

TITLUL PROIECTULUI: TRANZISTOR CILINDRIC NANOMETRIC IN FORMALISMUL LANDAUER-BÜTTIKER

Cod proiect: RP-1 / Septembrie 2008

Durata proiectului: 2 ani

Director: Dr. George-Alexandru NEMNES

Noi concepte dezvoltate recent in tehnologia actuala au facut posibila producerea tranzistorilor cu efect de camp cu simetrie cilindrica la scara nanometrica [1, 2]. Caracterul 1-dimensional al acestor dispozitive electronice confera o serie de avantaje fata de corespondentii planari, mai ales in raport cu scalarea la dimensiuni mici: curent sursa-drena sporit in regim de conductie si mai redus in regim de blocare, datorita unui mai bun control electrostatic al portii cilindrice.

La temperaturi joase, lungimea de coerenta devine mai mare decat dimensiunea regiunii active si astfel curentul balistic devine dominant. In aceste conditii, caracteristica I-V este obtinuta rezolvand self-consistent sistemul de ecuatii Schrödinger-Poisson, care constituie o sarcina dificila din punct de vedere numeric pentru sisteme cuantice *deschise* in doua sau mai multe dimensiuni.

In literatura se pot indica cateva modele teoretice [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10] care descriu electrostatica si caracteristica I-V in nanofire cilindrice. Pentru a determina densitatea de sarcina mobila, se pot considera unele simplificari in abordari semi-clasice [5, 6, 8], analitice [9], in timp ce in alte lucrari se folosesc functiile Green de neechilibru [3, 7, 10]. In multe alte studii care privesc transportul balistic, functiile de imprastiere ale sistemului cuantic deschis sunt obtinute folosind "quantum boundary transmitting method" [11, 12, 13].

Pentru a calcula self-consistent distributia de sarcina si potentialul structurii, este necesara determinarea functiilor de unda de imprastiere. In cadrul acestui proiect, acestea sunt calculate eficient folosind formalismul matricii R, pentru un set larg de energii. Formalismul matricii R a fost pentru prima data utilizat de Wigner si Eisenbud in domeniul fizicii nucleare pentru a descrie procese de imprastiere. Mai tarziu, in anii 90' metoda s-a dovedit utila si in fizica semiconductorilor in cazul transportului mezosopic, in contextul utilizarii formalismului Landauer-Büttiker pentru sisteme multi-canal, multi-terminal.

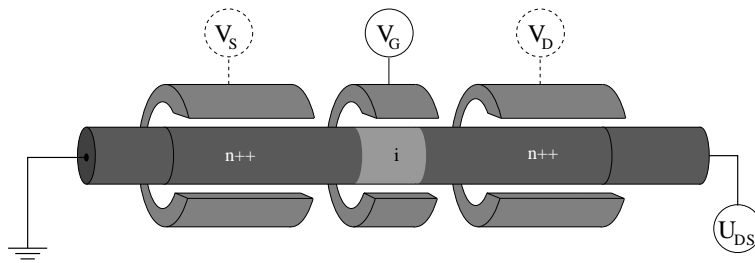


Figura 1: Tranzistor cilindric nanometric cu poarta cilindrica. Poarta centrala controleaza regiunea intrinseca. Celelalte doua porti, corespunzatoare contactelor de sursa/drena, pot fi introduse pentru a reduce efectul portii centrale in cele doua contacte.

Din punct de vedere tehnologic, exista diferite abordari in producerea tranzistorilor cilindrici cu efect de camp. Structura considerata (Fig. 1) capteaza toate elementele esentiale: regiunile cu dopare n++ care corespund contactelor de sursa/drena sunt separate de o regiune scurta de semiconductor intrinsec, care este controlata electrostatic de potentialul aplicat pe poarta cilindrica.

Obiectivul unic al prezentei etape este:

Obtinerea functiilor de imprastiere pentru potentialul radial simetric al tranzistorului,

care a fost atins prin indeplinirea urmatoarelor activitati stiintifice:

- 1) *Obtinerea dezvoltarii potentialului si a Hamiltonianului pentru problema radial simetrica;*
- 2) *Obtinerea matricii S cu ajutorul formalismului matricii R pentru geometria cilindrica;*
- 3) *Elaborarea codului C/MPI pentru a obtine transmisiunile si functiile de imprastiere.*

In continuare este prezentata o sinteza a rezultatelor pentru fiecare din activitati.

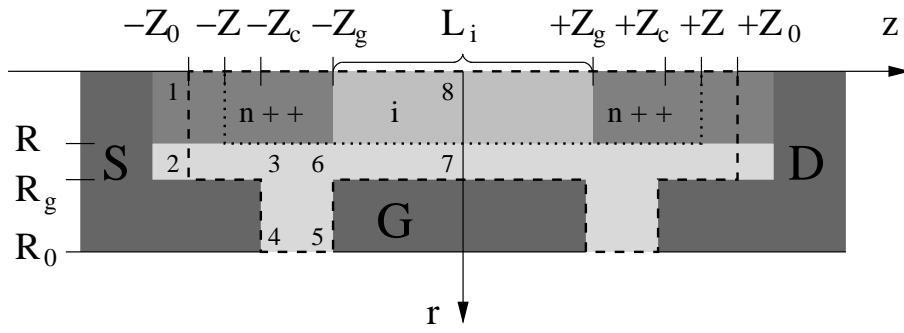


Figura 2: Secțiune în planul (r, z) a structurii radiale simetrice, pentru $r \geq 0$. Regiunea de imprastiere ($r \leq R$ and $-Z \leq z \leq +Z$, marcată de linia punctată) cuprinde o parte a semiconductorului dopat $n++$ și regiunea intrinsecă. Condițiile la limita pentru ecuația Poisson vor fi aplicate pe linia poligonală întreruptă.

1) Obținerea dezvoltării potențialului și a Hamiltonianului pentru problema radial simetrică

Sistemul analizat este prezentat schematic în Fig. 2. Tranzistorul este simetric în raport cu planul $z = 0$ și radial simetric în raport cu axa z .

Metoda matricii R presupune spațiul considerat în simulare divizat în două regiuni: o regiune internă, corespunzătoare regiunii de imprastiere ($r \leq R$ și $-Z \leq z \leq +Z$) și o regiune externă ($r \leq R$ și $z < -Z$, pentru sursă, $z > +Z$, pentru drenă), corespunzătoare lead-urilor semi-infinite. Acestea din urmă sunt invariante la translație, iar potențialul perpendicular de confinare determină spectrul discret ce corespunde diferitelor canale pe care electronii se pot propaga în lungul firului. În general, pentru un potențial arbitrar în regiunea de imprastiere, electronii vor fi imprastiați de pe un canal pe oricare altul, cu o probabilitate ce se determină cu ajutorul matricii de imprastiere S. Formalismul matricii R introduce o relație explicită de calcul a matricii S, din care se determină atât coeficienții de transmisie, cât și funcțiile de undă.

Pentru sistemul considerat, funcțiile de undă sunt soluții ale ecuației Schrödinger staționare

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + W(\vec{r}) - E \right] \Psi(\vec{r}; E) = 0, \quad (1)$$

unde m^* este masa efectivă. Banda interzisă mare a izolatorului ce înconjoară firul implică cu o bună aproximație $\Psi(r = R) = 0$. Datorită simetriei la rotație, avem $W(\vec{r}) = W(r, z)$ iar soluția poate fi scrisă:

$$\Psi_m(r, z, \theta; E) = \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} \psi_m(r, z; E), \quad (2)$$

unde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ este numărul cuantic magnetic. Fiecare index m definește o problemă 2-dimensională în coordonate (r, z) . Folosind metoda separării variabilelor, se obține:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + W(r, z) - E \right] \psi_m(r, z; E) = 0. \quad (3)$$

Pentru calculul matricii R este necesară rezolvarea problemei Wigner-Eisenbud, asociată regiunii de imprastiere. Aceasta este similară ecuației (3):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + W(r, z) - E_{lm} \right] \chi_{lm}(r, z) = 0, \quad (4)$$

cu excepția condițiilor la capete impuse la interfața cu lead-urile sursă/drenă, care sunt:

$$\left[\frac{\partial \chi_{lm}}{\partial z}(r, z) \right]_{(z=\pm Z)} = 0. \quad (5)$$

Asadar, spre deosebire de problema de imprastiere (3) în care condițiile la frontieră regiunii de imprastiere (interfețele cu cele două lead-uri) nu sunt cunoscute *a priori*, acum condițiile impuse pentru problema auxiliară Wigner-Eisenbud sunt cunoscute.

Funcțiile și energiile Wigner-Eisenbud au fost obținute numeric, prin diagonalizarea matricii Hamiltonianului folosind baza ortonormată $w_{ij}(r, z) = u_i(r)v_j(z)$:

$$u_i(r) = \frac{\sqrt{2}}{R J_{p+1}(\alpha_{ip})} J_p\left(\alpha_{ip} \frac{r}{R}\right) \quad v_j(z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2Z}}, & j = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{Z}} \cos\left[\frac{j\pi}{2Z}(z + Z)\right], & j \neq 0 \end{cases}. \quad (6)$$

unde $J_p(r)$ este functia Bessel de ordin p , cu zerourile α_{ip} . Numeric, s-a considerat $p = 0$, in timp ce dezvoltarea potentialului a fost realizata cu N_{br}, N_{bz} componente de baza, pentru directiile r si z , respectiv. Se observa faptul ca functiile $v_j(z)$ respecta conditiile la capete impuse (ec. (5)).

Pentru calculul elementelor de matrice ale Hamiltonianului 2-dimensional H_{rz} din ecuatia (4), $\langle w_{i'j'} | H_{rz} | w_{ij} \rangle$, s-au calculat analitic derivatele $\partial/\partial r$, $\partial^2/\partial r^2$, $\partial^2/\partial z^2$ aplicate elementelor din baza:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_i(r) &= \left[\frac{1}{r} J_1 \left(\alpha_{i0} \frac{r}{R} \right) - \frac{\alpha_{i0}}{R} J_0 \left(\alpha_{i0} \frac{r}{R} \right) \right] \frac{\sqrt{2} \alpha_{i0}}{R^2 J_1(\alpha_{i0})} \\ \frac{\partial}{\partial r} u_i(r) &= -\frac{\sqrt{2} \alpha_{i0}}{R^2 J_1(\alpha_{i0})} J_1 \left(\alpha_{i0} \frac{r}{R} \right) \\ \frac{1}{r^2} m^2 u_i(r) &= \frac{\sqrt{2}}{R J_1(\alpha_{i0})} m^2 \frac{1}{r^2} J_0 \left(\alpha_{i0} \frac{r}{R} \right) \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_j(z) &= \begin{cases} 0, & j = 0 \\ -\left(\frac{j\pi}{2Z}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{Z}} \cos \left[\frac{j\pi}{2Z}(z + Z) \right], & j \neq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

Cu ajutorul ecuatiilor (7) s-au obtinut elementele de matrice ale Hamiltonianului rezolvand numeric integralele aferente.

2) Obtinerea matricii S cu ajutorul formalismului matricii R pentru geometria cilindrica

Functiile $\chi_{lm}(r, z)$ si valorile proprii E_{lm} corespunzatoare problemei Wigner-Eisenbud formulate in ecuatiile (4) si (5) au fost determinate numeric folosind proceduri din pachetul LAPACK. Cu ajutorul acestora, s-a definit cate o matrice R pentru fiecare numar cuantic m :

$$R_{snm, s'n'm}(E) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_l^{\infty} \frac{\tilde{\chi}_{l,snm} \tilde{\chi}_{l,s'n'm}}{E - E_{lm}}, \quad (8)$$

unde coeficientii $\tilde{\chi}_{l,snm}$ sunt determinati de

$$\tilde{\chi}_{l,snm} = \int_0^R dr' r' \chi_{lm}(r, (-1)^s Z) \Phi_{nm}(r'), \quad (9)$$

iar functiile $\Phi_{nm}(r)$ sunt solutii ale ecuatiei Schrödinger radiale in *lead*-ul s , unde potentialul este constant in directia z ($W(r, z) = W^{S/D}(r)$ pentru $z < -Z$ si $z > +Z$):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right) + W^{S/D}(r) - E_{\perp}^{nm} \right] \Phi_{nm}(r) = 0. \quad (10)$$

Modurile $\Phi_{nm}(r)$ si energiile perpendiculare corespunzatoare, E_{\perp}^{nm} definesc canalele pe care se propaga electronii in fiecare *lead*. Vectorii de unda in lungul axei z , in *lead*-ul s , corespunzator numerelor cuantice radial n si unghiular m , se scriu: $k_{snm} = \hbar^{-1} \sqrt{2m^*(E - E_{\perp}^{nm})}$.

Relatia dintre matricile R si S se scrie in forma compacta [16]:

$$\mathbf{S} = -\frac{\mathbf{1} + \frac{i}{m^*} \mathbf{Rk}}{\mathbf{1} - \frac{i}{m^*} \mathbf{Rk}}, \quad (11)$$

unde $(\mathbf{k})_{snm, s'n'm} = k_{snm} \delta_{ss'} \delta_{nn'}$ este o matrice diagonala.

Avantajul numeric al acestei abordari devine clar in contextul calculului self-consistente in care este necesara determinarea matricii S pentru un set larg de energii. Astfel, intr-un prim pas, *independent* de energie, se rezolva problema Wigner-Eisenbud, care reprezinta partea cea mai mare a efortului numeric (diagonalizarea matricii Hamiltonianului). In al doilea pas, matricea R este construita conform relatiei (8) cu un efort neglijabil pentru fiecare din energiile E considerate, iar matricea S este determinata inversand matricea $[\mathbf{1} - i/m^* \mathbf{Rk}]$, care are o cardinalitate data de numarul canalelor considerate.

3) Elaborarea codului C/MPI pentru a obtine transmisiile si functiile de imprastiere

Transmisia totala intre doua contacte se determina cu ajutorul matricii S: $T_{ss'}(E) = \sum_{i,i'} |\tilde{S}_{\nu\nu'}(E)|^2$, unde $\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{k}^{1/2} \mathbf{S} \mathbf{k}^{-1/2}$, $\nu = snm$, iar suma se face numai peste canalele deschise (vectori de unda k_{ν} reali).

Considerand potential constant in lungul celor doua *lead*-uri, $W(r, z) = W^{S/D}(r)$ pentru $z < -Z$ si $z > +Z$, functiile de unda in *lead*-ul s se scriu:

$$\begin{aligned}
\psi_{nm,S}^{(1)}(r, z; E) &= \frac{1}{\sqrt{2L_z}} e^{ik_{1nm}(z+Z)} \Phi_{nm}(r) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} S_{1nm,1n'm}^t(E) e^{-ik_{1n'm}(z+Z)} \Phi_{n'm}(r) \\
\psi_{nm,D}^{(1)}(r, z; E) &= \frac{1}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} S_{1nm,2n'm}^t(E) e^{ik_{2n'm}(z-Z)} \Phi_{n'm}(r) \\
\psi_{nm,D}^{(2)}(r, z; E) &= \frac{1}{\sqrt{2L_z}} e^{-ik_{2nm}(z-Z)} \Phi_{nm}(r) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} S_{2nm,2n'm}^t(E) e^{ik_{2n'm}(z-Z)} \Phi_{n'm}(r) \\
\psi_{nm,S}^{(2)}(r, z; E) &= \frac{1}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} S_{2nm,1n'm}^t(E) e^{-ik_{1n'm}(z+Z)} \Phi_{n'm}(r),
\end{aligned} \tag{12}$$

pentru particule care vin dinspre sursa sau drena (directia este indicata prin indexul superior 1 sau 2).

Funcțiile de unda in regiunea de imprastiere (SR), pentru particule ce provin din contactele sursa/drena se pot scrie [14] (vezi Appendix C) in functie de derivatele lor normale la interfetele cu cele doua *lead*-uri. Folosind relatia de continuitate la interfetele sursa/drena si ecuatia (12) se obtine:

$$\begin{aligned}
\psi_{nm,SR}^{(1)}(r, z; E) &= \frac{i}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} [\delta_{nn'} - S_{1nm,1n'm}^t(E)] k_{1n'm} \tilde{R}_{1n'm}(r, z; E) \\
&+ \frac{-i}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} S_{1nm,2n'm}^t(E) k_{2n'm} \tilde{R}_{2n'm} \\
\psi_{nm,SR}^{(2)}(r, z; E) &= \frac{-i}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} S_{2nm,1n'm}^t(E) k_{1n'm} \tilde{R}_{1n'm} \\
&+ \frac{i}{\sqrt{2L_z}} \sum_{n'} [\delta_{nn'} - S_{2nm,2n'm}^t(E)] k_{2n'm} \tilde{R}_{2n'm}(r, z; E),
\end{aligned} \tag{13}$$

cu

$$\tilde{R}_{snm}(r, z; E) = \int_0^R dr' r' R_m(r, z, r', (-1)^s Z) \Phi_{nm}(r'). \tag{14}$$

Normarea functiilor de unda se poate scrie formal:

$$\int_0^R dr r \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-L_z}^{+L_z} dz |\Psi_{nm}^{(s)}(r, \theta, z; E)|^2 = 1. \tag{15}$$

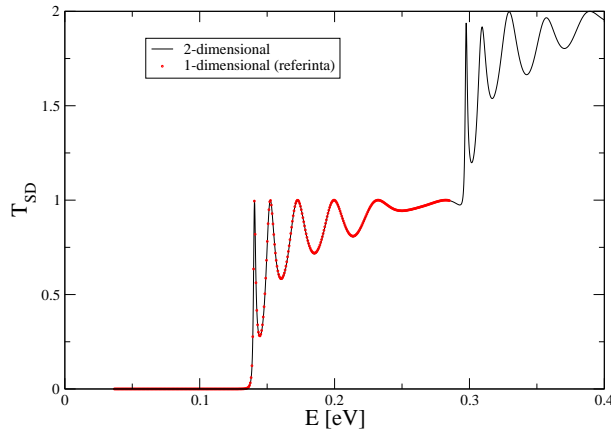


Figura 3: Transmisia modului $m = n = 0$ ca functie de energia totala E pentru un sistem test descris in text.

Pentru a testa codul numeric dezvoltat pentru problema 2-dimensională, s-au comparat rezultatele obtinute pentru transmisie in cazul unui sistem ce poate fi evaluat analitic: transmisia peste o bariera rectangulara

($W(r, z) = 0.1eV$, pentru $-Z/2 < z < +Z/2$ si $W(r, z) = 0eV$ in rest), cu $R = 5nm$, $Z = 20nm$, masa efectiva $m^* = 0.24m_0$ (vezi Fig. 3). Curba de referinta 1-dimensionala a fost translata cu energia primului mod perpendicular $m = n = 0$. Pentru sistemul considerat, potentialul in cele doua *lead*-uri este constant nul si energiile modurilor sunt date de $E_{\perp}^{nm} = \hbar^2/2m^*(\alpha_{nm}/R)^2$, unde α_{nm} este zeroul de ordin n al functiei Bessel de ordin m . Energia primului mod este $E_{\perp}^{00} = 0.036eV$. Functiile de unda de imprastiere corespunzatoare regiunii de tunelare si a primelor trei maxime in transmisie sunt reprezentate in Fig. 4. Teste similare s-au efectuat si pentru alte sisteme cu potential neseparabil.

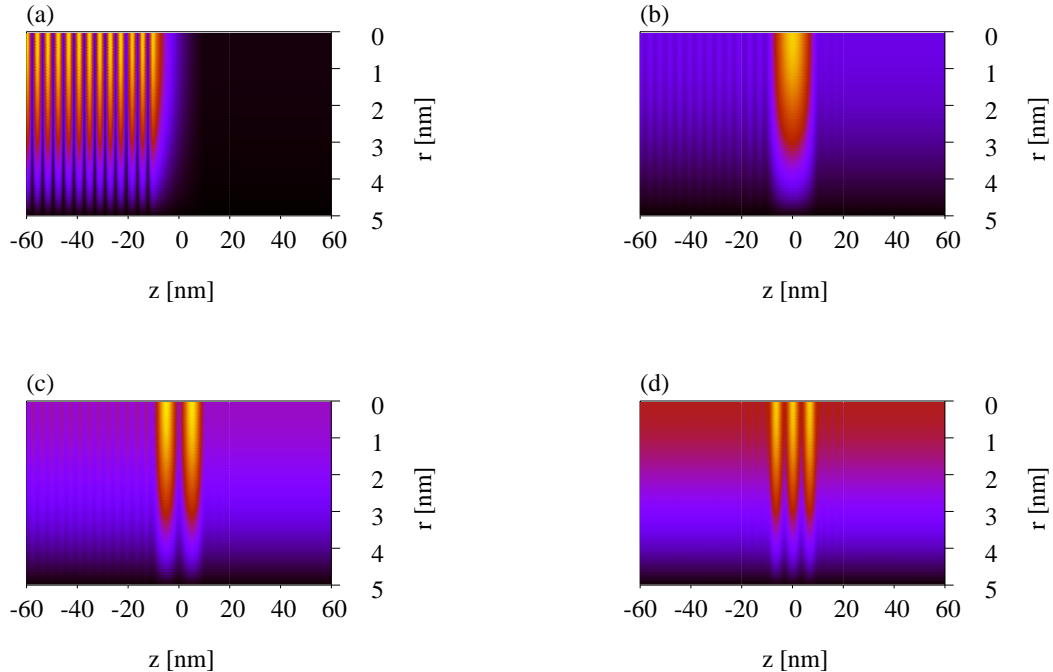


Figura 4: Functii de unda de imprastiere (valoare absoluta) pentru modul perpendicular incident corespunzator $m = 0$, $n = 0$, incident din sursa (stanga) avand energia totala (E): 0.130 eV (a), 0.141 eV (b), 0.152 eV (c), 0.173 eV (d). (a) corespunde tunelarii, si deci unui coeficient de reflexie mare ≈ 1 . (b)-(d) corespund primelor 3 maxime in transmisie, observandu-se aparitia rezonantelor Fabry-Perot in regiunea barierei, $-10nm < z < +10nm$.

In contextul calculelor self-consistente, este necesar ca functiile de unda sa fie determinate pentru un numar mare de energii ale particulelor incidente, pentru diferite numere cuantice m corespunzatoare fiecarei probleme 2-dimensionale. Pentru a scurta timpul de executie, codul numeric scris in limbajul de programare C utilizeaza comenzi MPI (Message Passing Interface) pentru a calcula in paralel functiile de unda. Structura codului C/MPI este de tip *master-worker* in care nodul central *master* distribuie problemele 2-dimensionale catre celelalte noduri disponibile, de tip *worker*. Pe sistemul multi-procesor utilizat a fost instalat sistemul de operare linux Debian 5.0/lenny, cu pachetele necesare calculului numeric paralel: LAM (Local Area Multicomputer), LAPACK (Linear Algebra Package), GSL (Gnu Scientific Library).

Concluzii

Obiectivul unic al acestei etape a fost realizat in totalitate, obtinandu-se functiile de imprastiere pentru potentialul radial simetric al tranzistorului. In acest scop, au fost obtinute elementele de matrice ale Hamiltonianului, matricea S cu ajutorul formalismului matricii R si a fost elaborat codul C/MPI pentru obtinerea transmisiilor si functiilor de unda.

Rezultatele se regasesc in lucrarea "Self-consistent potentials and linear regime conductance of cylindrical nanowire transistors in the R-matrix formalism", acceptata¹ spre publicare in *Journal of Applied Physics*, vol. 106 (12), 2009.

Bibliografie

- [1] K. H. Cho et al., Appl. Phys. Lett. **92**, 052102 (2008).

¹Pentru vizualizare status: http://www.aip.org/servlet/AmsisReply?name=Nemnes&article_id=007924JAP&ECODE=

- [2] Tomas Bryllert, Lars-Erik Wernersson, Truls Löwgren and Lars Samuelson, *Nanotechnology* **17**, S227 (2006).
- [3] Joerg Appenzeller, Joachim Knoch, Mikael T. Björk, Heike Riel, Heinz Schmid and Walter Riess, *IEEE Trans. Electron Devices* **55**, 2827 (2008).
- [4] Lingquan Wang, Deli Wang, Peter M. Asbeck, *Solid-State Electronics* **50**, 1732 (2006).
- [5] Jing Guo, Jing Wang, Eric Polizzi, Supriyo Datta and Mark Lundstrom, *IEEE Trans. Nanotechnology* **2**, 329 (2003).
- [6] Biswajit Ray and Santanu Mahapatra, *IEEE Trans. Electron Devices* **55**, 2409 (2008).
- [7] Jing Wang, Eric Polizzi and Mark Lundstrom, *J. Appl. Phys.* **96**, 2192 (2004).
- [8] D. Jimenez, J. J. Saenz, B. Iniguez, J. Sune, L. F. Marsal and J. Pallares, *J. Appl. Phys.* **94**, 1061 (2003).
- [9] E. P. Pokatilov et al., *J. Appl. Phys.* **85**, 6625 (1999).
- [10] Seonghoon Jin, Young June Park and Hong Shick Min, *J. Appl. Phys.* **99**, 123719 (2006).
- [11] William R. Frensley, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 745 (1990).
- [12] Craig S. Lent and David. J. Kirkner, *J. Appl. Phys.* **67**, 6353 (1990).
- [13] M. Ali Pourghaderi, Wim Magnus, Bart Soree, Kristin De Mayer, Marc Meuris, Marc Heyns, *J. Comput. Electron.* **7**, 475 (2008).
- [14] U. Wulf, J. Kucera, P. N. Racec and E. Sigmund, *Phys. Rev. B* **58**, 16209 (1998).
- [15] E. Onac, J. Kucera and U. Wulf, *Phys. Rev. B* **63**, 085319 (2001).
- [16] G. A. Nemnes, U. Wulf and P. N. Racec, *J. Appl. Phys.* **96**, 596 (2004).
- [17] G. A. Nemnes, U. Wulf and P. N. Racec, *J. Appl. Phys.* **98**, 084308 (2005).