An Empirical DC Model for Van der Waals n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 BJT *

GUO Xuanlin, YAN Zezhang, DENG Shaozhi *
(School of Electronics and Information Technology, Sun Yat-Sen University, Guangzhou Guangdong 510275, China)

Abstract: Two-dimensional atomic crystal materials, characterized by their atomic thickness and interlayer van der Waals bonding, introduce new structures, novel functionalities and enhanced performance for electronic devices. The electrical characteristics model of van der Waals bipolar junction transistor (BJT) is investigated, focusing on a vertically stacked n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 van der Waals BJT. To address the current-voltage characteristics of such devices, which differ from those of conventional BJT, an empirical model is proposed to characterize the DC output characteristics of van der Waals BJT. The results show that the coefficient of determination (R^2) between the model simulation data and the device experimental data reaches 0.999 9, with a maximum root mean square error of 1.871%. The proposed empirical model can be implemented and simulated using PSpice, offering a method for modeling devices with similar structures.

Key words: two-dimensional atomic crystal; transition-metal dichalcogenides; van der Waals heterojunction; bipolar junction transister; direct-current characteristics; empirical model; PSpice
EEACC: 2560J **doi**: 10.3969/j.issn.1005-9490.2026.04.010

n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 直流特性经验模型 *

郭炫麟, 闫泽彰, 邓少芝 *
(中山大学电子与信息工程学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 二维原子晶体材料以其原子级厚度和层间范德华力结合特征为电子器件带来新结构、新特性、新性能。对范德华双极结型晶体管(BJT)电特性模型开展研究, 聚集于 n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 垂直堆叠结构的范德华 BJT, 针对这类器件呈现出与传统 BJT 不同的电流-电压特性, 提出了一种经验模型来表征范德华 BJT 的直流输出特性, 研究结果展示, 模型仿真数据与器件实验数据之间的决定系数 R^2 达到 0.999 9、均方根误差最大为 1.871%。所提出的经验模型可以通过 PSpice 实现并进行仿真解析, 为类似结构器件的建模提供了一种方法。

关键词: 二维原子晶体; 过渡金属硫化物; 范德华异质结; 双极结型晶体管; 直流特性; 经验模型; PSpice
中图分类号: TN32 **文献标识码**: A **文章编号**: 1005-9490(2026)04-0783-06

二维原子晶体材料具有丰富的物理化学特性和新奇效应, 同时其具有原子级厚度和层间范德华力结合结构特征, 为电子器件研制带来新结构、新特性、新性能, 在逻辑、存储、探测、传感等器件中展现出应用前景[1-3]。过渡金属硫化物(Transition Metal Dichalcogenides, TMDs)是典型的范德华二维原子晶体材料, 其单层厚度在 1 nm 以下, 层内原子通过作用力较强的共价键结合, 相邻层之间通过较弱的范德华力相互连接, 并且具有无悬挂键的光滑表面[4], 其以垂直堆叠形成范德华异质结器件, 例如范德华双极结型晶体管(Bipolar Junction Transistor, BJT)呈现了放大、光电转换、气敏传感等新的器件特性[5-7]。

随着范德华异质结器件在功能电路等应用研究的深入, 建立一个能够准确描述器件电学特性的模型对于应用系统设计至关重要。器件模型主要分为数值模型和紧凑模型两类, 数值模型基于材料的电子性质和器件的电荷输运进行建模, 其特点是精度高、计算复杂、仿真速度慢, 适合单个器件的设计与分析[8]。紧凑模型是专门用于集成器件、电路等设计与仿真的模型, 其目标是提供表征器件特性的解析式, 包括物理基模型和经验模型[9]。其中, 物理基模型基于器件的工作原理进行建模, 模型参数通常具有明确的物理意义, 模型具有一定的普适性。经验模型通过拟合数据或查找表法得到与器件特性相匹配的数学函数, 模型相对简单, 研发周期快, 易

项目来源: 广州市重点学科建设项目(电子科学与技术)(201851789)
收稿日期: 2026-04-01 **修改日期**: 2026-04-12

于嵌入电路仿真工具中。

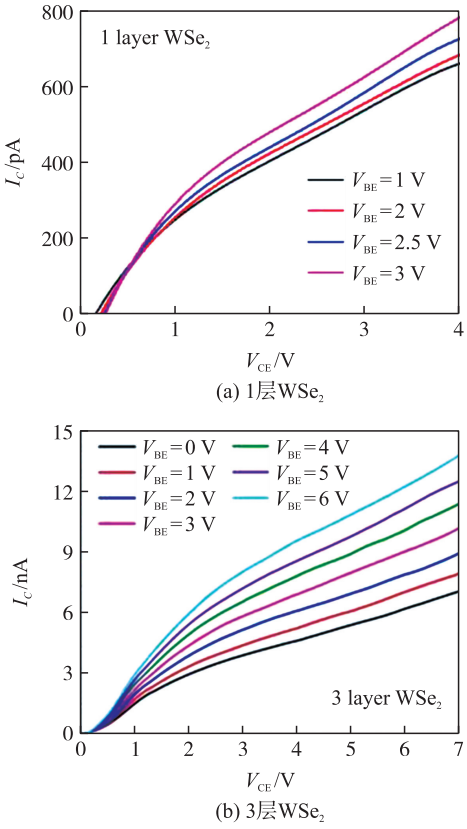
目前,范德华异质结器件的模型研究尚处于初步阶段,且文献报道的器件以场效应晶体管为主[10-11],对范德华双极结型晶体管的研究主要集中在器件功能应用上[12]。本文基于 n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 垂直堆叠结构的范德华 BJT,提出了一种直流经验模型,该模型能够准确表征这种器件的共基极和共射极工作模式下输出特性。

1 范德华 BJT 直流特性与现象分析

基于目前文献报道,范德华 BJT 除了具有与传统 BJT 类似的饱和区、放大区等直流特性外,还表现出以下几个特点:

①发射结和集电结的二极管电流理想因子远高于理想 p-n 结的理想因子,这一偏差可归因于材料体电阻、界面处缺陷态、器件工艺引入残留物等的共同作用效果[13-14];

②基区宽度过薄时,输出电流随集电-发射极电压的增加而持续上升,未呈现饱和趋势,典型输出特性曲线如图 1 所示[15-16]。其原因是在薄基区强电场的影响下,除了漂移-扩散机制,发射区电子还可以通过隧穿机制进入集电极,产生隧穿电流,从而导致输出电流难以饱和。

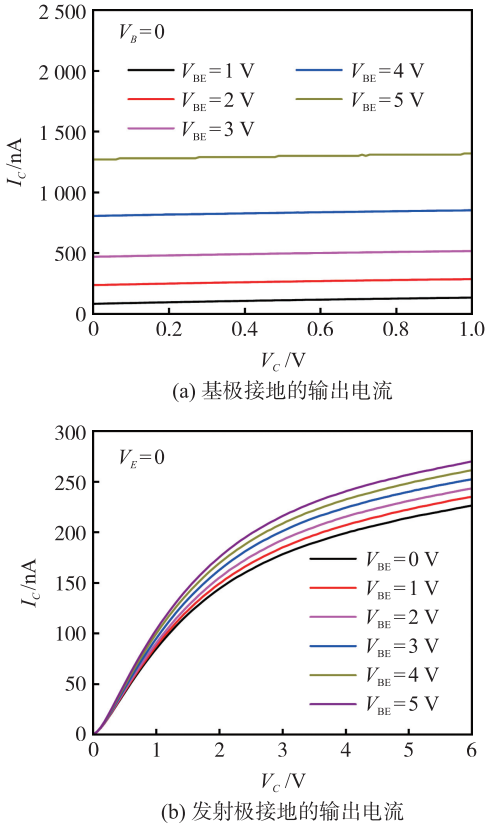


(a) 1层WSe_2

(b) 3层WSe_2

图 1 MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 输出电流未呈现饱和趋势的现象[15-16]

③范德华异质结的电阻特性受层间界面电阻、体电阻、接触电阻等因素影响,相对传统异质结,构成复杂。研究表明,在垂直堆垛结构的范德华异质结中,往往存在一个横向同质结区域,这个横向区域会引入额外的电阻分量,还会改变电流传输路径,进而对器件的输出特性产生影响[17-18]。本文研究的 n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 器件,在相同的极间电压下,共基极和共射极工作模式的输出电流存在显著差异,共基极输出电流可以达到千纳安级,而共射极输出电流仅为百纳安级,如图 2 所示。其原因在于,二维材料与金属电极接触时,功函数不匹配会形成肖特基势垒,从而产生接触电阻[19]。在本文器件中,由于发射极和基极采用同种金属电极,共基极和共射极工作模式的输入端接触电阻不同,导致载流子注入效率存在差异,进而使两种工作模式下的输出电流呈现明显差别。



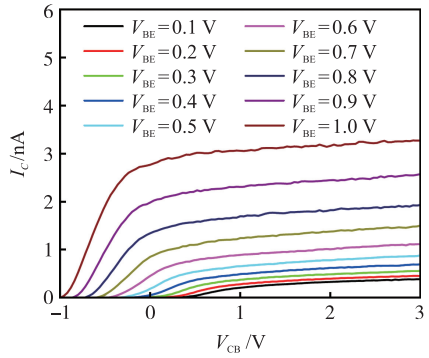
(a) 基极接地的输出电流

(b) 发射极接地的输出电流

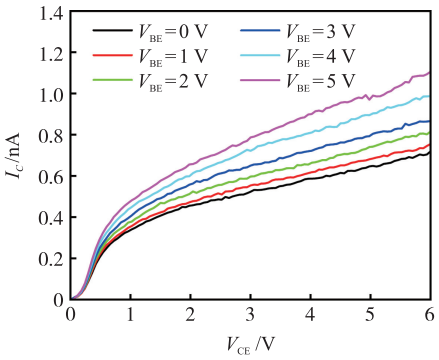
图 2 n+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 在相同的极间电压、基极和发射极接地下的集电极输出电流对比

本文研究的 n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 器件,在共基极和共射极工作模式下典型的输出特性曲线如图 3 所示。可以看到,在共射极工作模式下,即使未施加发射结电压 V_{BE}(V_{BE}=0 V),施加发射极-集电极间电压 V_{CE}仍会产生显著的集电极电流 I_C,这一

现象无法仅由传统 BJT 器件的基区载流子输运机制解释。本文认为，在范德华 BJT 中，发射结与集电结共同调控输出电流的同时，由于器件具有原子级厚度的超薄基区，发射极-集电极间电压所产生的电场可穿透基区，同时调制发射结与集电结的势垒高度和宽度，进而对两者的电流控制能力产生耦合影响。



(a) 共基极输出特性电流



(b) 共射极输出特性电流

图 3　在共基极和共射极的工作模式下，n+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 输出特性曲线

2　范德华 BJT 经验模型建立

埃伯斯-莫尔(Ebers-Moll，E-M)传输模型是描述传统 BJT 直流特性的经典模型之一，该模型建立在正向和反向晶体管叠加的基础上，利用受控电流源表征载流子在基区的传输行为，并以两个二极管分别等效发射结和集电结，其等效电路如图 4 所示，模型表述为：

$$I_{EC}=I_S\left[\exp\left(\frac{qV_{BC}}{kT}\right)-1\right] \tag{1}$$

$$I_{CC}=I_S\left[\exp\left(\frac{qV_{BE}}{kT}\right)-1\right] \tag{2}$$

$$I_{CT}=I_{CC}-I_{EC} \tag{3}$$

$$I_C=I_{CT}-\frac{I_{EC}}{\beta_R} \tag{4}$$

$$I_B=\frac{I_{CC}}{\beta_F}+\frac{I_{EC}}{\beta_R} \tag{5}$$

式中：I_S 代表晶体管饱和电流，β_F 和 β_R 分别代表晶体管共射极的正向和反向电流增益，q 是电子电荷，k 是玻尔兹曼常数，T 是热力学温度。范德华 BJT 具有传统 BJT 类似的器件结构，电路模型架构上适用如图 4 所示等效电路，同时需要考虑其不同的特性。具体而言，器件结构中面内同质结的存在，会形成寄生晶体管路径而产生寄生电流；同时，还需要考虑非漂移-扩散机制及其他可能存在的非理想效应的电流贡献。此外，在研究器件的输出特性时，式(4)中的第二项作为基极电流的分量，通常可以忽略。因此，本文所提出的范德华 BJT 经验模型的核心在于构建合适的 I_{CT} 表达式。

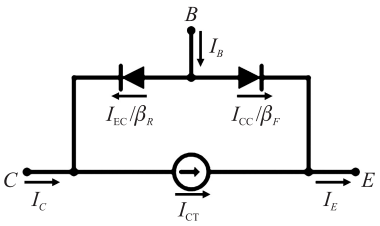


图 4　n-p-n 型 BJT 的 E-M 传输模型等效电路

目前，常见的输出电流经验模型有 Statz 模型[20]、Circuit 平方模型[21]、Materka 模型[22] 和 Angelov 模型[23]等，这些模型通常采用多项式函数、有理函数、双曲正切函数等作为逼近函数进行数据拟合，主要面向Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体器件建模。由于范德华 BJT 在器件结构和电学特性上均不同于Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体器件，因此上述模型不适合直接应用于范德华 BJT 器件。

本文基于 MOSFET 亚阈值电流方程的形式，采用类指数函数描述 I_C 随 V_{CE} 变化的全局直流特性，引入两个参数 N 和 m，其中 N 用于描述输出特性曲线在饱和区的斜率，m 用于描述输出特性曲线由饱和区向放大区转变的平滑程度；采用三阶多项式函数描述 I_C 随 V_{BE} 变化的特性，引入两个随 V_{BE} 线性变化的参数 V_{offset} 和 λ，分别用于表征器件的偏移电压和基区宽度调制效应[24-25]，模型表述为：

$$I_C=(A_3V_{BE}^3+A_2V_{BE}^2+A_1V_{BE}+A_0)\times\{1-\exp[-N(V_{CE}-V_{offset})^m]\}\times(1+\lambda V_{CE}) \tag{6}$$

$$V_{offset}=KV_{BE}+V_0 \tag{7}$$

$$\lambda=\mu V_{BE}+\lambda_0 \tag{8}$$

式中：V_{offset} 代表输出特性曲线中的偏移电压，V_0 代表 V_{BE} 为 0 时的偏移电压；λ 代表基区宽度调制效应参数，λ_0 代表 V_{BE} 为 0 时的基区宽度调制效应参数，A_0、A_1、A_2、A_3、N、m、K 和 μ 为拟合系数。当实验测试中 V_{BE} 的数据点增加时，适当提升多项式函数的阶数，可以获得更高的拟合精度。反之，适当降低多

项式函数的阶数,可以在保证较高拟合精度的同时降低模型的复杂度。本文利用 PSpice 软件模拟行为模型(Analogy Behavioral Model,ABM)实现经验模型的搭建和仿真,依次建立 V_{BE} 多项式函数模块、V_{CE} 类指数函数模块和基区宽度调制效应模块,将三个模块的输出相乘得到输出电流。在完成模型参数提取和优化后,依据实验测试条件设置仿真环境,最终完成直流仿真分析。

3 模型验证与精度分析

本文研究的范德华 BJT 器件,选用含有 300 nm 二氧化硅层的 p 型掺杂硅(SiO_2/p^+-Si)作为衬底,Re 掺杂的 MoS_2(n^+-MoS_2)作为发射区,WSe_2 作为基区,MoS_2 作为集电区,通过干法转移获得 n^+-$MoS_2/WSe_2/MoS_2$ 二维垂直叠层结构,具体步骤为:首先使用聚二甲基硅氧烷(Polydimethylsiloxane,PDMS)在块状材料上机械剥离出所需的 n^+-MoS_2、WSe_2 以及 MoS_2 二维材料,将剥离在 PDMS 上的 MoS_2 定位转移到洁净的 SiO_2/p^+-Si 衬底上,然后将 WSe_2 定位转移到 MoS_2 的表面形成 MoS_2/WSe_2 堆垛结构,再将 n^+-MoS_2 定位转移到 MoS_2/WSe_2 堆垛结构上。利用光刻技术在衬底上形成电极图形,并通过热蒸发镀膜技术完成金属电极 Cr/Au 的沉积过程。最后,将器件在 300 ℃氩气环境下退火 2 h,获得 n^+-$MoS_2/WSe_2/MoS_2$ 范德华 BJT,器件结构示意如图 5 所示。

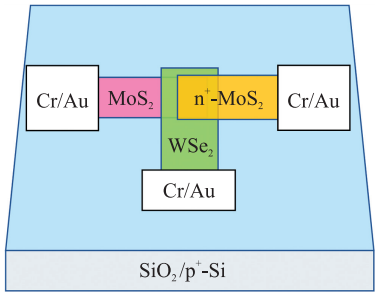


图 5 n^+-$MoS_2/WSe_2/MoS_2$ 范德华 BJT 结构示意图

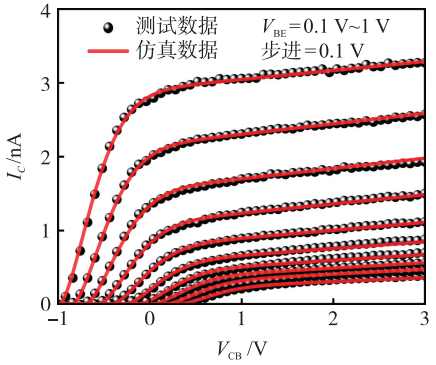
在室温下对器件进行直流特性测试,测试条件设置为:共基极工作模式下,基极接地($V_B=0$),集电极电压(V_C)从−1 V 扫描至 2 V,发射极电压(V_E)设置从−0.1 V 至−1 V,步进 0.1 V。共射极工作模式下,发射极接地($V_E=0$),V_C 从 0 扫描至 6 V,V_B 设置从 5 V 至 0,步进 1 V。通过数学软件拟合实验数据的正向($V_{CE}>0$)输出特性,两种工作模式下的模型参数提取值如表 1 和表 2 所示。将模型参数输入进 PSpice 软件进行仿真,并将仿真结果与实验数据进行对比。以基区厚度为 4.7 nm 的器件为参考,对比结果如图 6 所示。

表 1 共基极工作模式下的模型参数提取值

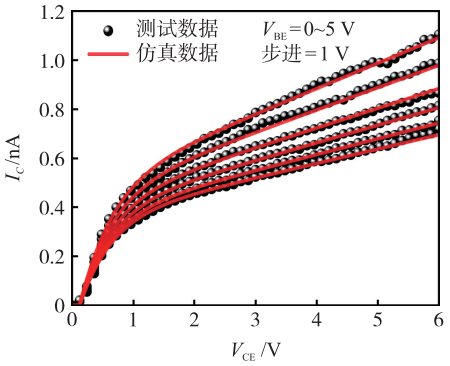
模型参数	数值	模型参数	数值
A_3	4.588E−9	K	−0.440
A_2	−3.206E−9	V_0	0.456
A_1	1.333E−9	m	1.572
A_0	0.087E−9	μ	−0.262
N	3.414	λ_0	0.306

表 2 共射极工作模式下的模型参数提取值

模型参数	数值	模型参数	数值
A_3	0	K	0
A_2	0.003E−9	V_0	0.120
A_1	0.010E−9	m	1.018
A_0	0.344E−9	μ	0.010
N	2.121	λ_0	0.173



(a) 共基极输出特性电流



(b) 共射极输出特性电流

图 6 两种工作模式下的模型仿真结果与实验数据对比

为了衡量模型拟合数据与实验数据的吻合程度,采用决定系数 R^2 和百分比形式的均方根误差(Root Mean Square Error,RMSE)作为模型精度的评价标准,R^2 越接近 1、RMSE 越小,说明模型越准确。R^2 和 RMSE 的计算公式如下[25-26]:

$$R^2=1-\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2} \tag{9}$$

$$\mathrm{RMSE}(\%)=\frac{\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2}}{\bar{y}}\times 100 \quad (10)$$

式中:y_i 代表实际观测值,$\hat{y}_i$ 代表模型预测值,$\bar{y}$ 代表实际观测值的平均值,n 代表样本数量。此外,本文将建立的经验模型应用在通过相同方法制备出的多个 n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 样品上,结果显示拟合数据与实验数据吻合较好,模型的精度分析如表 3 和表 4 所示,说明该模型具有可行性。

表 3　共基极工作模式下的模型精度分析

器件	R^2	RMSE/%
4.7 nm 基区厚度	0.999 5	1.871
样品 1	0.999 7	1.070
样品 2	0.999 7	0.691
样品 3	0.999 7	1.071
样品 4	0.999 8	0.965
样品 5	0.999 9	0.552

表 4　共射极工作模式下的模型精度分析

器件	R^2	RMSE/%
4.7 nm 基区厚度	0.998 5	1.644
样品 1	0.999 9	0.417
样品 2	0.999 9	0.340
样品 3	0.999 6	0.826
样品 4	0.999 9	0.456
样品 5	0.999 6	0.741

4　结论

本文基于经验模型对 n^+-MoS_2/WSe_2/MoS_2 范德华 BJT 在共基极和共射极工作模式下的输出电流进行建模,提出的模型具有表达式简洁、参数提取简单、准确度高的特点,最多需要提取 10 个模型参数值。该模型可以通过 PSpice 软件的 ABM 器件库实现,模型拟合数据和实验测试数据显示出较好的一致性,两者之间的决定系数可高达 0.999 9,均方根误差最大为 1.871%,验证了该模型的可行性,为具有类似结构的范德华 BJT 器件建模提供了一种研究方法。

参考文献:

[1] Li W,Guo Y,Luo Z,et al. A Gate Programmable van der Waals Metal-Ferroelectric-Semiconductor Vertical Heterojunction Memory[J]. Advanced Materials,2023,35(5):2208266.

[2] Wu F,Li Q,Wang P,et al. High Efficiency and Fast van der Waals Hetero-Photodiodes with a Unilateral Depletion Region[J]. Nature Communications,2019,10(1):4663.

[3] Dastgeer G,Shahzad Z M,Chae H,et al. Bipolar Junction Transistor Exhibiting Excellent Output Characteristics with a Prompt Response Against the Selective Protein[J]. Advanced Functional Materials,2022,32(38):2204781.

[4] Dorow C J,Penumatcha A,Kitamura A,et al. Gate Length Scaling Beyond Si:Mono-Layer 2D Channel FETs Robust to Short Channel Effects[C]//2022 International Electron Devices Meeting (IEDM), San Francisco, CA, USA: IEEE,2022:7.5.1-7.5.4.

[5] Yan Z,Xu N,Deng S. Realization of High Current Gain for van der Waals MoS_2/WSe_2/MoS_2 Bipolar Junction Transistor[J]. Nanomaterials,2024,14(8):718.

[6] Agnihotri P,Dhakras P,Lee J U. Bipolar Junction Transistors in Two-Dimensional WSe_2 with Large Current and Photocurrent Gains[J]. Nano Letters, 2016, 16(7): 4355-4360.

[7] Zhu Z,Liu L,Deng S,et al. van der Waals Photonic Bipolar Junction Transistors Capable of Simultaneously Discerning Wavelength Bands and Dual-Function Chip Application[J]. ACS Nano,2025,19(3):3645-3655.

[8] Marin E G,Perucchini M,Marian D,et al. Modeling of Electron Devices Based on 2-D Materials[J]. IEEE Transactions on Electron Devices,2018,65(10):4167-4179.

[9] De Souza A M,Celino D R,Ragi R,et al. Compact Modeling of 2D Nanotransistors:Materials Characteristics,Device Structures,and Analytical Techniques[J]. Nanotechnology,2025,36(37):372002.

[10] Ahsan S A,Singh S K,Mir M A,et al. A SPICE Compact Model for Ambipolar 2-D-Material FETs Aiming at Circuit Design[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 2021,68(6):3096-3103.

[11] Nazeer T,Aamir Ahsan S. Analyzing Few-Layer and Heterostructure pH-Sensitive 2D-Material Field-Effect Transistors Using a Physics-Based SPICE Compact Model[J]. ACS Applied Electronic Materials,2024,6(7):5085-5093.

[12] Aftab S,Hegazy H H,Iqbal M Z,et al. Emerging Trends in van der Waals 2D TMD Heterojunction Bipolar Transistors[J]. Journal of Materials Chemistry C, 2023, 11(5):1648-1667.

[13] Lee G,Pearton S J,Ren F,et al. 2D Material-Based Vertical Double Heterojunction Bipolar Transistors with High Current Amplification [J]. Advanced Electronic Materials,2019,5(3):1800745.

[14] Lee G,Pearton S J,Ren F,et al. Two-Dimensionally Layered p-Black Phosphorus/n-MoS_2/p-Black Phosphorus Heterojunctions[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2018,10(12):10347-10352.

[15] Liu L,Xu N,Zhang Y,et al. Van der Waals Bipolar Junction Transistor Using Vertically Stacked Two-Dimensional

Atomic Crystals [J]. Advanced Functional Materials, 2019,29(17):1807893.
[16] 邓少芝. 国家重点研发计划项目“新型纳米结构亚毫米波辐射源和探测器及集成技术”科技报告(编号:121000004558631445--2019YFA0210200/05)[R]. 广州:中山大学.
[17] Yang L, Igo J, Gabel M, et al. In-Plane Homojunctions and Their Dominant Effects on Charge Transport in Vertical van der Waals Heterostructures[J]. Journal of Physical Chemistry C,2018,122(35):20513-20520.
[18] Miao J,Xu Z,Li Q,et al. Vertically Stacked and Self-Encapsulated van der Waals Heterojunction Diodes Using Two-Dimensional Layered Semiconductors [J]. ACS Nano,2017,11(10):10472-10479.
[19] Park J Y, Cho J, Jun S C. Review of Contact-Resistance Analysis in Nano-Material[J]. Journal of Mechanical Science and Technology,2018,32(2):539-547.
[20] Statz H,Newman P,Smith I W,et al. GaAs FET Device and Circuit Simulation in SPICE[J]. IEEE Transactions on Electron Devices,1987,34(2):160-169.
[21] Curtice W R,Ettenberg M. A Nonlinear GaAs FET Model for Use in the Design of Output Circuits for Power Amplifiers[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques,1985,33(12):1383-1394.
[22] Kacprzak T, Materka A. Compact DC Model of GaAs FETs for Large-Signal Computer Calculation[J]. IEEE Journal of Solid-State Circuits,1983,18(2):211-213.
[23] Angelov I, Rorsman N, Stenarson J, et al. An Empirical Table-Based FET Model[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1999, 47 (12): 2350-2357.
[24] Chen S H,Chang C M,Chiang P Y,et al. DC Characteristics of InAlAs/InGaAsSb/InGaAs Double Heterojunction Bipolar Transistors[J]. IEEE Transactions on Electron Devices,2010,57(12):3327-3332.
[25] Yang J,Jia Y,Ye N,et al. A Novel Empirical I-V Model for GaN HEMTs[J]. Solid-State Electronics,2018,146:1-8.
[26] Kirchhoefer M,Schumacher J,Adler P,et al. Considerations Towards a Novel Approach for Integrating Angle-Count Sampling Data in remote Sensing Based Forest Inventories[J]. Forests,2017,8(7):239-256.

郭炫麟(2001—),男,硕士研究生,主要研究方向为二维材料器件建模与仿真,guoxlin5@alumni.sysu.edu.cn;

闫泽彰(1994—),男,博士研究生,主要研究方向:微纳电子器件,yanzzh3@alumni.sysu.edu.cn;

邓少芝(1963—),女,博士,教授,从事微纳电子光电子与器件及芯片研究,主要方向包括真空微纳电子光电子、太赫兹产生与探测器件、新型 X 光源与探测器件、新型平板显示技术等,stsdsz@mail.sysu.edu.cn。