15:00~15:30

First-principles Quantum-transport Calculations of TMD/Metal Contact

楊琮甫 陳竑任 洪崇銘 陳亭羽 林炯源
交大電子所
ycf777@nctu.edu.tw

Abstract

已知目前研究 TMD/Metal Contact 結構的模型主要分為:top, side, edge, C 等 4 種，其中後兩種屬於發揮 side-contact 優點的衍生型，如圖(1)。由於 top-contact 因受制於凡德瓦間隙(vdW-gap)之影響、導致 TMD/Metal 介面接觸電阻增加。而 side-contact 則因側面接觸 TMD、所以不會有來自 TMD 垂直面之 vdW-gap 的影響，故可使金屬電極(Lead $_{Metal}$)與 TMD 中間的金屬(TMD $_{Metal}$) 兩者原子接觸間距縮小，使裸露於 TMD 側截面的 TMD $_{Metal}$ 與 Lead $_{Metal}$ 較容易產生金屬鍵結，故而大幅降低接觸電阻。因此本研究重點將放在 side-contact 為主來進行研究，我們選擇 4 種 TMD 材料如：WS_2, WSe_2, MoS_2 及 $MoSe_2$ 作為通道材料，與 5 種 Lead $_{Metal}$ 如: Pt, Al, Ti, Au, Cu 結合之 side-contact 模型。透過第一原理的 DFT 方法，使用 VASP 軟件包來進行結構優化(relax)，與晶格匹配分析，各種金屬電極經模擬計算後皆選擇晶格匹配度最低的 FCC(面心立方)之 110 晶向來與 TMD 建模，如圖(2-b)。最後使用非平衡格林函數(NEGF)量子傳輸之 nanodcal 軟件包計算各種 TMD/Metal 之 side-contact 模型的 IV 曲線。

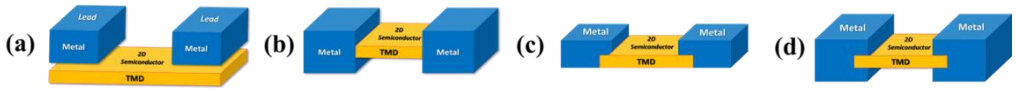

FIG.1 (a) top-contact, (b) side-contact, (c) edge-contact, (d) C-contact .

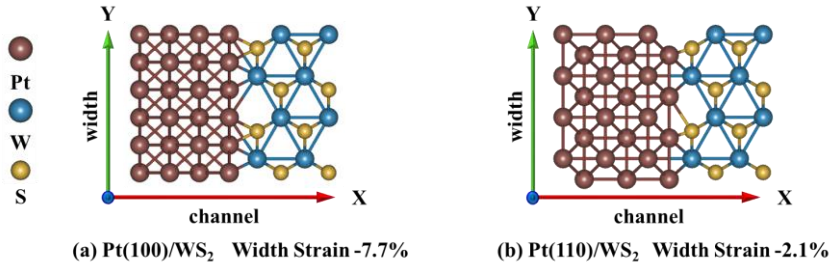

FIG.2, Pt/WS_2 在 Side-contact 中 Pt 金屬的兩種晶格匹配度 (a) Pt(100)/WS_2 strain -7.7% (b) Pt(110)/WS_2 strain -2.0%，很明顯 Pt(110)之晶格匹配較不失真。