

Оригінальна стаття

<https://doi.org/10.26565/2311-0872-2025-43-05>

УДК 621.382.2

**О. В. БОЦУЛА**, к. ф.-м. наук, доцент

e-mail: [oleg.botsula@karazin.ua](mailto:oleg.botsula@karazin.ua) ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-2809-9482>

**К. Г. ПРИХОДЬКО**, к. ф.-м. наук, доцент

e-mail: [kyrylo.prykhodko@karazin.ua](mailto:kyrylo.prykhodko@karazin.ua) ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7627-1171>

**В. О. ЗОЗУЛЯ**, доктор філософії, н.с.

e-mail: [v.zozulia@karazin.ua](mailto:v.zozulia@karazin.ua) ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-7371-5424>

**Д. О. ШТОДА**, н.с.

e-mail: [dshtoda@karazin.ua](mailto:dshtoda@karazin.ua) ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-9831-6510>

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, 61022, м. Харків, майдан Свободи, 4

## ПЛАНАРНІ ГІБРИДНІ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ НА ОСНОВІ СИСТЕМИ GaN - МОНОШАР

**Актуальність.** Графеноподібні двовимірні (2D) матеріали розглядаються, як найбільш перспективні для створення майбутньої елементної бази електроніки. Взаємодії між шарами двовимірних матеріалів не обмежені хімічним зв'язком і узгодженням міжфазної решітки, що створює умови для формування гетеропереходів як із різних 2D матеріалів, так і утворення гібридних 2D/3D гетеропереходів, які мають багато унікальних характеристик і можливостей для застосування. Вивчення гетеропереходів 2D/3D та можливостей їх використання як елементів приладів електроніки для покращення або зміни їх властивостей є однією з актуальних задач.

**Метою роботи** є визначення характеристик планарних діодів на основі об'ємних матеріалів (GaN), в яких моношари виступають в ролі конструктивних елементів, утворюючи 2D/3D гетероперехід з каналом діода.

**Методи і методологія.** Проводиться математичне моделювання процесів переносу зарядів з використанням двовимірної моделі планарного діода з використанням багатокомпонентного методу Монте-Карло. Переходи за участю фононів розглядаються як основний механізм перерозподілу носіїв заряду між областями різної розмірності. Аналізується використання каналу на основі дихалькогеніту молібдену ( $\text{MoS}_2$ ), що утворює гетероперехід з GaN - каналом діода. Аналізуються особливості формування областей просторового заряду на 2D/3D – гетерограниці. Визначаються статичні характеристики діодів.

**Результати.** Отримано розподіли носіїв заряду в каналі діода, у відповідності до співвідношення концентрації легуючої домішки в моношарі і каналі. Досліджено вплив моношару на середню концентрацію електронів в каналі. Отримані залежності струму в діоді з моношаром від прикладеної напруги. Встановлено, що суттєвий вплив на процеси переносу заряду в каналі діода можна досягнути за умови, коли рівень легування каналу на основі GaN не перевищує  $4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ .

**Висновки.** Визначальними факторами, які впливають на загальний струм планарного діода з 3D/2D гетеропереходом є параметри об'ємної частини діода: ширина каналу і рівень його легування, які проявляється у появі збідненого шару GaN, що межує з моношаром.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** моношар, 2D-матеріали,  $\text{MoS}_2$ , канал, гетероструктура, фонони, концентрація, електричне поле, вольтамперна характеристика розсіяння, числове моделювання.

**Як цитувати:** Боцула ОВ, Приходько КГ, Зозуля ВО, Штода ДО. Планарні гібридні гетероструктури на основі напівпровідникової системи моношар - GaN. Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Серія «Радіофізика та електроніка». 2025;43:55-61. <https://doi.org/10.26565/2311-0872-2025-43-05>

**In cites:** Botsula OV, Prykhodko KH, Zozulia VO, Shtoda DO. Planar hybrid heterostructures on the monolayer – GaN system. Visnyk of V.N. Karazin Kharkiv National University, Series Radiophysics and Electronics. 2025;43:55-61 (In Ukrainian). <https://doi.org/10.26565/2311-0872-2025-43-05>

### ВСТУП

В роботах [1, 2] показано, що в планарних структурах з додатковими напівпровідниковими елементами, що були розташовані на бічній границі діода і електрично з'єднані з анодом діода, можливо отримати генерацію в широкому діапазоні частот, а саме – міліметровому та субміліметровому діапазонах.

© Боцула О. В., Приходько К. Г., Зозуля В. О., Штода Д. О., 2025

**Open access.** This article is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

У таких структурах дрейф електронів та об'ємні ефекти в каналі поєднуються з переносом електронів в бічний активний елемент, що може суттєво змінити його характеристики. Елементи, що можуть використовуватися у якості бічних границь, можуть впливати на роботу приладів як за рахунок модуляції провідності, наприклад, як це є у самоперемикаючих діодах [3], так і за рахунок перерозподілу носіїв заряду між областями діода, що мають відмінні властивості, що наприклад, має місце в приладах на ефекті Ганна.

У цьому напрямку перспективним є використання комбінації 2D-матеріалів, вирощених на звичайних 3D-напівпровідниках, оскільки це дає змогу поєднати переваги усталених 3D-напівпровідників з унікальними властивості 2D-матеріалів. Одну з таких комбінацій можна отримати, використовуючи об'ємні напівпровідники GaN та 2D-матеріали, зокрема дихалькогеніди перехідних металів (ДПМ) [4-13] у так званих гетероструктурах змішаних розмірів завдяки розвинутій планарній технології GaN, що вже практично реалізовано в ряді пристроїв: від світловипромінюючих діодів до приладів електроніки високої потужності.

Дисульфід молібдену (MoS<sub>2</sub>) є типовим ДПМ, і найбільш інтенсивно досліджується в різних застосуваннях. Встановлено, що екситон-екситонна анігіляція в MoS<sub>2</sub> є надшвидким процесом із часом загасання в кілька десятків пс [12], що відповідає субтерагерцовому діапазону частот. Отже, поєднання GaN з 2D ДПМ, такими як MoS<sub>2</sub>, має особливе значення для розробки нових гібридних гетероструктур, в тому числі для високочастотної електроніки.

Теоретичні дослідження таких гетероструктур з перших принципів є особливо складними, експериментальні дослідницькі роботи є обов'язковими для виявлення міжфазних та електронних властивостей 2D-ДПМ/3D-гетероструктур та ініціювання їх подальшого досліджень.

Метою роботи є вивчення можливості використання 2D-напівпровідникового матеріалу як конструктивного елемента планарного діода. Розглядаються планарні діодні структури, що містять поверхневий шар, що являє собою гетероструктуру 2D ДПМ/3D, зокрема представлений гетеропереходом MoS<sub>2</sub>/GaN, та досліджується перенесення заряду між двома електронними підсистемами у складі одного приладу.

### МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

Використання 2D матеріалів з 3D GaN є прикладом 2D/3D – структури, що задовольняє всім загальним вимогам, що пред'являються до контактуючих гетеропар. Ці гетеропереходи активно вивчаються останні роки як експериментально, так і теоретично [7, 9-14]. У перших роботах було розглянуто гетеропереходи між GaN – MoS<sub>2</sub> [9] та GaN – WSe<sub>2</sub> [10]. Автори виростили нелегований GaN на 2D матеріалах і провели ряд досліджень для встановлення положення заборонених зон у цих гетероструктурах. В роботі [7] було показано, що гетероструктура MoS<sub>2</sub>/GaN електрично проводить у напрямку перпендикулярному до площини, що розділяє матеріали через Ван-дер-Ваальсову щілину. В [12] було встановлено, що в такій структурі можна також реалізувати гетеродіоди з *p-n*-переходом *p*-MoS<sub>2</sub> – *n*-GaN, які мали характеристики близькі до характеристик звичайних діодів.

Ряд даних стосовно положення зон у системі 2D MoS<sub>2</sub>/3D GaN на сьогодні є дещо суперечливим, що ускладнює створення достовірної моделі цього гетеропереходу.

Так результати роботи [12] вказують на формування контрваріантного гетеропереходу з величиною розриву зони провідності близько 0,51 eV та на суттєве перенесення електронів з GaN (*p*-типу) в MoS<sub>2</sub>, що є близьким до даних, що отримано пізніше в роботах [13,14], де робиться аналогічний висновок для структур, що мали канал *n*-типу.

Вказані вище результати також підтверджується теоретичними розрахунками з використанням методу гібридного функціонала електронної густини: в роботі [13] показано, що величина розриву зони провідності для гетеропереходу MoS<sub>2</sub> – 3D GaN залежить від кількості шарів GaN і монотонно зменшується при переході від моношару до об'ємного напівпровідника, маючи в моношарі величину 0,6 eV.

Отже, виходячи з проведеного аналізу, в даній роботі величина розриву зони приймається рівною 0,5 eV.

Було розглянуто планарну діодну структуру на основі GaN, поперечний переріз якої показано на Рис. 1. Структура містила нелеговану підкладку (1), канал *n*-типу (2), контактні високолеговані області (3,4), які, утворювали омичні контакти із зовнішніми металевими електродами (5,6).

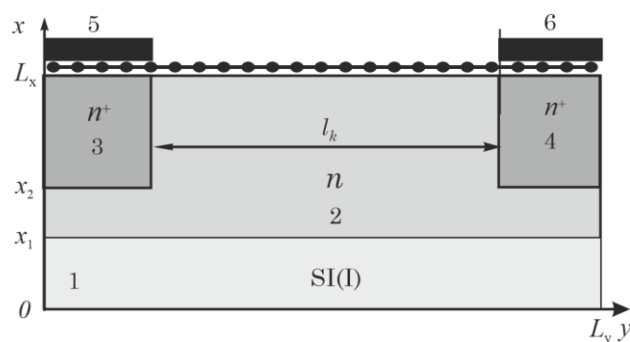


Рис. 1. Структура діода з бічною границею.

Fig. 1. The structure of the diode with a lateral border.

Процеси в діоді розглядалися з використанням багатокомпонентного методу Монте-Карло. Для опису GaN була розглянута трьохдолинна модель зони провідності з урахуванням нижньої -  $\Gamma$  і верхніх  $\Gamma_1$  та M-L-долин. Закон дисперсії електронів  $E_c(k)$  у нижній долині - непараболічний. У розрахунках враховувалися всі властиві для GaN і суттєві за інтенсивністю механізми розсіяння електронів: акустичне, полярне оптичне, домішкове, п'єзоелектричне, міждолинне і еквівалентне міждолинне. Враховувалося також п'єзоелектричне розсіяння, яке в нітридах істотно впливає на їх кінетичні характеристики. Для опису зони провідності MoS<sub>2</sub> використовувалася двохдолинна модель, яка включала параболічні нижню K долину і супутню K' - долину, розташовану у проміжку між  $\Gamma$  і K долинами з енергетичним положенням близько 200 меВ над краєм дна зони провідності. Обидві долини K, K', які заселені в MoS<sub>2</sub> n-типу, розташовані в кутах шестикутної зони Бріллюена, і через свою ізотропну та параболічну природу характеризуються однаковою ефективною масою  $m^*=0.48 m_e$ . Двовимірність руху носіїв заряду і наближення параболічного закону дисперсії призводять до постійної густини станів, заданих  $r_0 = \frac{2m^*}{\rho h^2}$ ,

де враховано фактори виродження за спіном K та K' - долини. Враховуючи велике значення ефективною маси в зоні провідності, електронний газ вважається не виродженим.

Під час моделювання було враховано всі основні механізми розсіяння, характерні для 2D-матеріалів: враховано, що у двовимірних матеріалах відсутня періодичність у напрямку перпендикулярному шару і, відповідно, розщеплення в фононних модах LO—TO, а отже і відповідний вплив LO-моди на макроскопічну поляризацію не враховувалася. Параметри матеріалів, що використовуються у розрахунках відповідали [15].

На сьогодні домінуючим є підхід, у якому 2D-шар розглядається як квантової ями з необмеженою глибиною. Тоді, розглядаючи процеси в 2D-шарі, можна вважати, що огинаючі хвильові функції електронів у напрямку перпендикулярному 2D-шару є  $\psi_{\perp} = A \sin(k_{\perp} x)$ , де  $k_{\perp} = n\pi/a$ ,  $a$  – ширина квантової ями. Носії можуть знаходитися всередині квантової ями як в захопленому енергетичному стані, пов'язаному з шаром 2D - напівпровідника, так і над квантовою ямою за рахунок стану, що пов'язаний з 3D-напівпровідником. Тому слід розглядати зв'язок між тривимірним електронним газом (3DEG) і двовимірним газом (2DEG). Подібні задачі розглядалися раніше в контексті захоплення електронів в квантові ями в гетероструктурах [16-19].

Враховуючи особливості взаємного положення зон провідності у матеріалах, що контактують: мінімум енергії в 2D-матеріалі, що відповідає K долині, знаходиться нижче, ніж мінімум в GaN, і переходи 3D – 2D стають можливими за умови, коли початкова енергія електрона  $E$  не меншою від енергії електрона в 2D-матеріалі на величину енергії оптичного фонону  $E_f$ . Тому ймовірність захоплення 3D  $\rightarrow$  2D практично дорівнює сумарній ймовірності завершити який-небудь перехід випущеним оптичним фононом. Враховуючи невиродженість початкового і кінцевого станів та домінування в GaN за низьких енергій електронного розсіяння на полярних оптичних фонах, найімовірніше саме полярно-оптичний фононний обмін є домінуючим механізмом таких переходів. Модель, що враховує такі переходи була апробована в [15] і використана в даній роботі.

Величина імпульсу фонона, який випромінюється (поглинається) в результаті розсіяння, знаходиться з використанням процедури Неймана. Із врахуванням закону дисперсії в GaN та MoS<sub>2</sub> із закону збереження енергії визначається значення імпульсу і в кінцевих станах. Кут між початковим та кінцевим хвильовими векторами визначається із закону збереження імпульсу.

Обмеження, що обумовлене двовимірною моделлю, пов'язане з тим, що ширина моношару приймається рівною ширині діода, тоді як характер руху носіїв заряду під моношаром є тривимірним процесом і залежить від розподілу електричного потенціалу в поперечному напрямку, який через малі площі моношару може бути істотно нерівномірним.

Для визначення заряду макрочастинок у вузлах даної сітки використовувався НСІС-метод [20].

Носії заряду рухаються переважно по каналу і частина з них може бути поглинена моношаром, створюючи струм провідності моношару.

Загальний струм через електроди визначався шляхом диференціювання за часом заряду що пройшов через контакт. Для знаходження електростатичного потенціалу знаходиться розв'язок двовимірному рівняння Пуассона, для розв'язку якого використовується повний багатосітковий метод (FMG) [21].

### ХАРАКТЕРИСТИКИ ДІОДІВ

Розподіл середньої по довжині концентрації носіїв заряду та електростатичного потенціалу в каналі діоду показано на Рис. 2.

Залежності отримано у припущенні, що встановлення термодинамічної рівноваги в системі  $\text{MoS}_2$ - $n$ - $\text{GaN}$  відбувається за рахунок перерозподілу заряду між зоною провідності  $\text{GaN}$  та  $\text{MoS}_2$  з формуванням збідненої області на межі поділу з боку  $\text{GaN}$  та негативного заряду в шарі  $\text{MoS}_2$ . В результаті відбувається зниження концентрації в каналі. Залежність середньої концентрації від концентрації донорної домішки в каналі наведено на Рис. 3.

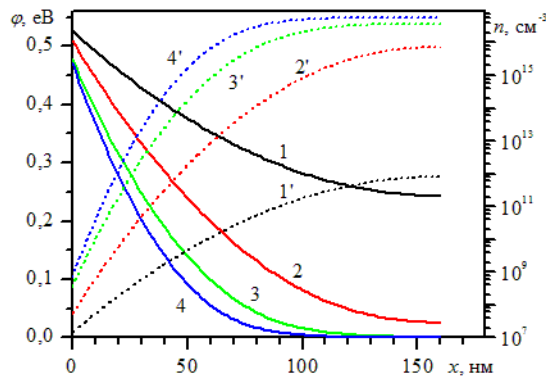


Рис. 2. Розподіл концентрації (1'-4') та електростатичного потенціалу (1-4) області каналу діоду за поверхневої концентрації домішок в 2D – шар  $N_s=10^{10} \text{ cm}^{-2}$ : 1,1' –  $N_d=10^{22} \text{ m}^{-3}$ ; 2,2' –  $N_d=2 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ; 3,3' –  $N_d=4 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ; 4,4' –  $N_d=6 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ .

Fig. 2. Distribution of the concentration (1'-4') and electrostatic potential (1-4) of the diode channel region for the impurity surface concentration in the 2D – layer  $N_s=10^{10} \text{ cm}^{-2}$ : 1,1' –  $N_d=10^{22} \text{ m}^{-3}$ ; 2,2' –  $N_d=2 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ; 3,3' –  $N_d=4 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ; 4,4' –  $N_d=6 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ .

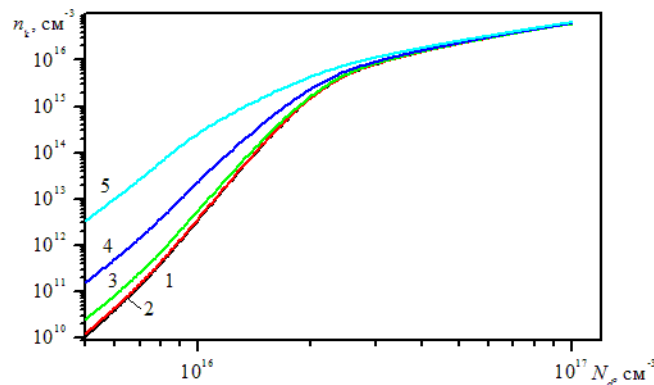


Рис. 3. Залежність середньої концентрації в каналі діода від рівня легування за наявності моношару  $\text{MoS}_2$  на поверхні різних рівнях домішки в ньому: 1 –  $N_{sd}=0$ ; 2 –  $N_{sd}=10^{14} \text{ m}^{-2}$ ; 3 –  $N_{sd}=10^{15} \text{ m}^{-2}$ ; 4 –  $N_{sd}=10^{16} \text{ m}^{-2}$ ; 5 –  $N_{sd}=10^{17} \text{ m}^{-2}$ .

Fig. 3. Dependence of the average concentration in the diode channel on the level of doping in the presence of a  $\text{MoS}_2$  monolayer on the surface at different levels of impurity in it: 1 –  $N_{sd}=0$ ; 2 –  $N_{sd}=10^{14} \text{ m}^{-2}$ ; 3 –  $N_{sd}=10^{15} \text{ m}^{-2}$ ; 4 –  $N_{sd}=10^{16} \text{ m}^{-2}$ ; 5 –  $N_{sd}=10^{17} \text{ m}^{-2}$ .

Отримані залежності демонструють, що суттєвий вплив на процеси переносу заряду в каналі діода можна досягнути за умови, коли рівень легування каналу на основі  $\text{GaN}$  не перевищує  $4 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . В протилежному випадку процеси в моношарі, які не пов'язані з генерацією додаткових носіїв заряду, не будуть впливати на транспорт носіїв заряду в каналі. Причому, при рівні легування шару  $\text{MoS}_2$  меншому за величину приблизно рівну  $10^{15} \text{ m}^{-2}$  вплив моношару на провідність каналу не буде змінюватися. На Рис. 4 показані результати моделювання діода загальною довжиною 1,28  $\mu\text{m}$  та каналом близько 1  $\mu\text{m}$  при  $N_{sd}=0$  та концентрації донорів в каналі  $10^{22} \text{ m}^{-3}$ .

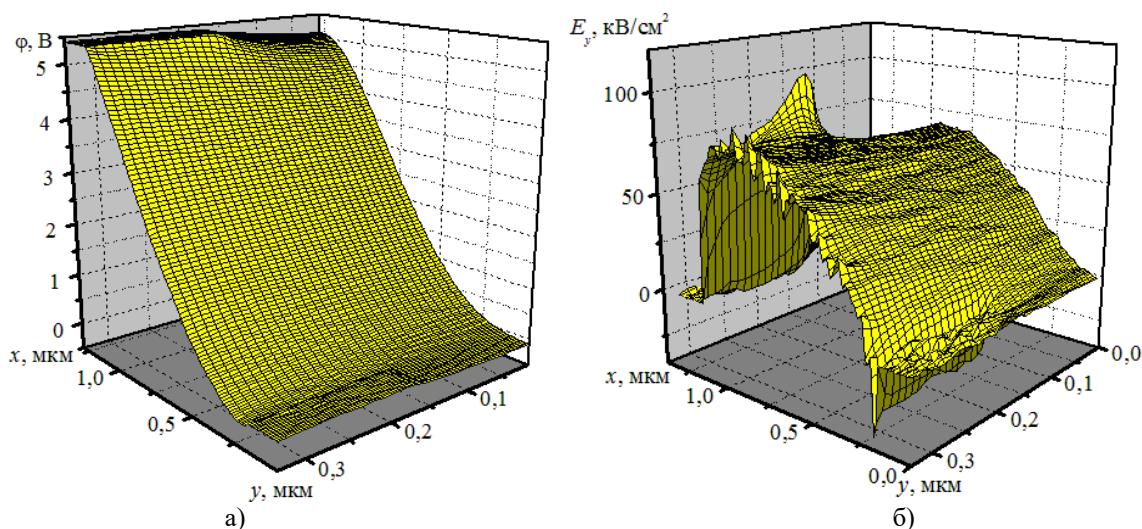


Рис. 4. Розподіл електростатичного потенціалу в діоді (а) та напруженості електричного поля в області діода (б).  
Fig. 4. Distribution of the electrostatic potential in the diode (a) and the electric field strength in the diode area (b).

На Рис. 4 (б) можна відзначити збурення електричного поля біля межі поділу об'ємний матеріал – моношар, що утворилося внаслідок перерозподілу електронів в моношарі. Слід зазначити, що у нелегованому моношарі електричне поле може бути суттєво неоднорідним і більшим ніж у легovanому шарі за рахунок локалізованого заряду. Типові вольтамперні характеристики діодів, зокрема у випадку з  $N_{sd}=0$ , наведені на Рис. 5.

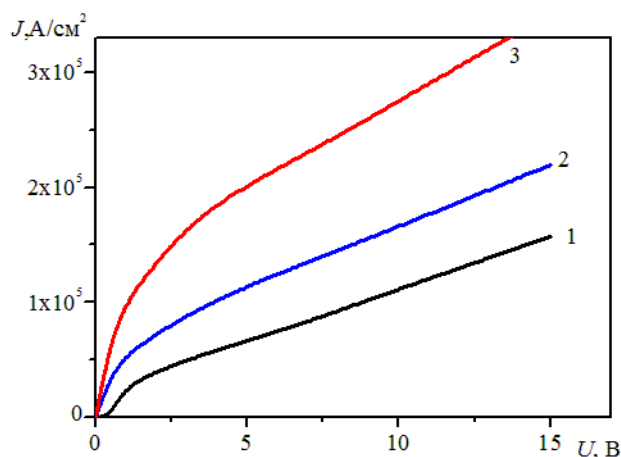


Рис. 5. Залежність густини струму від напруги:  $N_{sd}=0$ : 1 –  $N_d=10^{22} \text{ м}^{-3}$ ; 2 –  $N_d=2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ ; 3 –  $N_d=4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ .  
Fig. 5. Current voltage characteristic:  $N_{sd}=0$ : 1 –  $N_d=10^{22} \text{ м}^{-3}$ ; 2 –  $N_d=2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ ; 3 –  $N_d=4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ .

Можна відзначити, що за малих концентрацій в каналі формування області збіднення призводить до появи при малих напругах ділянки “діодного типу”, в якій струм дуже повільно зростає зі збільшенням напруги живлення. За більших значень зміщення на всіх отриманих характеристиках залежність струму від напруги близька до лінійної, без характерної ділянки насичення. При збільшенні рівня легування моношару величина густини струму залежить від рівня легування каналу: за низької концентрації вона вище ніж в структурі, в якій моношар є нелегований, що вказує на відчутний вклад провідності моношару в загальний струм діода; за більшої концентрації в каналі зміна струму несуттєва. Зазначимо, що подібна залежність струму від напруги спостерігалась у субмікронному транзисторі на основі  $\text{MoS}_2$  [22].

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Основні результати зводяться до наступного:

1. В рамках використаної моделі встановлено, що вплив моношару на загальний струм планарного діода визначається рядом факторів серед яких все ж визначальним є саме параметри об'ємної частини діода: ширина каналу і рівень його легування, і проявляється у появі збідненого шару GaN, що межує з моношаром.
2. Найбільший вплив моношару на характеристики діода відбувається у випадку високолегованих шарів  $\text{MoS}_2$ , тобто пов'язаний з його власною провідністю.

3. Дослідження показали, що у більшості практично значних випадках існують передумови для таких механізмів як тунелювання, врахування якого може вплинути на процеси перерозподілу заряду при концентрації носіїв заряду в каналі на рівні  $4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ .

#### КОНФЛІКТ ІНТЕРЕСІВ

Автори повідомляють про відсутність конфлікту інтересів.

#### REFERENCES

1. Botsula OV, Pryhodko KH, Zozulia VO. Monte Carlo Modeling of the Diodes with Lateral Resonant Tunneling Border. 2018 9-th International Conference on Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals (UWBUSIS). 2018 Sep 4. <https://doi.org/10.1109/UWBUSIS.2018.8520067>
2. Botsula OV, Zozulia VO. Generation of THz Oscillations by Diodes with Resonant Tunneling Boundaries, Journal of Nano- and Electronic Physics. 2020 Dec; 12(6): 06037-1– 4. [https://doi.org/10.21272/jnep.12\(6\).06037](https://doi.org/10.21272/jnep.12(6).06037)
3. Xu KY, Wang G, Song AM. Gunn oscillations in a self-switching nanodiode, Applied Physics Letters. 2008 Dec; 93(23): 233506-1 – 3. <https://doi.org/10.1063/1.3042268>
4. Wang J, Li Z, Chen H, Deng G, Niu X. Recent Advances in 2D Lateral Heterostructures, Nano-Micro Letters. 2019 Jun; 11(1): 48-1 – 31. <https://doi.org/10.1007/s40820-019-0276-y>
5. Gupta P, Rahman AA, Subramanian S, et al. Layered transition metal dichalcogenides: promising near-lattice-matched substrates for GaN growth, Scientific Reports. 2016 Mar: 6; 23708-1 –8. <https://doi.org/10.1038/srep23708>
6. Zhang Z, Qian Q, Li B, Chen KJ. Interface Engineering of Monolayer MoS<sub>2</sub>/GaN Hybrid Heterostructure: Modified Band Alignment for Photocatalytic Water Splitting Application by Nitridation Treatment, ACS Applied Materials & Interfaces. 2018 May: 10(20): 1 – 21. <https://doi.org/10.1021/acsami.8b01286>
7. Ruzmetov D, Zhang K, Stan G, Kalanyan B, Bhimanapati GP. Vertical 2D/3D Semiconductor Heterostructures Based on Epitaxial Molybdenum Disulfide and Gallium Nitride, ACS Nano. 2016 Mar: 10(3); 3580 – 88. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.5b08008>
8. Jeong H, Bang S, Oh H, et al. Semiconductor–Insulator–Semiconductor Diode Consisting of Monolayer MoS<sub>2</sub>, H-BN, and GaN Heterostructure, ACS Nano. 2015 Oct: 9(10); 10032 – 38. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.5b04233>
9. Tangi M, Mishra P, et al. Determination of Band Offsets at GaN/single-Layer MoS<sub>2</sub> Heterojunction, Applied Physics Letters. 2016 Aug: 109; 032104-1 – 5. <https://doi.org/10.1063/1.4959254>
10. Tangi M, Mishra P, Tseng CC, et al. Band Alignment at GaN/Single-Layer WSe<sub>2</sub> Interface, ACS Applied Materials & Interfaces. 2017 Feb: 9(10); 1 – 30. <https://doi.org/10.1021/acsami.6b15370>
11. Lee EW, Lee CH, Paul PK, et al. Layer-Transferred MoS<sub>2</sub>/GaN PN Diodes, Applied Physics Letters. 2015 May: 107(10); 103505-1 – 4. <https://doi.org/10.1063/1.4930234>
12. Henck H, et al. Interface Dipole and Band Bending in Hybrid p-n Heterojunction MoS<sub>2</sub>/GaN(0001), Physical Review B. 2017 Sep: 96; 115312-1 – 7. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.115312>
13. Wang J, Shu H, Liang P, Wang N, Cao D, Chen X. Thickness-Dependent Phase Stability and Electronic Properties of GaN Nanosheets and MoS<sub>2</sub>/GaN van der Waals Heterostructures, Journal of Physical Chemistry C. 2019 Jan: 123; 3861–3867. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b10915>
14. Poudel Y, Sławińska J, Gopal P, et.al. Absorption and emission modulation in a MoS<sub>2</sub>–GaN (0001) heterostructure by interface phonon–exciton coupling, Photonics Research. 2019 Dec: 7(12); 1511 – 20. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1906.03899>
15. Botsula O, Prykhodko K, Zozulia V. Modeling of Planar 2D/3D Semiconductor Heterostructures Based on MoS<sub>2</sub>/GaN Junction. 2022 IEEE Ukrainian Microwave Week (UkrMW), 2022 Nov 14. <https://doi.org/10.1109/UkrMW58013.2022.10037030>
16. Fischetti MV, O'Regan TP, Narayanan S, Sachs C. Theoretical Study of Some Physical Aspects of Electronic Transport in nMOSFETs at the 10-nm Gate-Length, IEEE Transactions On Electron Devices. 2007 Oct: 54(9); 2116 – 2136. <https://doi.org/10.1109/TED.2007.902722>
17. Dawes JM, Sceats MG. Electron trapping in quantum-well structures, Physical Review B. 1987 Dec: 36(18); 9604 – 11. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.36.9604>
18. Kannan ES, Kiml GH, Farrer I, Ritchie DA. Charge trapping in a double quantum well system, Journal Of Physics: Condensed Matter. 2008 Oct: 20; 455206-1 – 4. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/45/455206>
19. Su WB, Lu SM, Jeng HT, et al. Observing quantum trapping on MoS<sub>2</sub> through the lifetimes of resonant electrons: revealing the Pauli exclusion principle, Nanoscale Advances. 2020 Nov: 2; 5848 – 56. <https://doi.org/10.1039/D0NA00682C>
20. Laux SE. On particle-mesh coupling on Monte Carlo device simulation, IEEE Transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems. 1996 Dec: 15(10); 1266 – 77. <https://doi.org/10.1109/43.541446>
21. Joppich W, Mijalkovic S. Multigrid Methods for Process simulation. Springer; 1993.
22. Peng B, Wei Z, Jiantao Q, Zhang ZW. Two-Dimensional MX<sub>2</sub> Semiconductors for Sub-5 nm Junctionless

Field Effect Transistors, Materials. 2018 Mar; 11(3); 430-1 – 430-9. <https://doi.org/10.3390/ma11030430>

Стаття надійшла до редакції: 9 жовтня 2025

Рекомендовано до друку: 20 листопада 2025

Опубліковано: 30 грудня 2025

## PLANAR HYBRID HETEROSTRUCTURES ON THE MONOLAYER – GaN SYSTEM

O. V. Botsula, K. H. Prykhodko, V. O. Zozulia, D. O. Shtoda

<sup>1</sup>V. N. Karazin Kharkiv National University, 61022, Kharkiv, Svobody square, 4

**Background.** Graphene-like two-dimensional (2D) materials as promising for creating the future element base of electronics are considered. Interactions between layers of two-dimensional materials are not limited by chemical bonding and matching of the interfacial lattice. It is permitted to form heterojunctions both from different 2D materials and hybrid 2D/3D heterojunctions, having many unique characteristics and opportunities for application. One of the actual tasks is to study 2D/3D heterojunctions, and possibility of their usage as elements of electronic devices to improve or change their properties.

**The aim of the work.** The aim of study is to determine characteristics of planar diodes based on bulk materials (GaN), in which monolayers act as structural elements forming a 2D/3D heterojunction with a diode channel.

**Techniques and Methodology.** Mathematical simulation of charge transfer processes is carried out applying a two-dimensional model of a planar diode by using Ensemble Monte Carlo technique. Since the main mechanism of charge carrier redistribution between regions of different sizes was considered to be transitions involving phonons, a channel based on molybdenum dichalcogenide (MoS<sub>2</sub>), which forms a heterojunction with GaN - diode channel, was analyzed. The peculiarities of the space charge regions formation near 2D/3D - heteroboundaries are analyzed. Static characteristics of diodes were determined.

**Results** Charge carriers distributions in the diode channel according to the ratio of the impurity concentration in the monolayer and the channel were obtained in the course of the research. Influence of the monolayer on average concentration of electrons in the channel was studied. Dependences of current on applied voltage in a diode with a monolayer is obtained. A significant effect on charge transfer processes in the diode channel was established which can be achieved when the doping level of the GaN-based channel does not exceed  $4 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ .

**Conclusions:** The main factors affecting on the total current of a planar diode with a 3D/2D heterojunction are the parameters of the bulk part of the diode, the channel width and the doping level leading to the appearance of depleted GaN layer bordering the monolayer.

**KEY WORDS:** *monolayer, 2D-material, MoS<sub>2</sub>, channel, heterostructure, phonons, concentration, electric field, current-voltage characteristic, scattering, numerical simulation.*

The article was received by the editors: October 9 2025

The article is recommended for printing: November 20 2025

Published: December 30 2025