جایگزیده در مسیر انتقال حامل‌ها دارد و منجر به تاثیر منفی کمتری بر نسبت جریان روشن به خاموش می‌گردد. در انتهای این بخش، فرکانس قطع f_T با معادلات زیر بررسی می‌شوند.

$$g_m = \frac{\partial I_D}{\partial V_G} \quad (10)$$

و

$$f_T = \frac{g_m}{2\pi C_G} \quad (11)$$

که در آنها g_m رسانایی و C_G مقدار خازن گیت است [۴۰]. شکل ۸ نمودار فرکانس قطع بر حسب ولتاژ گیت را نشان می‌دهد که در هر سه حالت وجود نقص، فرکانس قطع را کاهش می‌دهد که بیشترین کاهش مربوط به زمانی است که نقص در مرکز قرار گرفته است و کمترین کاهش مربوط به حضور نقص در موقعیت نزدیک به درین است.

فرکانس قطع با مقدار جریان روشن نسبت مستقیم و با مقدار خازن گیت نسبت عکس دارد. در حالت روشن، نقص‌ها در ناحیه هدایت تولید حالت‌های جایگزیده می‌کنند و در نتیجه حامل‌های انتقالی از سورس به درین را به دام می‌اندازند. این امر باعث کاهش سرعت انتقال حامل‌ها شده و از اینرو رسانایی انتقالی و فرکانس قطع را کاهش می‌دهند [۴۱]. همانطور که وجود نقص در میانه کانال بیشترین تاثیر را در کاهش جریان درین دارد، در این موقعیت نقص، کمترین مقدار فرکانس قطع نیز مشاهده می‌شود. زمانی که نقص در نزدیکی درین واقع شده است، به علت سرعت بالاتر حامل‌ها در انتهای کانال، تاثیر حالت‌های جایگزیده در به دام انداختن حامل‌ها کمتر خواهد شد. در نتیجه افت کمتری را در فرکانس قطع مشاهده خواهیم نمود. با توجه به نمودارها چنین به نظر می‌رسد که نقص نزدیک به سورس، سد سورس کانال را تقویت کرده است. بطوریکه باعث می‌شود تعداد کمتری حامل بتوانند از این سد عبور کرده و وارد کانال شوند. این کاهش جریان، اثر منفی بر روی فرکانس قطع می‌گذارد.

در واقع حضور نقص در مرکز کانال بهترین عملکرد را در بین سه موقعیت نقص در طول کانال از نظر دیجیتال با حداقل کاهش نسبت جریان روشن به خاموش و بدترین عملکرد را از نظر آنالوگ با حداکثر کاهش فرکانس قطع ایجاد می‌کند.

۳-۲- بررسی تغییر موقعیت نقص در راستای عرض کانال

شکل ۹ نمودار جریان درین بر حسب ولتاژ گیت را در سه موقعیت مختلف نقص در راستای عرض کانال ("مرکز" Center، "میانه" In Between، "نزدیک لبه" near Edge (شکل ۱)) نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد وقتی نقص نزدیک لبه است، جریان خاموشی افزایش می‌یابد و در دو حالت دیگر جریان خاموشی کاهش می‌یابد. شکل ۱۰ نمودار طیف جریان بر حسب انرژی (Energy Resolved Current Spectrum) را در حالت خاموشی نشان می‌دهد. سطح زیر نمودار متناسب با مقدار جریان درین می‌باشد. همانطور که در شکل نشان داده شده است در حالتی که نقص در میانه است، سطح زیر نمودار کمترین مقدار را دارد و هرچه سطح زیر نمودار افزایش یابد، جریان خاموشی نیز افزایش می‌یابد، بیشترین مقدار سطح زیر نمودار مربوط به حالت نقص در لبه کانال است که در شکل ۹ نیز بیشترین مقدار جریان خاموشی مربوط به این حالت می‌باشد. با بررسی دقیق‌تر مشاهده می‌شود که افزایش جریان خاموشی در اثر نقص نزدیک به لبه به دلیل تونل زنی بالاتر باند به باند (انرژی های بالاتر) محقق شده است. این افزایش جریان خاموشی منشأی متفاوت با افزایش جریان خاموشی در اثر جابجایی نقص در طول کانال دارد

۴- نتیجه گیری:

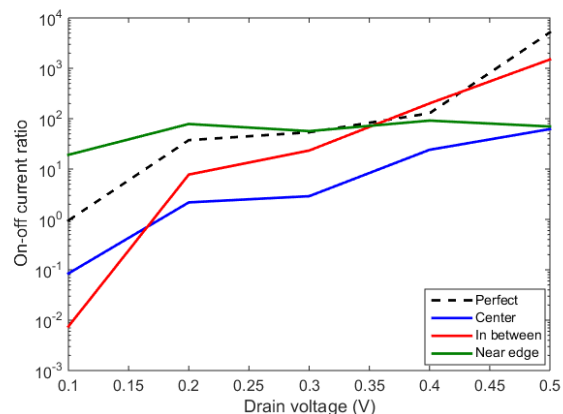
تأثیر موقعیت نقص دو حفره‌ای بر عملکرد ترانزیستورهای اثر میدانی تونلی نانونوار فسفرینی با لبه زیگزاگ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که قرار گرفتن نقص دو حفره‌ای در هر شش موقعیت (سه موقعیت طولی و سه موقعیت عرضی)، باعث کاهش جریان روشن ترانزیستور می‌شود، که بیشترین کاهش مربوط به حالتی است که نقص در مرکز طول و عرض کانال قرار گرفته است. در حالی که جریان خاموشی وقتی که نقص نزدیک درین و یا نزدیک لبه عرض کانال است، افزایش می‌یابد و در چهار وضعیت دیگر، جریان خاموشی، کاهش می‌یابد که بیشترین کاهش جریان خاموشی مربوط به موقعیت نقص در مرکز طول کانال و موقعیت میانه عرض کانال است. نسبت جریان روشن به خاموش نیز در هر همه حالت‌ها کاهش می‌یابد، بهترین عملکرد نسبت جریان روشن به خاموش در ساختاری با نقص در میانه عرض کانال مشاهده می‌شود. فرکانس قطع نیز در تمامی موقعیت‌ها نقص کاهشی است که بیشترین کاهش فرکانس قطع مربوط به حالتی است که نقص در مرکز طول کانال یا در مرکز عرض کانال قرار گرفته است. کمترین کاهش فرکانس قطع در حالت قرارگیری نقص در موقعیت میانه لبه عرض کانال رخ می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که حضور نقص دو حفره‌ای در موقعیت میانه عرض کانال کمترین تأثیر منفی را بر روی عملکرد دیجیتال و آنالوگ نسبت به بقیه موقعیت‌ها دارد. شایان ذکر است که بررسی تأثیر تغییر عرض نانونوار می‌تواند به تعمیم‌پذیری نتایج کمک کند. این موضوع به عنوان مسیر پژوهشی آینده پیشنهاد می‌شود.

مراجع

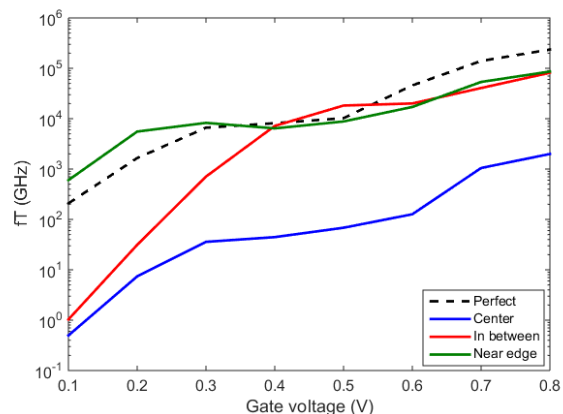
- [1] A.R. Urade, I. Lahiri, and K.S. Suresh, "Graphene properties, synthesis and applications: a review," Jom, vol. 75, no. 3, pp.614-630. 2023.
- [2] Z. Hamzavi-Zarghani, and A. Yahaghi, "Using Graphene for Tunable Scattering Manipulation of Dielectric Cylinder," Tabriz Journal of Electrical Engineering, vol. 49, no. 4, pp.1570-1576, 2019.
- [3] C. Grazianetti, E. Cinquanta, and A. Molle, "Two-dimensional silicon: the advent of silicone," 2D Materials, vol. 3, no.1, p.012001. 2016.
- [4] J. Sun, X. Li, W. Guo, M. Zhao, X. Fan, Y. Dong, C. Xu, J. Deng, and Y. Fu, "Synthesis methods of two-dimensional MoS₂: A brief review," Crystals, vol. 7, no. 7, p.198. 2017.
- [5] S. Roy, X. Zhang, A.B. Puthirath, A. Meiyazhagan, S. Bhattacharyya, M.M. Rahman, G. Babu, S. Susarla, S.K. Saju, M.K. Tran, and L.M. Sassi, "Structure, properties and applications of two-dimensional hexagonal boron nitride," Advanced Materials, vol. 33, no.44, p.2101589, 2021.
- [6] J. Wang, and S. Wang, "A critical review on graphitic carbon nitride (g-C₃N₄)-based materials: Preparation, modification and environmental application," Coordination Chemistry Reviews, 453, p.214338. 2022.
- [7] W. Zhang, X. Zhang, L.K. Ono, Y. Qi, and H. Oughaddou, "Recent advances in phosphorene: structure, synthesis, and properties," Small, vol. 20, no.4, p.2303115. 2024.
- [8] L. Ding, P. Shao, Y. Yin, and F. Ding, "Synthesis of 2D Phosphorene: Current Status and Challenges," Advanced Functional Materials, p.2316612, 2024.
- [9] M.B. Nasrollahnejad, and P. Keshavarzi, "Inverse Stone Throwers Wales defect and enhancing ION/IOFF ratio and subthreshold swing of GNR transistors," The European Physical Journal Applied Physics, vol. 86, no.2, p.20202.2019.
- [10] H. Owlia, and P. Keshavarzi, "Locally defect-engineered graphene nanoribbon field-effect transistor," IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 63, no.9, pp.3769-3775. 2016.

(Spectrum) را در حالت روشن نشان می‌دهد. سطح زیر نمودار هنگامی که نقص در مرکز عرض کانال است، کمترین مقدار را دارد که در شکل ۹ نیز کمترین جریان روشن مربوط به این حالت می‌باشد. از آنجا که نقص‌های دو حفره‌ای ترازهای جایگزیده در ناحیه هدایت کانال در جریان روشن ایجاد می‌کنند، چنین استنباط می‌شود که عمده حامل‌ها از وسط عرض کانال عبور کرده و با نزدیک شدن به لبه‌ها چگالی حامل‌های عبوری کاهش می‌یابند. از این رو نقص در مرکز بر روی بخش بزرگتری از حامل‌های عبوری نسبت به نقص نزدیک لبه اثرگذار است.

شکل ۱۲ نمودار نسبت جریان روشن به خاموش را با در نظر گرفتن جابجایی نقص در عرض کانال نشان می‌دهد که در هر سه موقعیت نقص، نسبت جریان روشن به خاموش در ولتاژ درین ۰/۵ ولت کاهش می‌یابد که کمترین کاهش مربوط به حالتی است که نقص در میانه قرار دارد که به مقدار تقریبی ۱۶۰۰ می‌رسد. این تغییر کم نسبت جریان روشن به خاموش، بعلت کاهش قابل ملاحظه جریان خاموشی در این حالت است که از کاهش قابل توجه نسبت جریان روشن به خاموش جلوگیری می‌کند. شکل ۱۳ نمودار فرکانس قطع بر حسب ولتاژ گیت را نشان می‌دهد که در هر سه حالت وجود نقص، فرکانس قطع را کاهش می‌دهد که بیشترین کاهش مربوط به زمانی است که نقص در مرکز عرض کانال قرار گرفته است و کمترین کاهش مربوط به حالت نقص نزدیک موقعیت میانه و لبه عرض کانال است که این رفتار با توجه به مشخصه جریان ولتاژ مشابه این دو موقعیت نقص در ولتاژهای بالای گیت در شکل ۹ مورد انتظار است.



شکل ۱۲- نمودار نسبت جریان روشن به خاموش بر حسب ولتاژ درین با جابجایی نقص در عرض کانال.



شکل ۱۳- نمودار فرکانس قطع بر حسب ولتاژ گیت با جابجایی نقص در عرض کانال ($V_{DS}=0.5V$).

- [31] G. Liang, N. Neophytou, M.S. Lundstrom, and D.E. Nikonov, "Computational study of double-gate graphene nano-ribbon transistors," *Journal of Computational Electronics*, vol. 7, pp.394-397, 2008.
- [32] M.A., Hasan, S.S. Nishat, M. Hossain, and S. Islam, "Influence of Device Parameters on Performance of Ultra-Scaled Graphene Nanoribbon Field Effect Transistor," *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, vol. 9, no. 12, p.121006, 2020.
- [33] A. Naderi, "Double gate graphene nanoribbon field effect transistor with single halo pocket in channel region," *Superlattices and Microstructures*, vol. 89, pp.170-178, 2016.
- [34] E. Suhendi, L. Hasanah, D. Rusdiana, F.A. Noor, and N. Kurniasih, "Comparison of tunneling currents in graphene nanoribbon tunnel field effect transistors calculated using Dirac-like equation and Schrödinger's equation," *Journal of Semiconductors*, vol. 40, no. 6, p.062002, 2019.
- [35] H. Shamloo, and A.Y. Goharizi, "Performance study of tunneling field effect transistors based on the graphene and phosphorene nanoribbons," *Micro and Nanostructures*, vol. 169, p.207336, 2022.
- [36] Poljak, M. and Suligoj, T., "The potential of phosphorene nanoribbons as channel material for ultrascaled transistors," *IEEE transactions on electron devices*, 65(1), pp.290-294, 2017.
- [37] Pantis-Simut, C.A., Preda, A.T., Filipoiu, N., Allosch, A. and Nemnes, G.A., "Electric-field control in phosphorene-based heterostructures," *Nanomaterials*, vol. 12, no. 20, p.3650, 2022.
- [38] H. Li, J. Tie, J. Li, M. Ye, H. Zhang, X. Zhang, Y. Pan, Y. Wang, R. Quhe, F. Pan, and J. Lu, "High-performance sub-10-nm monolayer black phosphorene tunneling transistors," *Nano Research*, vol. 11, pp. 2658-2668, 2018.
- [39] H. Li, B. Shi, Y. Pan, J. Li, L. Xu, L. Xu, Z. Zhang, F. Pan, and J. Lu, "Sub-5 nm monolayer black phosphorene tunneling transistors," *Nanotechnology*, vol. 29, no. 48, p. 485202, 2018.
- [40] A. Khodabakhsh, A. Amini, and A. Afzal, "Phosphorus-based heterojunction tunnel field-effect transistors: from atomic insights to circuit renovations," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 27, no. 3, pp. 1459-1472, 2025.
- [41] K. Ganapathi, Y. Yoon, M. Lundstrom, and S. Salahuddin, "Ballistic IV characteristics of short-channel graphene field-effect transistors: Analysis and optimization for analog and RF applications," *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 60, No. 3, pp. 958–964, 2013.
- [11] H. Owlia, P. Keshavarzi, and M.B. Nasrollahnejad, "Effects of Stone-Wales defect position in graphene nanoribbon field-effect transistor," *J. Nano Electr. Phys.* Vol.9, no. 6, p. 06008, 2017.
- [12] H. Owlia, "Effects of passivation type on electrical transport of a defect-engineered graphene nanoribbon FET," *Journal of Computational Electronics*, vol. 22, no. 2, pp.626-633, 2023.
- [13] M.B. Nasrollahnejad, and P. Keshavarzi, "Inverse Stone-Thrower-Wales defect and transport properties of 9AGNR double-gate graphene nanoribbon FETs," *Journal of Central South University*, vol. 26, no.11, pp.2943-2952, 2019.
- [14] J. Gao, J., Zhang, H. Liu, Q. Zhang, and J. Zhao, "Structures, mobilities, electronic and magnetic properties of point defects in silicone," *Nanoscale*, vol. 5, no. 20, pp.9785-9792, 2013.
- [15] F. Wan, X. Wang, Y. Guo, J. Zhang, Z. Wen, and Y. Li, "Role of line defect in the bandgap and transport properties of silicene nanoribbons," *Physical Review B*, vol.104, no.19, p.195413,2021.
- [16] W. Hu, and J. Yang, "Defects in phosphorene," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 119, no. 35, pp.20474-20480, 2015.
- [17] A. H. Bayani, D. Dideban, and N. Moezi, "Reducing Ambipolar Current in Germanene Nanoribbon Tunneling Field Effect Transistor (GeNR-TFET) using Gate-Drain Overlap and Decreasing Doping Density in the Drain Side," *Tabriz Journal of Electrical Engineering*, vol. 49, no. 4, pp.1521532, 2019.
- [18] H. Owlia, and M.B. Nasrollahnejad, "Exploring performance characteristics via edge configuration in black phosphorene TFETs," *International Journal of Modern Physics B*, p.2540048, 2024.
- [19] H. Mamori, A. Al Shami, L. Attou, A. El Kenz, A. Benyoussef, A. Taleb, A. El Fatimy, and O. Mounkachi, "Layer engineering in optoelectronic and photonic properties of single and few layer phosphorene using first-principles calculations," *RSC advances*, Vol. 14, No. 1, pp. 608–615, 2024.
- [20] T.D. Kühne, M. Iannuzzi, M. Del Ben, V.V. Rybkin, P. Seewald, F. Stein, T. Laino, R.Z. Khaliullin, O. Schütt, F. Schiffmann, and D. Golze, "CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package-Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 152, no.19, 2020.
- [21] G. Murdachaew, C.J. Mundy, G.K. Schenter, T. Laino, and J. Hutter, "Semiempirical Self-Consistent Polarization Description of Bulk Water, the Liquid-Vapor Interface, and Cubic Ice," *J Phys Chem A*, vol.115, no. 23, pp. 6046–6053, 2011.
- [22] The CP2K simulation package, Available online at: <https://www.cp2k.org>. Accessed 10 February 2025.
- [23] R.G. Parr, W. Yang, "Density-Functional Theory of Atoms and Molecules," Oxford University Press, Oxford, 1995.
- [24] QuantumATK (ATK-VNL 2016), Available online at: <https://www.synopsys.com/manufacturing/quantumatk.html>. Accessed 10 February 2025.
- [25] H. Owlia, and P. Keshavarzi, "A bilayer graphene nanoribbon field-effect transistor with a dual-material gate," *Materials Science in Semiconductor Processing*, 39, pp.636-640, 2015.
- [26] H. Owlia, and R. Fazli, "Bilayer graphene nanoribbon field-effect transistor with electrically embedded source-side gate," *Superlattices and Microstructures*, vol. 142, p.106525, 2020.
- [27] H. Owlia, M.B. Nasrollahnejad, and R. Fazli, "Phosphorene nanoribbon field effect transistor with a dual material gate," *Engineering Research Express*, vol.6, no. 2, pp. 025362(1-10), 2024.
- [28] H. Shamloo, and A.Y. Goharizi, "Performance study of tunneling field effect transistors based on the graphene and phosphorene nanoribbons," *Micro and Nanostructures*, vol. 169, p.207336, 2022.
- [29] M.K. Anvarifard, Z. Ramezani, and S.A. Ghoreishi, "A ballistic transport nanodevice based on graphene nanoribbon FET by enhanced productivity for both low-voltage and radio-frequency scopes," *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, vol. 11, no.6, p.061008, 2022.
- [30] S.S. Ghoreishi, and R. Yousefi, "A computational study of a novel graphene nanoribbon field effect transistor," *International Journal of Modern Physics B*, vol. 31, no. 9, p.1750056, 2017.