



Modellierung elektronischer Bauelemente in Nanodimensionen

G. Wachutka, A. Heigl
Lehrstuhl für Technische Elektrophysik, TU München

1. Bayerischer FORNEL-Workshop, 12. April 2005



1. Bayerischer FORNEL-Workshop, 12. April 2005

Modellierung elektronischer Bauelemente in Nanodimensionen

Vorbetrachtung (1)

1. „Trägerdichte“ in Nanodimensionen:

Wieviele Ladungsträger befinden sich in einem Kubus der Länge L ?

$n \backslash L$	100 nm	10 nm
10^{18} cm^{-3}	1000	1
10^{16} cm^{-3}	10	1/100

$$N = nL^3$$

Wieviele Teilchen braucht man für ein statistisches Ensemble?

$L \approx$ Dekananometer: Konzepte der statistischen Mechanik fraglich!
z.B. Beweglichkeit, Driftgeschwindigkeit, Trägerdichte, ...

Existiert lokales thermodynamisches Gleichgewicht?

z.B. Quasifermipotential, Temperatur

Aber: Quantenmechanische Teilchen haben selbst statistischen Charakter!!

Vorbetrachtung (2)

2. „Drift“ und „Diffusion“ in Nanodimensionen:

- (i) Wie groß ist die mittlere freie Weglänge für Stoßprozesse in Halbleiterbauelementen?

$$\vec{v} = \mu \vec{E}; \quad |\vec{E}| = \frac{1 \text{ V}}{1 \mu\text{m}} = 10^4 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$$
$$\Rightarrow \quad |\vec{v}| = 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \quad (\text{Sättigungsgeschwindigkeit!})$$
$$\text{Stoßzeit } \tau \approx 0.1 - 1 \text{ ps} \Rightarrow \lambda_{\text{free}} = v \cdot \tau = 10 - 100 \text{ nm}$$

- (ii) Wie groß ist der Abstand zweier Streuzentren (ionisierte Störstellen)?

$$N_{\text{imp}} \cdot L_{\text{imp}}^3 = 1 \Rightarrow$$

N_{imp}	10^{18} cm^{-3}	10^{15} cm^{-3}
L_{imp}	10 nm	100 nm

Fazit: (Quasi-)ballistischer Trägertransport für $\lambda_{\text{free}} \approx L_{\text{device}}$

Quantenballistischer Trägertransport für $\lambda_{\text{free}} \gg L_{\text{device}}$

Vorbetrachtung (3)

3. Geometrische Ausdehnung quantenmechanischer Zustände (Quasi-Teilchen):

z.B. Leitungselektron in Effektiv-Massen-Näherung:

$$\left. \begin{aligned} E_{kin} &= \frac{\overset{-2}{p^2}}{2m^*} = \frac{h^2}{2m^* \lambda_e^2} \\ E_{kin} &\approx \frac{3}{2} kT \end{aligned} \right\} \lambda_e \approx \frac{h}{\sqrt{3m^* kT}}$$

Für $T = 300 \text{ K}$:

$$\lambda_e \approx 6 \text{ nm}$$

Generalhypothese:

∃ lokales thermodynamisches Gleichgewicht für Elektronen, Löcher, Phononen, ...

d.h. elektrochemische Potentiale

(Quasiferminiveaus), Temperatur T,

Zustandsgleichungen

$$\mu_n = -q\Phi + \mu_i + kT \ln \frac{n}{n_i} = -q\Phi_n$$

$$\mu_p = -q\Phi + \mu_i - kT \ln \frac{p}{n_i} = -q\Phi_p$$

Modellkonstruktion:

1. Zustandsgleichungen für Trägerdichten:

a) Fermi-Dirac-Statistik mit (Volumen-)Blochzuständen $|n, \vec{k}\rangle$, Bandstruktur $E_n(\vec{k})$, Löcherkonzept, ...

$$\Rightarrow n = n_i \cdot \gamma_n \cdot \exp\left(\frac{q(\Phi - \varphi_n)}{kT}\right) \quad p = n_i \cdot \gamma_p \cdot \exp\left(\frac{q(\varphi_p - \Phi)}{kT}\right)$$

b) Elektrostatisches Potential aus Trägerkonzentration und Klemmenspannungen:

$$\text{div}(\epsilon \nabla \Phi) = q(n - p + N_A^+ - N_D^-) \quad (\text{Poissongleichung})$$

Klassisches Halbleitertransportmodell - kritisch betrachtet (2)

2. Stromtransport-Relationen:

Phänomenologische Transporttheorie (irreversible Thermodynamik, kinet. Theorie)

$$\begin{aligned}\Rightarrow \quad \vec{J}_n &= -\sigma_n \nabla \Phi_n = \sigma_n \vec{E} + qD_n \nabla n \\ \vec{J}_p &= -\sigma_p \nabla \Phi_p = \sigma_p \vec{E} - qD_p \nabla p\end{aligned}\quad (\text{Drift-Diffusions-Modell})$$

wobei

$$\sigma_n = qn\mu_n \quad \sigma_p = qp\mu_p$$

kollektiver klassischer Transport,
Statistik über viele Träger und Streuprozesse!

3. Träger-Bilanzgleichungen:

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n = G_n - R_n \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p = G_p - R_p$$

Pauschale Bilanz über Ensemble von Trägern und Störstellen, stat. Betrachtung

A. Quantenmechanische Trägerdichten

- (i) n, p nicht nur bestimmt von Zustandsgleichungen, lokalen Bilanzen und äußeren Randbedingungen, sondern durch **Wellenfunktionscharakter der elektronischen Zustände im Ortsraum**

$$\text{z.B. } n(\vec{r}) = 2 \sum_{j, \varepsilon_j > E_c} f_{\text{FD}}(\varepsilon_j, \mu_n) \cdot |\psi_j(\vec{r})|^2 \quad (\text{lokales thermodyn. GGW vorausgesetzt})$$

$$\text{mit } f_{\text{FD}}(\varepsilon, \mu) = \frac{1}{1 + \exp((\varepsilon - \mu)/kT)}$$

- (ii) Wellenfunktionen aus Schrödingergleichung (EWP für ψ_j, ε_j)

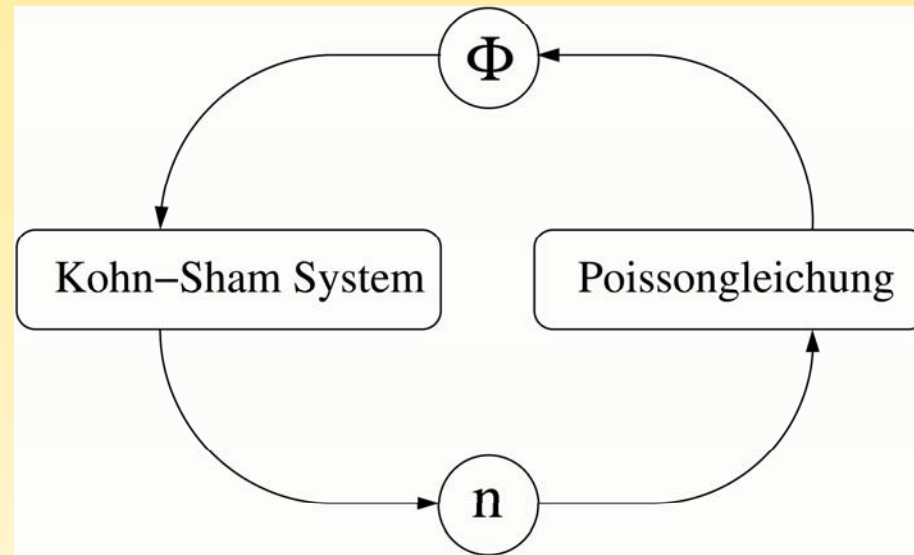
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] \psi_j(\vec{r}) = \varepsilon_j \psi_j(\vec{r})$$

$$\text{mit } V_{\text{eff}}(\vec{r}) = \underbrace{-q\Phi(\vec{r}) + V_{\text{xc}}[n(\vec{r})] + \Delta E_c(\vec{r})}_{\text{Effektivfeld-Näherung, Lokale-Dichte-Näherung}} + \dots$$

Effektivfeld-Näherung, Lokale-Dichte-Näherung

Modellerweiterungen für Nanodimensionen (2)

⇒ Selbstkonsistenzschleife:
(statt $n = n(\Phi, \mu_n)$)



(iii) Effekt von (i) und (ii) kann näherungsweise durch „Dichte-Gradient-Potential“ beschrieben werden:

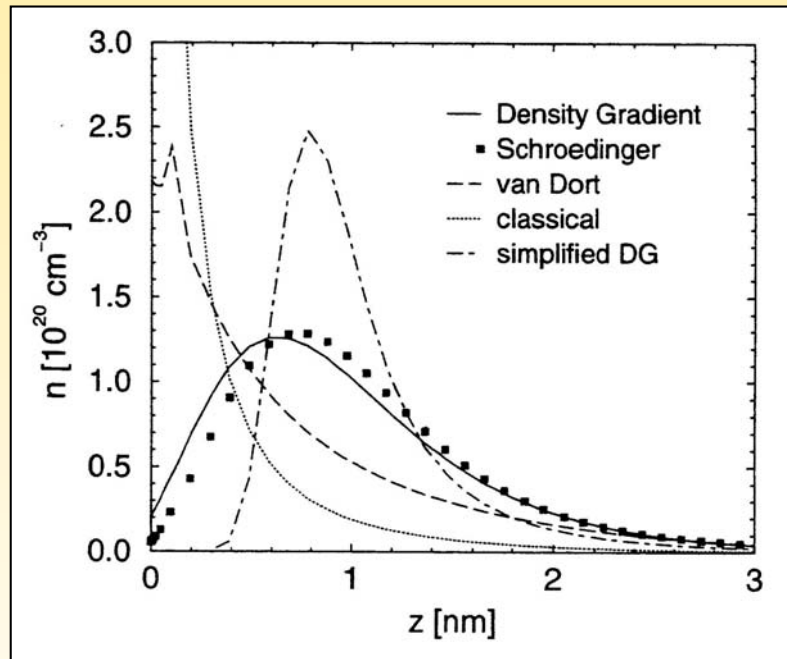
$$\mu_n = -q\Phi + \mu_j + kT \ln \frac{n}{n_j} + b_n \frac{1}{\sqrt{n}} \Delta(\sqrt{n}); \quad b_n = \gamma \frac{\hbar^2}{6m^*}$$

(⇒ Kompatibilität mit klassischen DD-Modellgleichungen gewahrt!)

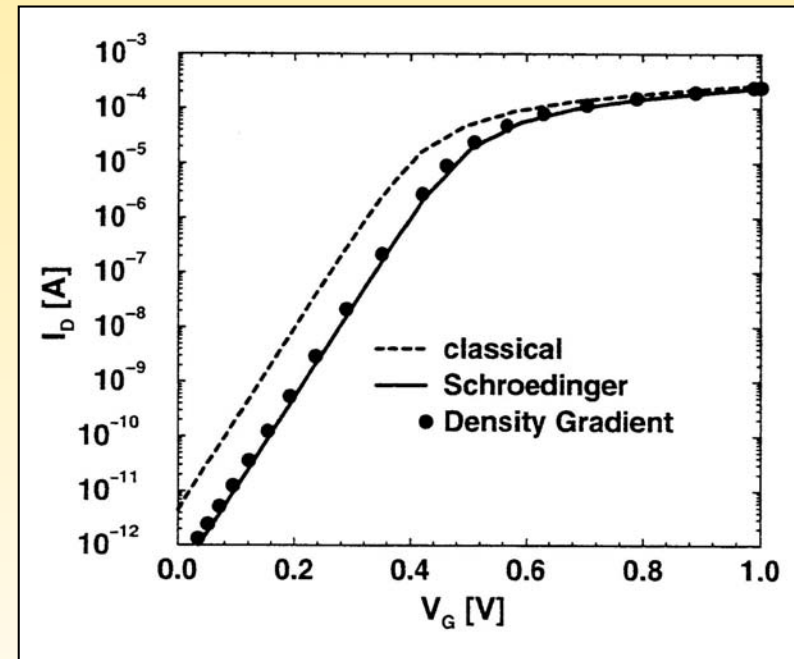
Modellerweiterungen für Nanodimensionen (3)

Beispiel: SOI-MOSFET

$$(L_{ch} = 80 \text{ nm}, N_{ch} = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}, t_{ox} = 1.5 \text{ nm}, d_{body} = 5 \text{ nm})$$



Elektronendichte bei unterschiedlichen Quantisierungsmodellen

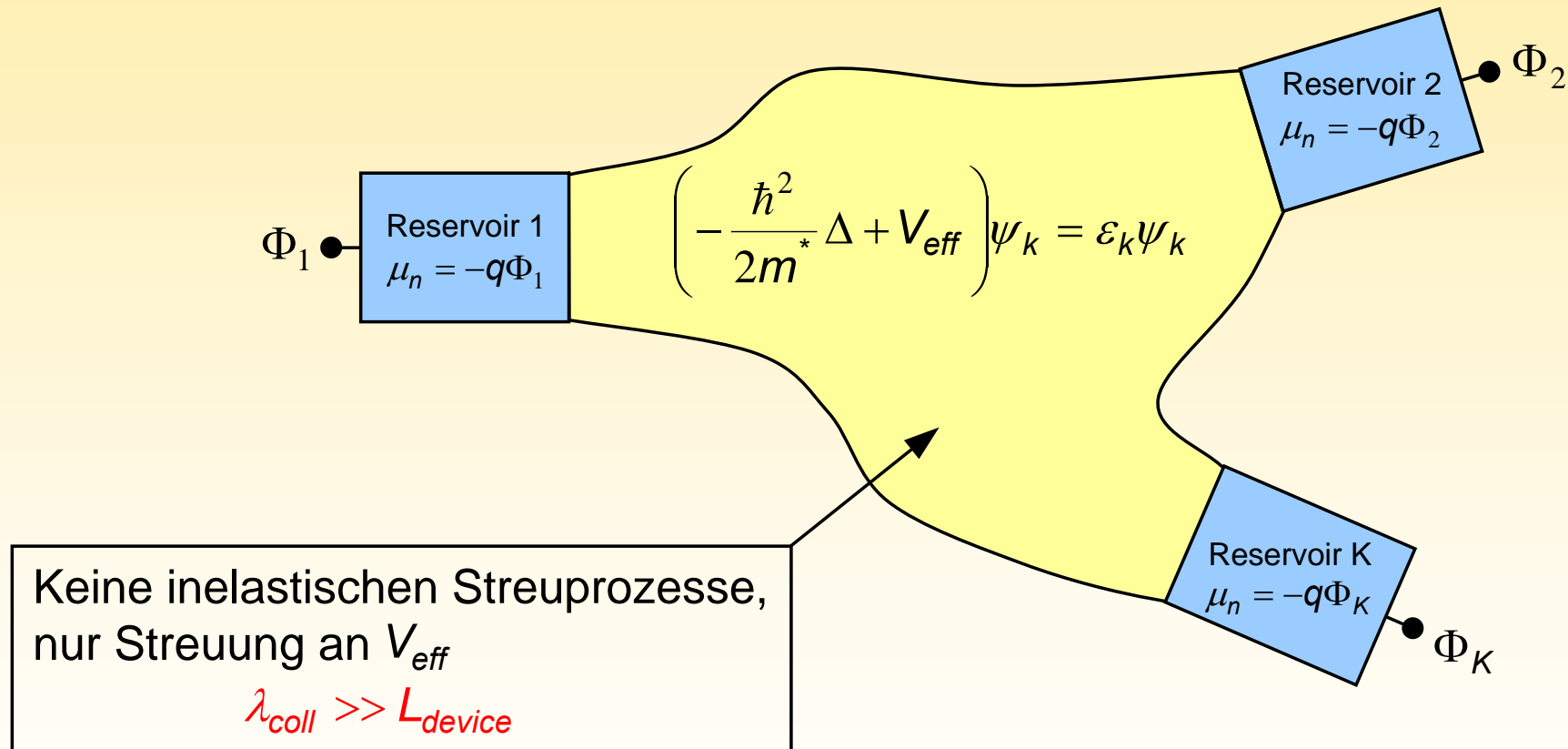


Transferkennlinien des SOI-MOSFET

(aus A. Schenk, Proc. ESSDERC 2001, S.9-16)

B. Quantenmechanische Stromdichten

- (i) **Kohärente Ausbreitung von Wellenfunktionen** zwischen Gebieten im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht („Trägerreservoirs“, „Kontakte“)



Modellerweiterungen für Nanodimensionen (5)

- (ii) **Quantenballistischer Transport:** Elektron bleibt zwischen Injektor und Kollektor in festem Zustand ψ_k und liefert einen Strombeitrag

$$\vec{j}_k(\vec{r}) = -\frac{q}{2m^*} \left(\psi_k^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_k - \psi_k \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_k^* \right)$$

Statistisches Gemisch von Einelektronenzuständen transportiert

Gesamtstromdichte

$$\vec{J}_n(\vec{r}) = \sum_k f_k \vec{j}_k(\vec{r})$$

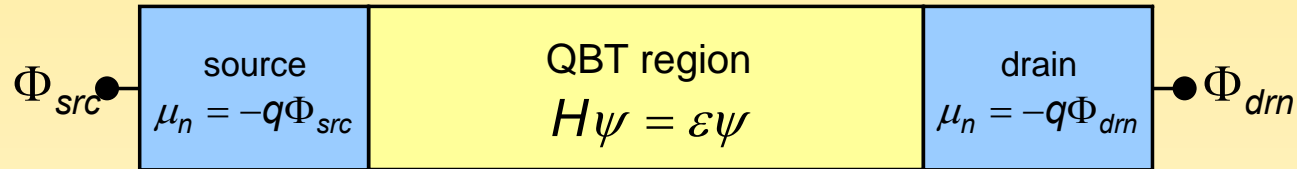
f_k : mittlere statistische Besetzungszahl von ψ_k

Problem:

- Wie schließt man Kontakte an Schrödingergleichung an?
- Wie findet man f_k ?

Modellerweiterungen für Nanodimensionen (6)

(iii) 1D-separierbare Strukturen (2-Klemmen-Strukturen):



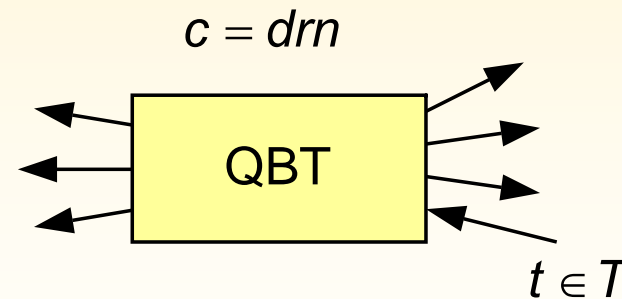
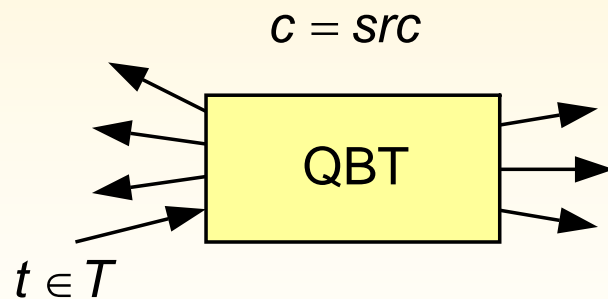
Klassifikation der Elektronenzustände: $k = (c, \varepsilon, t)$

$$c \in \{src, drn\}$$

$$\varepsilon = \text{gegebene Energie} \in [\varepsilon_0, \infty)$$

$$t = \text{transversale Quantenzahl} \in T$$

Streuzustände für



Modellerweiterungen für Nanodimensionen (7)

(iv) Stromdichte für 2-Klemmen-Strukturen:

$$\vec{J}_n(\vec{r}) = 2 \sum_{t \in T} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} d\varepsilon \left[\vec{j}_{src,\varepsilon,t}(\vec{r}) f_{FD}(\varepsilon, \mu_{src}) + \vec{j}_{drn,\varepsilon,t}(\vec{r}) f_{FD}(\varepsilon, \mu_{drn}) \right]$$

„Einlaufende Wellen erben Besetzungswahrscheinlichkeit vom Reservoir.“

Mit geeigneter Abzählung von $t \in T$ gilt: $\vec{j}_{drn,\varepsilon,t}(\vec{r}) = -\vec{j}_{src,\varepsilon,t}(\vec{r})$

$$\Rightarrow \vec{J}_n(\vec{r}) = 2 \sum_{t \in T} \int d\varepsilon \vec{j}_{src,\varepsilon,t}(\vec{r}) [f_{FD}(\varepsilon, \mu_{src}) - f_{FD}(\varepsilon, \mu_{drn})]$$

Ist $\mu_{src} = \mu_{drn} - qU \Rightarrow$ **Kennlinie $I = I(U)$**

(v) In (Quasi-) 1D-Strukturen kann $j_{src,\varepsilon,t}$ als Transmissionskoeffizient für die Partialwelle t interpretiert werden: $j_{src,\varepsilon,t} = -\frac{q}{h} T_t(\varepsilon)$

$$I = -\frac{2q}{h} \sum_{t \in T} \int d\varepsilon T_t(\varepsilon) [f_{FD}(\varepsilon, \mu_{src}) - f_{FD}(\varepsilon, \mu_{drn})]$$

(Landauer-Büttiker-Formel)

Modellerweiterungen für Nanodimensionen (8)

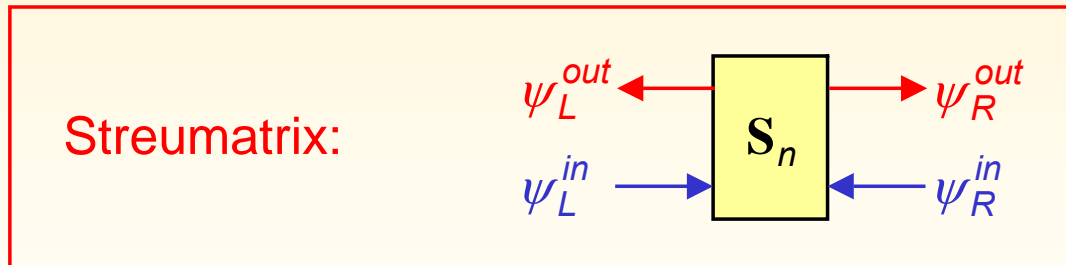
(vi) Technische Durchführung: Transfermatrix-Methode

1. Schritt:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{QBT region} \\ H\psi = \varepsilon\psi \end{array}} = \boxed{H_1} + \boxed{H_2} + \boxed{H_3} + \dots + \boxed{H_N}$$

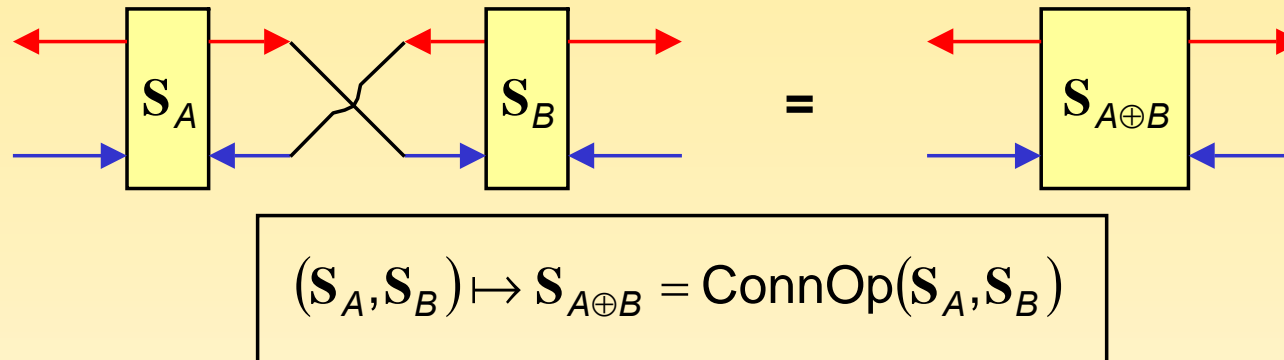
2. Schritt: Lösungen zu

$$H_n\psi = \varepsilon\psi \text{ und RB } \begin{array}{c} \psi_L^{\text{in}} \\ \longrightarrow \end{array} \boxed{H_n} \begin{array}{c} \longleftarrow \\ \psi_R^{\text{in}} \end{array} \text{ liefert } \begin{pmatrix} \psi_L^{\text{out}} \\ \psi_R^{\text{out}} \end{pmatrix} = \mathbf{S}_n \begin{pmatrix} \psi_L^{\text{in}} \\ \psi_R^{\text{in}} \end{pmatrix}$$

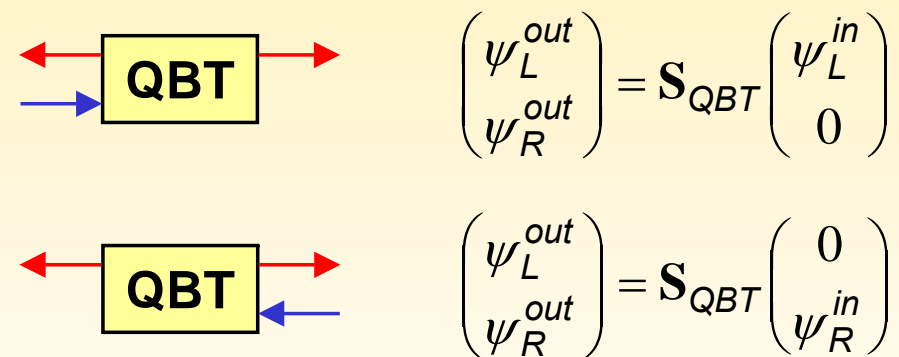


Modellerweiterungen für Nanodimensionen (9)

3. Schritt: Schichtverknüpfung



4. Schritt: Realisierung der äußeren Streubedingung

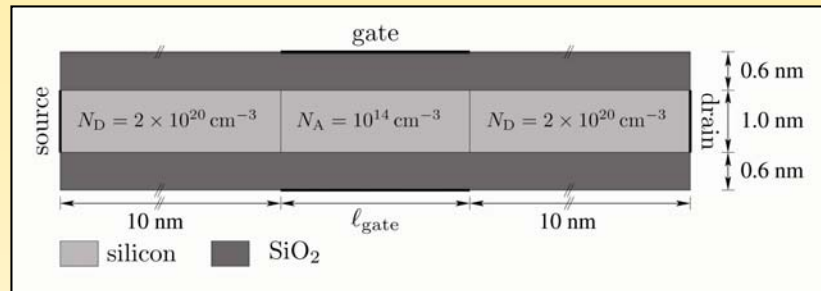


Basis für Stromberechnung: $\psi_L^{in} = b_t; \quad t \in T$

$$\Rightarrow \psi_{R,t}^{out} = S_{RL}^{QBT} b_t \Rightarrow T_t(\varepsilon)$$

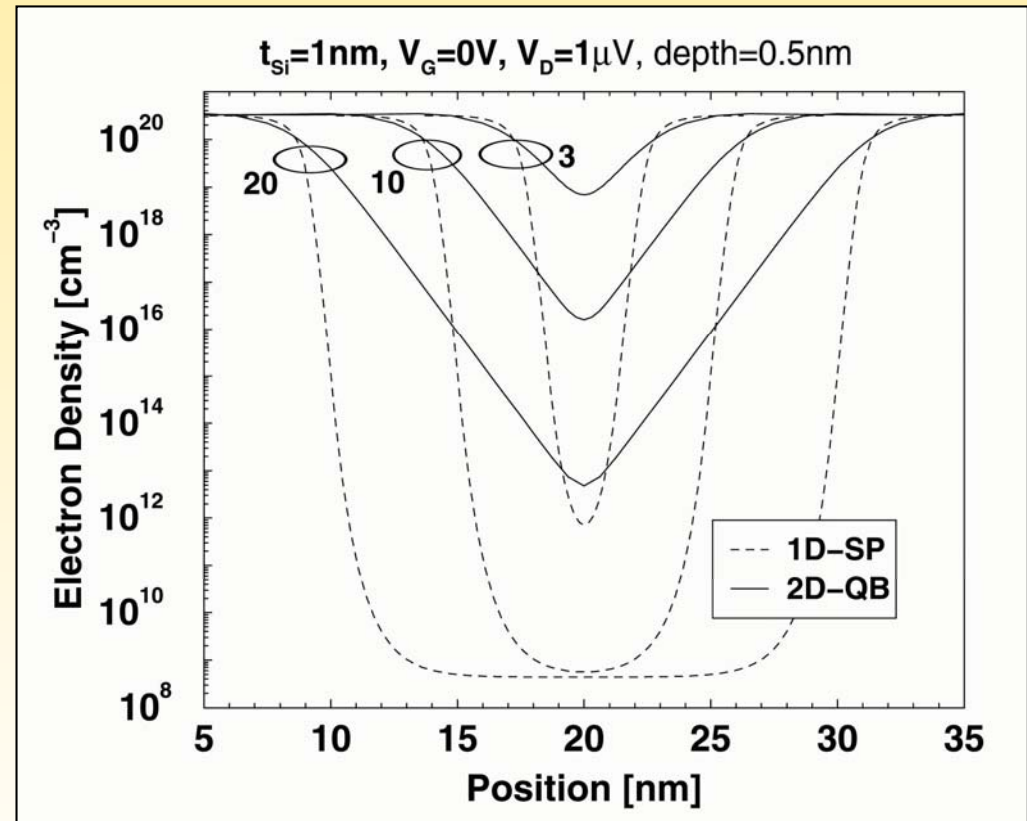
Modellerweiterungen für Nanodimensionen (10)

Beispiel: Quantenballistischer Double-Gate-MOSFET



DG-MOSFET: Geometrie

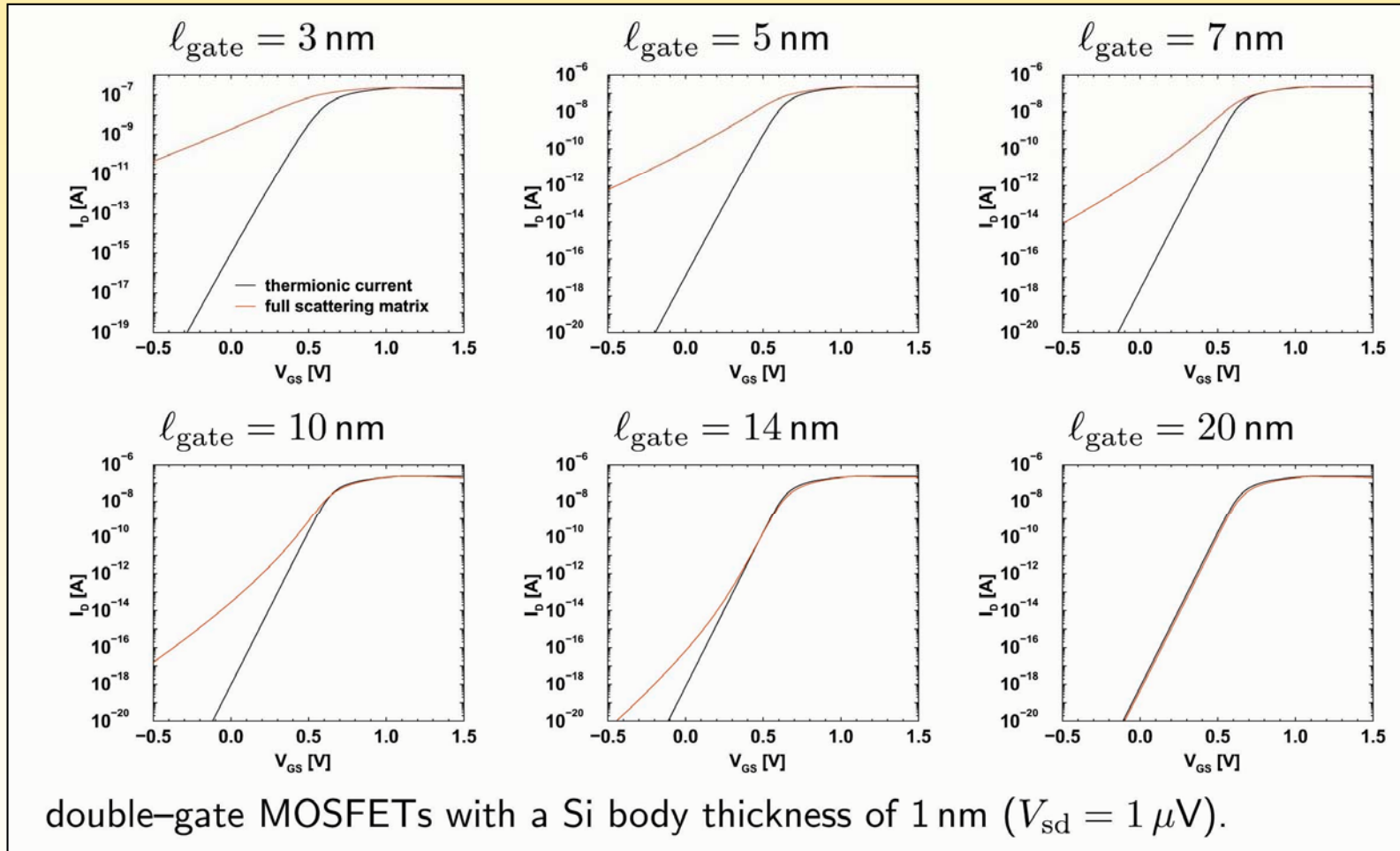
Laterale Trägerdichte in der Kanalmitte.
Lokale Gleichgewichtsdichte im Vergleich
zu quantenballistischer Injektionsdichte.



(aus F. Heinz, Diss. ETHZ, 2004)

Modellerweiterungen für Nanodimensionen (11)

Transferkennlinien bei unterschiedlichen Kanallängen:



(aus F. Heinz, Diss. ETHZ, 2004)

Zusammenfassung

Bauelementstrukturen im Dekananometerbereich



Klassische Transportmodelle bedürfen kritischer Revision

Ballistischer Trägertransport (semi-klassisch)



Boltzmann/Wigner-Transportgleichung, Monte-Carlo-Methoden

Wellencharakter der Ladungsträger



Quantenmechanische Beschreibung der Trägerverteilung (DFT, Kohn-Sham/Poisson)

Kohärenter Trägertransport (quantenballistisch)



Quantenmechanische Beschreibung der Stromverteilung (Transmission, Tunneln)