

**TITLUL PROIECTULUI:** TRANZISTOR CILINDRIC NANOMETRIC IN FORMALISMUL LANDAUER-BÜTTIKER

**Cod proiect:** RP-1 / Septembrie 2008

**Durata proiectului:** 2 ani

**Etapa II**

**Director:** Dr. George-Alexandru NEMNES

Proiectul RP1/Septembrie 2008 are ca scop principal analiza sistemului de tip tranzistor nanometric cu geometrie cilindrica, in contextul calculului self-consistente.

Sistemul analizat este prezentat schematic in Fig. 1. Tranzistorul este simetric in raport cu planul  $z = 0$  si radial simetric in raport cu axa  $z$ .

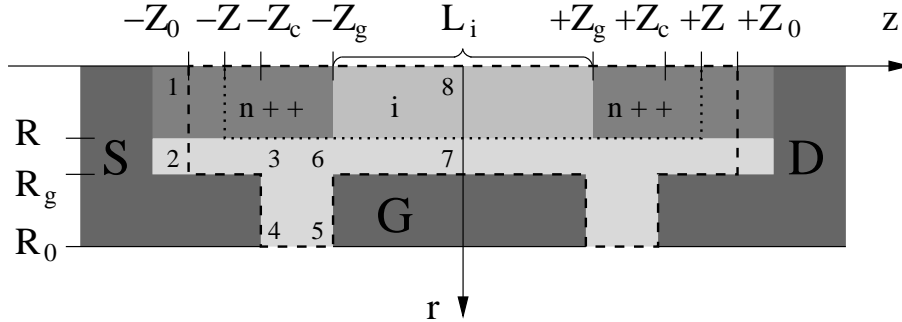


Figure 1: Sectiune in planul  $(r, z)$  a structurii radial simetrice, pentru  $r \geq 0$ . Regiunea de imprastiere ( $r \leq R$  and  $-Z \leq z \leq +Z$ , marcata de linia punctata) cuprinde o parte a semiconductorului dopat n++ si regiunea intrinseca. Conditii la limita pentru ecuatia Poisson sunt aplicate pe linia poligonala intrerupta.

Obiectivele etapei a II-a sunt:

- 1) Rezolvarea ecuatiei Poisson in coordonate cilindrice;
- 2) Obtinerea potentialului self-consistent si densitatea de sarcina electronica pentru problema de imprastiere 2-dimensional;
- 3) Determinarea caracteristicii I-V in limita balistica;
- 4) Implementarea algoritmului 3-dimensional pentru problema de imprastiere.

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

1) Rezolvarea ecuatiei Poisson in coordonate cilindrice

Ecuatia Poisson este rezolvata numeric folosind metoda elementelor finite. Pentru sistemul analizat (Fig. 1) conditiile la capete in semi-planul  $z < 0$  sunt mixte (de tip Dirichlet si Neumann), corespunzatoare liniei poligonale numerotate:

$$\begin{aligned}
 (1-2) \quad & V(r, z = -Z_0) = V^{S/D}(r) \\
 (2-3) \quad & V(r = R_g, z) = 0 \\
 (3-4) \quad & V(r, z = -Z_c) = 0 \\
 (4-5) \quad & \left( \frac{\partial V}{\partial r} \right)_{r=R_0} = 0 \\
 (5-6) \quad & V(r, z = -Z_g) = V_g \\
 (6-7) \quad & V(r = R_g, z) = V_g \\
 (8-1) \quad & \left( \frac{\partial V}{\partial r} \right)_{r=0} = 0
 \end{aligned} \tag{1}$$

Marimea  $V^{S/D}(r)$  fixeaza conditia la capete pentru contactele de sursa si drena. Acestea sunt date de potentialul radial self-consistent corespunzator unui fir infinit dopat n++, care este totodata potential asimptotic

in cele doua contacte. Distributia exacta este dedusa in sectiunea urmatoare.  $V_g$  reprezinta tensiunea aplicata pe poarta, relativ la contactul impamantat (sursa).

2) Obtinerea potentialului self-consistent si densitatea de sarcina electronica pentru problema de imprastiere 2-dimensională;

Procedura iterativa de rezolvare a sistemului cuplat de ecuatii, Schrödinger si Poisson, presupune un mixaj liniar intre energia potentiala  $W_{sc}$  si potentialul electrostatic  $V$  dat de ecuatia Poisson

$$W_{sc}(r, z) = (1 - f_{mix}) W_{sc}(r, z) + f_{mix} eV(r, z). \quad (2)$$

Parametrul de convergenta este definit pentru seturile de puncte  $\bar{W}_{sc}$  si  $\bar{V}$ :

$$\mathcal{C} = \frac{\|\bar{W}_{sc} - e\bar{V}\|_{\infty}}{\min(\|\bar{W}_{sc}\|_{\infty}, \|e\bar{V}\|_{\infty})}, \quad (3)$$

unde  $\|x\|_{\infty} = \sup_n \{|x_n|\}$ . Prin aceasta definitie se urmareste limitarea erorii maxime relative in punctele de interes (regiunea de imprastiere).

Pentru a obtine potentialul self-consistent si densitatea de sarcina electronica in cazul structurii de tip tranzistor cilindric, s-au desfasurat trei etape:

(a) *Fir infinit cu dopare n++*

Se considera un fir infinit cu dopare n++ si se calculeaza potentialul radial self-consistent  $V^{S/D}(r)$ . Schema de calcul self-consistent are ca punct de pornire alegerea energiei potentiale  $W^{S/D}(r) = 0$ . Astfel, modurile proprii  $E_{\perp}^{nm}$  pot fi determinate. In continuare, la fiecare iteratie, energia Fermi este calculata astfel incat

$$N_d = \frac{2}{\pi R^2} \int_0^{E_F} dE \sum_{n,m} g_{1D}(E - E_{\perp}^{nm}), \quad (4)$$

unde

$$g_{1D}(E) = \frac{m^{*1/2} \mathcal{H}(E - E_{\perp}^{nm})}{\sqrt{2\pi\hbar} \sqrt{E - E_{\perp}^{nm}}} \quad (5)$$

este densitatea de stari 1-dimensională pentru particule cu spin, pentru o directie a vectorului de unda in directia  $z$  ( $k_z > 0$ ) si  $\mathcal{H}(E)$  este distributia Heaviside. Datorita dopajului puternic, semiconductorul n++ este degenerat si benzile generate de impuritati se suprapun cu banda de conductie, ceea ce conduce la energii de ionizare mici. De aceea putem presupune ca toti donorii semiconductorului degenerat sunt ionizati.

Rezultatele obtinute pentru energia potentiala self-consistentă,  $W^{S/D}(r)$ , precum si pentru densitatea de electroni,  $n^{S/D}(r)$  sunt prezentate in Fig. 2. Factorul de mixing folosit este  $f_{mix} = 0.1$ , iar pentru parametrul de convergenta s-a impus conditia  $\mathcal{C} < 10^{-9}$ . Conditia de anulare a functiei de unda la  $r = R$  comprima sarcina negativa in nanofir, introducand un salt in energia potentiala de 0.151 eV. Pentru potentialul self-consistent obtinut, energia Fermi este  $E_F = 0.361eV$ . Exista numai 5 moduri proprii astfel incat  $E_{\perp}^{nm} \leq E_F$ . Numarul cuantic azimutal  $m$  poate lua valorile 0,  $\pm 1$ ,  $\pm 2$ ,  $\pm 3$ , in timp ce numarul cuantic  $n$  corespunzator directiei radiale are doua valori numai pentru  $m = 0$ . Maximul larg in graficul densitatii de electroni in jurul valorii  $r = 3nm$  este consecinta suprapunerii contributiilor modurilor cu  $m \neq 0$ , care sunt similare functiilor Bessel corespunzatoare. De aceea este important de remarcat ca, desi doparea n++ are valori relativ mari, datorita faptului ca raza firului este mica, numarul redus de moduri transversale produce un potential radial neuniform. Aceasta situatie contrasteaza cu imaginea clasica a contactelor perfect ecranate.

(b) *Fir infinit cu dopare n++ si o regiune finita intrinseca*

In aceasta a doua etapa, este introdusa o regiune finita intrinseca, de lungime  $L_i$  in firul infinit dopat n++. Densitatea de sarcina mobila este construita in aproximatia Hartree, folosind funtiile de unda (de imprastiere) ale sistemului cuantic deschis:

$$\rho(r, z) = e \int_0^{E_F} dE \sum_{s,n,m} g_{1D}(E - E_{\perp}^{nm}) \times 2L_z |\Psi_{nm}^{(s)}(r, z; E)|^2. \quad (6)$$

In suma tripla,  $s$  ia valorile 1 si 2 pentru sursa si drena, in timp ce  $n, m$  indeplinesc conditia  $E_{\perp}^{nm} \leq E$ . Aceasta suma mai este cunoscuta si sub numele de densitate locala de stari.

Graficele in coordonate  $(r, z)$  realizate pentru energia potentiala  $W_{sc}(r, z)$  si densitatea de electroni  $n_{sc}(r, z)$  in regiunea de imprastiere, in cazul unui fir cu lungimea regiunii intrinsece  $L_i = 8nm$  sunt descrise in Fig. 3. Cateva sectiuni pentru  $r = 0$ ,  $r = R$  and  $z = 0$  pentru  $L_i = 4nm, 8nm$  sunt prezentate comparativ in Fig. 4.

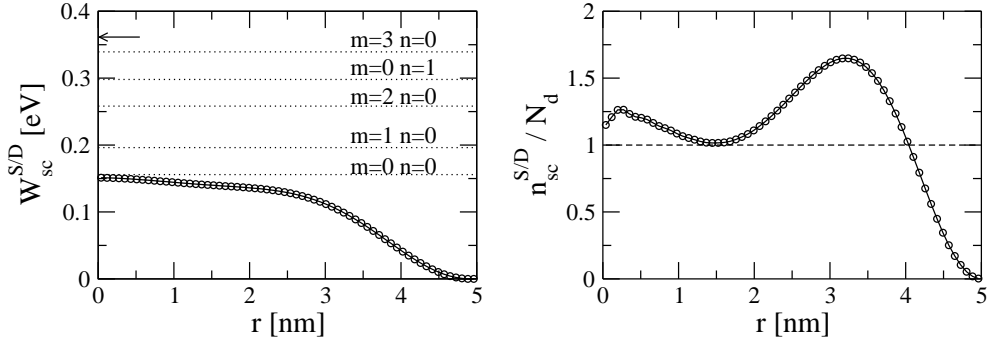


Figure 2: (Stanga) Energia potentiala self-consistenta a firului dopat, infinit. Sageata marcheaza pozitia nivelului Fermi. Linile punctate reprezinta energiile modurilor proprii perpendiculare  $E_{\perp}^{nm}$ . (Dreapta) Densitatea de electroni (cercuri) relativ la desitatea de sarcina pozitiva a donatorilor ionizati (linie intrerupta).

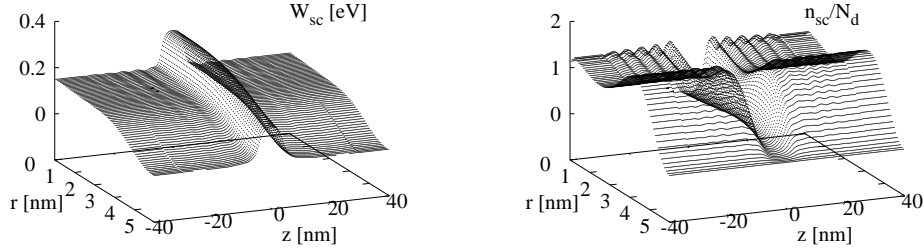


Figure 3: Energia potentiala self-consistenta  $W_{sc}$  (stanga) si densitatea de electroni  $n_{sc}/N_d$  (dreapta) pentru nano-firul dopat  $n++$ , avand o regiune intrinseca de lungime  $L_i = 8nm$ .

Ambele potentiale self-consistente au fost obtinute pentru un parametru de convergenta  $\mathcal{C} < 10^{-6}$ , folosind o baza cu  $N_{br} = 32, N_{bz} = 32$  componente. Functiile de unda au fost obtinute pentru un numar  $N_E = 500$  energii in intervalul  $[E_{\perp}^{00}, E_F]$ . Asa cum era de asteptat, regiunea intrinseca introduce o bariera in energia potentiala a firului omogen dopat  $n++$ . Se poate observa ca, pentru ambele structuri, maximul energiei potentiale ramane sub energia Fermi, ceea ce implica faptul ca nano-firele prezinta o conductie relativ buna. Pentru sistemul cu regiune intrinseca mai mare, bariera este mai inalta, iar densitatea de sarcina electronica in bariera mai scazuta. S-a stabilit ca, prin reducerea numarului de energii utilizate sub valoarea  $N_E = 500$ , procedura self-consistenta nu mai converge in cazul sistemului cu  $L_i = 8nm$ . In general, pentru bariere mai largi, rezonantele de tip Fabry-Perot au timpi de viata mai mari si, de aceea, un grid mai fin in energie este necesar.

Oscilatiile vizibile in ambele marimi self-consistente calculate,  $W_{sc}(r, z)$  si  $n_{sc}(r, z)$ , sunt oscilatii de tip Friedel, care apar din cauza reflexiilor undelor electronice la bariera, in special in cazul electronilor cu energii mici. Pentru a asigura o conexiune lenta intre lead-uri si regiunea de imprastiere, potentialul si sarcina in interiorul regiunii de imprastiere la interfețele cu leadurile sunt fixate la valori egale cu cele din lead-uri. Cele doua regiuni au o dimensiune liniara de 10nm in lungul directiei  $z$ .

### (c) Tranzistor nanofir

In a treia etapa este adaugata poarta cilindrica care infasoara firul. Cu aceasta este introdusa functionalitatea de tranzistor. Pornind de la potentialele self-consistente obtinute la punctul (b) sunt calculate in continuare potentialele corespunzatoare sistemului cu tensiune  $V_g$  aplicata pe poarta.

Asa cum s-a indicat anterior, tranzistorul este in stare ON (conductanta sursa-drena mare) cand nu exista tensiune aplicata pe poarta. Aplicand un potential negativ pe poarta, bariera introdusa de regiunea intrinseca se mareste, iar conductanta scade. Rezultatele sunt indicate in Fig. 5 (stanga), obtinute pentru  $\mathcal{C} < 10^{-3}$ , folosind o baza formata din  $N_{br} = 32, N_{bz} = 64$  elemente. Curbele reprezinta energia potentiala  $W_{sc}$  in directie radiala pentru  $z = 0$ . Pe masura ce  $V_g$  descreste, inaltimea barierei ( $W_{sc}(r)$ ) creste, in special in zonele radial periferice unde actiunea portii devine din ce in ce mai importanta. Sistemul cu regiune intrinseca mai mare ( $L_i = 8nm$ ) releva un mai bun control exercitat de poarta cilindrica, prin faptul ca energia potentiala este mai ridicata in jurul valorii  $r = 0$ . O situatia diferita se regaseste in cazul tranzistorului cu regiune intrinseca mai mica ( $L_i = 4nm$ ), unde campul electric generat de poarta este mai bine ecranat datorita concentratiei mari de

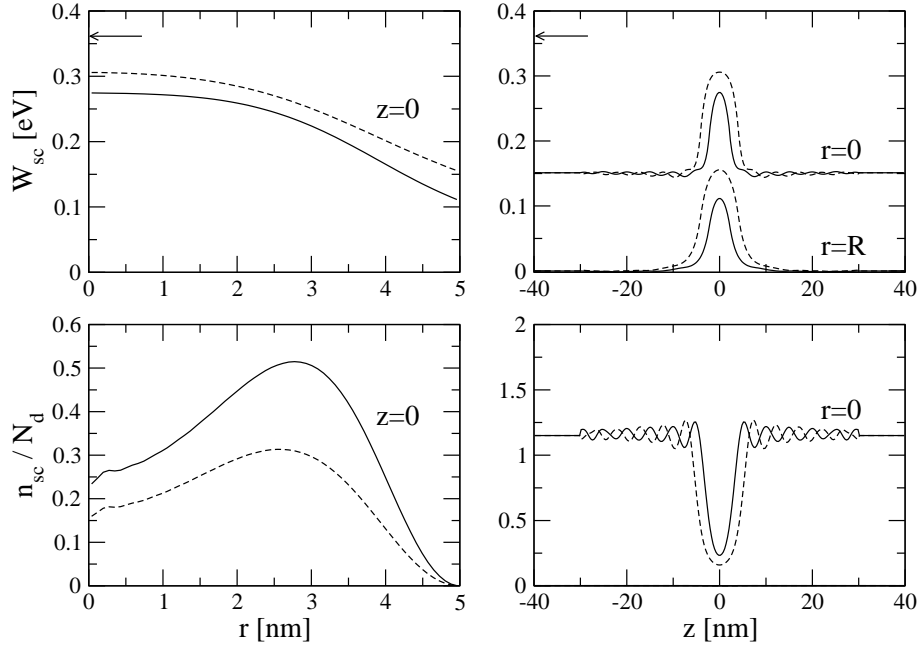


Figure 4: Energia potentiala self-consistentă  $W_{sc}$  (graficele superioare) și densitatea de electroni  $n_{sc}/N_d$  în direcție radială și longitudinală, pentru firul infinit cu regiune intrinsecă de  $4nm$  (linii continue) și  $8nm$  (linii întrerupte). Sagetile marchează poziția nivelului Fermi.

electroni localizați în regiunea intrinsecă.

### 3) Determinarea caracteristicii I-V în limita balistică;

În regim liniar sursă-drenă ( $\Delta V_{SD} \rightarrow 0$ ) se poate defini o conductanță sursă-drenă, care în regim balistic este dată de

$$G_{SD} = \frac{\Delta I_{SD}}{\Delta V_{SD}} = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T_{nm}^{SD}(E_F), \quad (7)$$

pentru  $n, m$  astfel încât  $E_{\perp}^{nm} \leq E_F$ , unde  $T_{nm}^{SD}(E_F) = \sum_{n'} \tilde{T}_{nm,n'm}^{SD}(E_F)$  este transmisia totală sursă-drenă evaluată la energia Fermi pentru modul perpendicular  $(n, m)$ . Pentru un număr cuantic  $m$  fixat, mărimea  $\tilde{T}_{nm,n'm}^{SD}(E)$  reprezintă coeficienții de transmisie între modul  $n$  în sursă și fiecare mod  $n'$  în drenă, calculate cu ajutorul matricii  $S$ .

În Fig. 5 (dreapta) sunt reprezentate comparativ conductanțele sursă-drenă pentru cele două mărimi  $L_i$  ale regiunilor intrinseci. Datele numerice indică faptul că, dacă regiunea intrinsecă este redusă la jumătate,  $G_{SD}$  crește cu 3 ordine de mărime, datorită tunelării sursă-drenă.

Coefficientul de transmisie calculat numeric este sensibil la numărul de componente de bază în direcția  $z$ . De aceea potențialele self-consistente și conductanța au fost calculate mărind numărul de componente de la  $N_{bz} = 64$  la  $N_{bz} = 128$ . Se poate observa că rezultatele obținute cu  $N_{bz} = 64$  sunt relativ precise, în contextul în care mărimea de interes,  $G_{SD}$ , variază mai mult de 6 ordine de mărime. Pentru structura simulată, modul  $m = n = 0$  are cea mai mare contribuție în conductanță, deoarece are cea mai mare energie cinetică de-a lungul axei  $z$  și de aceea probabilitatea cea mai mare de a tunela în drenă. Panta graficelor din Fig. 5 (stanga) reprezintă un indicator important în analiza tranzistorului, prin trecerea din starea de conducție (ON) în starea OFF, fiind un element esențial de urmărit în scalarea nanotranzistorilor.

Regimul neliniar sursă-drenă este analizat pentru structura cu  $L_i = 4nm$ , în vecinătatea zonei de tranziție de la regimul ON ( $V_g = -0.5V$ ) la regimul OFF ( $V_g = -0.7V$ ). Ecuația Poisson este rezolvată cu condițiile la capete  $V^S$  și  $V^D$  pentru sursă și, respectiv drenă, având relația  $V^D = V^S + U_{SD}$  (vezi relația (1-2) în ecuația 1). Cum era de așteptat, panta caracteristicii I-V scade pe măsură ce tensiunea aplicată pe drenă  $U_{SD}$  crește. Mecanismul cuantic de saturare este indicat în lucrarea [G. A. Nemnes et al., J. Appl. Phys., 98, 084308 (2005)]. Întrucât regiunea intrinsecă are o lungime foarte redusă, se observă doar tendința de quasi-saturare a curentului de drenă.

### 4) Implementarea algoritmului 3-dimensional pentru problema de împrăștiere.

Pentru rezolvarea problemei de împrăștiere 3-dimensională este folosită baza ortonormată  $a_{ijk}(r, z, \theta) =$

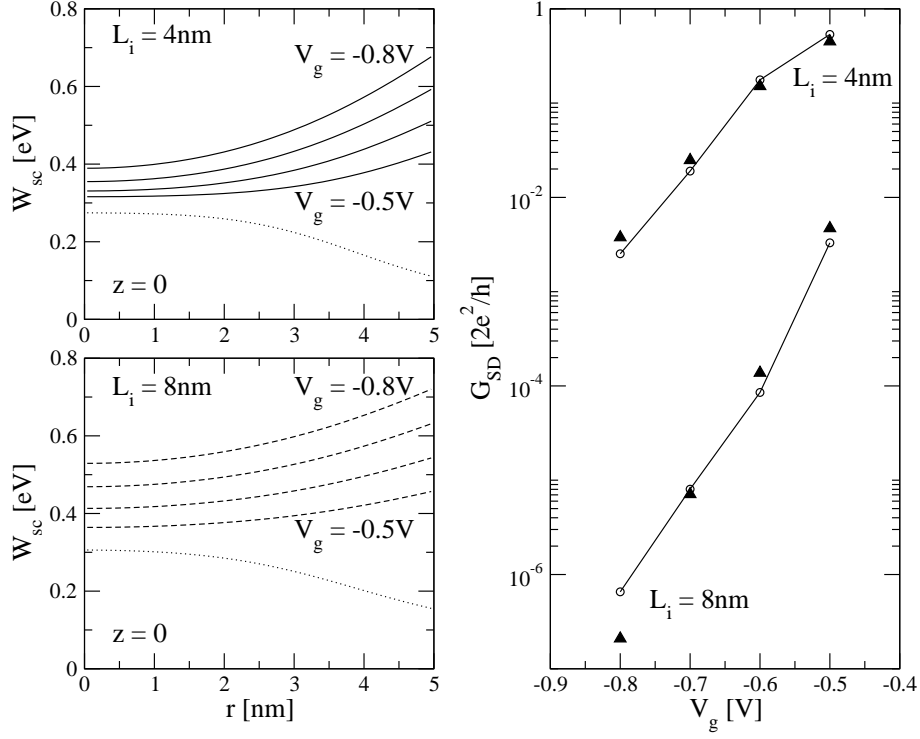


Figure 5: (Stanga) Energia potentiala self-consistenta  $W_{sc}$  in regiunea de imprastiere, pentru tensiuni diferite aplicate pe poarta  $V_g = -0.5\text{V}, -0.6\text{V}, -0.7\text{V}, -0.8\text{V}$  si doua regiuni intrinseci de lungime  $L_i = 4\text{nm}$  (linie continua) si  $8\text{nm}$  (linie intrerupta). Linile punctate corespund potentialelor self-consistente in cazul firelor fara poarta. (Dreapta) Conductanta sursa-drena  $G_{SD}$  pentru  $L_i = 4\text{nm}$  si  $8\text{nm}$ . Triunghiurile reprezinta date obtinute cu o baza mai extinsa,  $N_{bz} = 128$ .

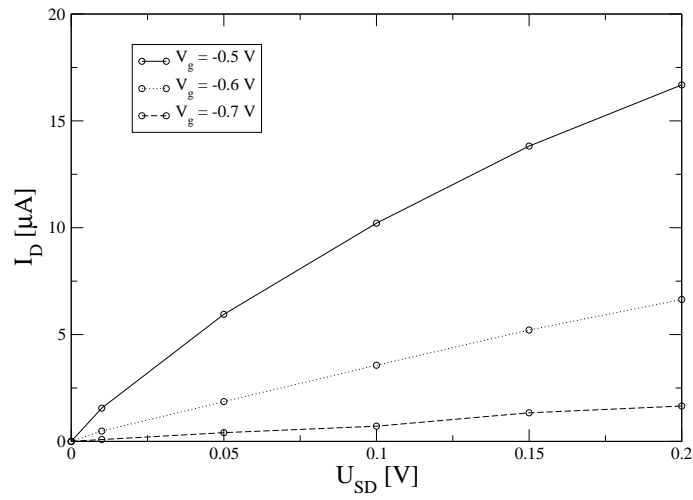


Figure 6: Curentul de drena  $I_D$  vs. tensiunea aplicata pe drena  $U_{SD}$ , pentru diferite valori ale tensiunii de poarta  $V_g$

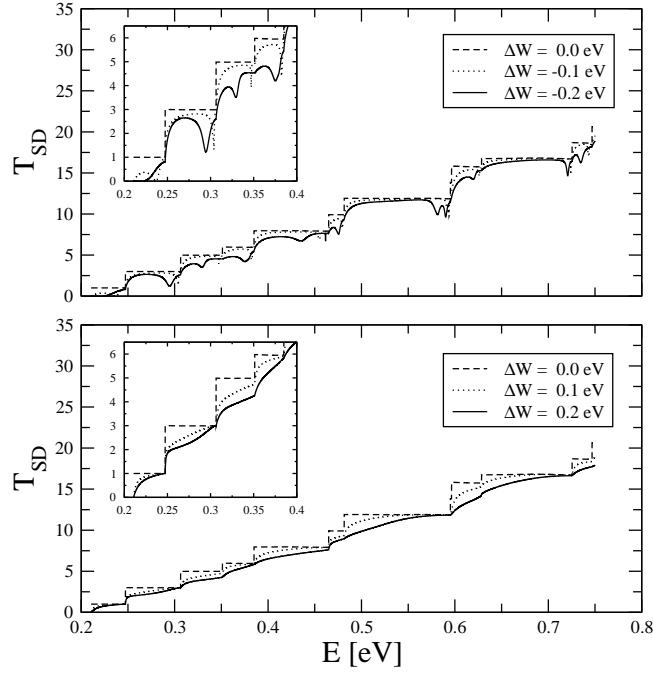


Figure 7: Transmisie sursa-drena vs. energie totala, pentru o concentratie de dopaj  $n++$   $N_d = 10^{20} cm^{-3}$  si diferite potentiale perturbatoare  $\Delta W = \pm 0.1, \pm 0.2 eV$ .  $T_{SD}$  creste in pasi de 1 ( $m = 0$ ) sau 2 ( $|m| \neq 0$ ). Pozitiile treptelor sunt energiile modurilor perpendiculare  $E_{\perp}^{nm}$ . In inset este descrisa in detaliu transmisia primelor moduri.

$u_i(r)v_j(z)w_k(\theta)$ , cu

$$u_i(r) = \frac{\sqrt{2}}{R J_{p+1}(\alpha_{ip})} J_p\left(\alpha_{ip} \frac{r}{R}\right), \quad 1 \leq i \leq N_r \quad (8)$$

$$v_j(z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2Z}}, & j = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{Z}} \cos\left[\frac{j\pi}{2Z}(z+Z)\right], & 1 \leq j \leq N_z \end{cases} \quad (9)$$

$$w_k(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, & k = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(ik\theta), & 1 \leq |k| \leq N_{\theta} \end{cases} \quad (10)$$

$J_p(r)$  este functia Bessel de ordin  $p$ , iar  $\alpha_{ip}$  sunt zerourile functiilor  $J_p(r)$ . In continuare vom lua  $p = 0$ , pentru a asigura o functie de unda nenula pe axa firului. Aceasta baza ortonormata este folosita pentru determinarea functiilor Wigner-Eisenbud, ceea ce la randul lor constituie o baza pentru functiile de unda de imprastiere. Numarul elementelor din baza este  $N_b = N_r \times N_z \times (2N_{\theta} + 1)$ .

O aplicatie pentru problema de imprastiere 3-dimensionala o constituie firul dopat  $n++$  avand o regiune de imputati in exces, care inlatura simetria cilindrica si translationala. Vom presupune ca regiunea cu impuritati are forma sferica. Forma exacta a regiunii nu este esentiala pentru aspectele calitative ce urmeaza a fi discutate. Impuritatile pot fi donori sau acceptori, care introduc mici perturbatii de potential  $\Delta W$  cu semne diferite. In acest model relativ simplu, energia potentiala a firului devine:

$$W(\vec{r}) = \begin{cases} W_{sc}(r) + \Delta W, & \vec{r} \in \mathcal{D}_S \\ W_{sc}(r), & \vec{r} \notin \mathcal{D}_S \end{cases}, \quad (11)$$

unde  $\mathcal{D}_S$  este un domeniu sferic de raza  $R_0$  centrat in  $\vec{r}_0$ .  $W_{sc}(r)$  reprezinta energia potentiala self-consistenta a firului nedeformat.

In Fig. 7 este descrisa transmisia sursa-drena  $T_{SD}$  pentru un nano-fir cu dopare  $N_d = 10^{20} cm^{-3}$ , pentru cele doua tipuri de impuritati, raza domeniului fiind  $R_0 = 2nm$ , plasat la  $|\vec{r}_0| = 2.5nm$  de axa firului. In graficul superior, pentru  $\Delta W < 0$  (defect de tip donor), se observa caderi bruste ale conductantei, inainte de startul fiecarui platou. Aceasta se explica prin faptul ca un mod cu o anumita energie cinetica perpendiculara ajunge intr-o regiune cu energie potentiala mai mica si, deoarece energia totala este conservata acesta se poate imprastia intr-un mod perpendicular superior care corespunde insa unui mod evanescent in cele doua contacte. In graficul inferior, perturbatiile in potential corespund unor regiuni de tip acceptor,  $\Delta W > 0$ , care joaca rolul

unor constrictii in nano-fir. Treptele in transmisie (conductanta) sunt rotunjite, insa dependenta monotona de energie este pastrata.

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 fiecărei 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, corespunzatoare fiecărui numar cuantic  $m$ , catre celelalte noduri disponibile, de tip *worker*.

### Concluzii

Obiectivele (1-4) ale etapei a II-a au fost realizate in totalitate. Algoritmul cu diferente finite de rezolvare a ecuatiei Poisson a fost implementat pentru geometria cilindrica. Utilizand codul de calcul a functiilor de unda de imprastiere realizat in Etapa I, schema de calcul self-consistent a fost implementata. Sunt obtinute astfel potentialul si densitatea de sarcina pentru structuri de tip tranzistor cu poarta cilindrica. Efecte ale ecranarii in sistemele cuatice deschise analizate sunt puse in evidenta. Caracteristica I-V a fost analizata prin intermediul conductantei sursa-drena determinata in regim liniar cu ajutorul functiilor de transmisie. Esta indicata si analizata caracteristica de trecere de la starea ON la starea OFF a tranzistorului. Regimul neliniar sursa-drena a fost analizat, observandu-se o tendinta de quasi-saturatie a curentului de dreana. Codul de calcul al functiilor de imprastiere este ulterior extins la cazul 3-dimensional. Este obtinuta functia de transmisie in structuri cu exces de impuritati, punandu-se in evidenta comportamentul calitativ diferit in cazul impuritatilor de tip donor si, respectiv, acceptor.

### **Rezultatele se regasesc in urmatoarele lucrari ISI publicate:**

- [1] **G.A. Nemnes**, L. Ion, S. Antohe, J. Appl. Phys. 106, 113714 (2009).
- [2] **G.A. Nemnes**, L. Ion, S. Antohe, Physica E 42, 1613 (2010).
- [3] **G.A. Nemnes**, D. V. Anghel, J. Stat. Mech. (accepted 2010), arXiv:1007:4491

### **De asemenea, a fost publicat capitolul de carte:**

- [4] "Ballistic transistors: From planar to cylindrical nanowire transistors", **G.A. Nemnes**, U. Wulf, L. Ion and S. Antohe, Trends in nanophysics, Springer (2010), ISBN 978-3-642-12069-5 (2010);

**Factorul de impact cumulat al publicatiilor este  $\sim 5.9$ .**