

TITLUL PROIECTULUI: TRANZISTOR CILINDRIC NANOMETRIC IN FORMALISMUL LANDAUER-BÜTTIKER

Cod proiect: RP-1 / Septembrie 2008

Durata proiectului: 2 ani

Director: Dr. George-Alexandru NEMNES

Anul 2009

Obiectiv unic: *Obtinerea functiilor de imprastiere pentru potentialul radial simetric al tranzistorului*
Activitati:

- 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 transmisiile si functiile de imprastiere.*

1) Obtinerea dezvoltarii potentialului si a Hamiltonianului pentru problema radial simetrica

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 .

Metoda matricii R presupune spatiul considerat in simulare divizat in doua regiuni: o regiune interna, corespunzatoare regiunii de imprastiere ($r \leq R$ si $-Z \leq z \leq +Z$) si o regiune externa ($r \leq R$ si $z < -Z$, pentru sursa, $z > +Z$, pentru drena), corespunzatoare lead-urilor semi-infinite. Acestea din urma sunt invariante la translatie, iar potentialul perpendicular de confinare determina spectrul discret ce corespunde diferitelor canale pe care electronii se pot propaga in lungul firului. In general, pentru un potential arbitrar in regiunea de imprastiere, electronii vor fi imprastiati de pe un canal pe oricare altul, cu o probabilitate ce se determina cu ajutorul matricii de imprastiere S. Formalismul matricii R introduce o relatie explicita de calcul a matricii S, din care se determina atat coeficientii de transmisie, cat si functiile de unda.

Pentru sistemul considerat, functiile de unda sunt solutii ale ecuatiei Schrödinger stationare

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

unde m^* este masa efectiva. Banda interzisa mare a izolatorului ce inconjoara firul implica cu o buna aproximatie $\Psi(r = R) = 0$. Datorita simetriei la rotatie, avem $W(\vec{r}) = W(r, z)$ iar solutia poate fi scrisa:

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

unde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ este numarul cuantic magnetic. Fiecare index m defineste o problema 2-dimensională in coordonate (r, z) . Folosind metoda separarii variabilelor, se obtine:

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

Pentru calculul matricii R este necesara rezolvarea problemei Wigner-Eisenbud, asociata regiunii de imprastiere. Aceasta este similara ecuatiei (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 exceptia conditiilor la capete impuse la interfata cu lead-urile sursa/drena, 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) in care conditiile la frontiera regiunii de imprastiere (interfetele cu cele doua lead-uri) nu sunt cunoscute *a priori*, acum conditiile impuse pentru problema auxiliara Wigner-Eisenbud sunt cunoscute.

Functiile si energiile Wigner-Eisenbud au fost obtinute numeric, prin diagonalizarea matricii Hamiltonianului folosind baza ortonormata $w_{ij}(r, z) = u_i(r)v_j(z)$:

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

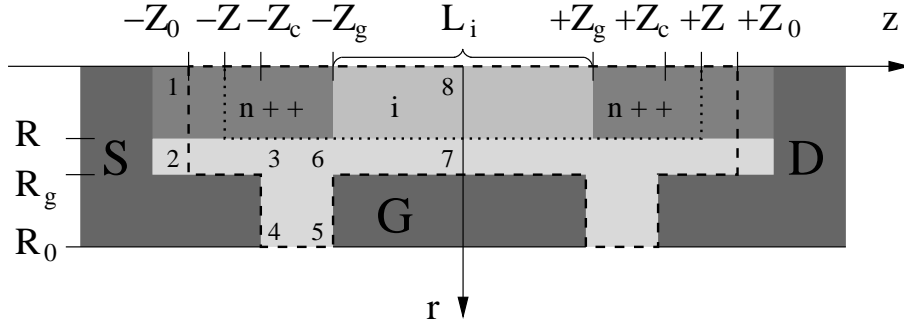


Figure 1: Sectiune in planul (r, z) a structurii radial simetrice, pentru $r \geq 0$. Regiunea de imprastiere ($r \leq R$ and $-Z \leq z \leq +Z$, marcata de linia punctata) cuprinde o parte a semiconductorului dopat $n++$ si regiunea intrinseca. Conditii la limita pentru ecuatia Poisson vor fi aplicate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

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:

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

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:

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

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

Avantajul numeric al acestei abordari devine clar în contextul calculelor self-consistente în care este necesară determinarea matricii S pentru un set larg de energii. Astfel, într-un prim pas, *independent* de energie, se rezolvă problema Wigner-Eisenbud, care reprezintă partea cea mai mare a efortului numeric (diagonalizarea matricii Hamiltonianului). În al doilea pas, matricea R este construită conform relației (8) cu un efort neglijabil pentru fiecare din energiile E considerate, iar matricea S este determinată inversând matricea $[\mathbf{1} - i/m^*\mathbf{R}\mathbf{k}]$, care are o cardinalitate dată de numărul canalelor considerate.

3) Elaborarea codului C/MPI pentru a obține transmisiile și funcțiile de imprastiere

Transmisia totală între două contacte se determină 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 undă k_ν reali).

Considerând potențial constant în lungul celor două *lead*-uri, $W(r, z) = W^{S/D}(r)$ pentru $z < -Z$ și $z > +Z$, funcțiile de undă în *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 particulele care vin dinspre sursa sau dreana (direcția este indicată prin indexul superior 1 sau 2).

Funcțiile de undă în regiunea de imprastiere (SR), pentru particulele ce provin din contactele sursa/dreana se pot scrie în funcție de derivatele lor normale la interfețele cu cele două *lead*-uri. Folosind relația de continuitate la interfețele sursa/dreana și ecuația (12) se obține:

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

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 funcțiilor de undă se poate scrie formal:

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

Anul 2010

Obiectivele etapei a II-a sunt:

- 1) Rezolvarea ecuației Poisson în coordonate cilindrice;
- 2) Obținerea potențialului self-consistent și densitatea de sarcină electronică

pentru problema de imprastiere 2-dimensională; 3) Determinarea caracteristicii I-V în limita balistică; 4) Implementarea algoritmului 3-dimensional pentru problema de imprastiere.

1) Rezolvarea ecuației Poisson în coordonate cilindrice

Ecuația Poisson este rezolvată numeric folosind metoda elementelor finite. Pentru sistemul analizat (Fig. 1) condițiile la capete în semi-planul $z < 0$ sunt mixte (de tip Dirichlet și Neumann), corespunzătoare liniei poligonale numerotate (vezi *J. Appl. Phys.* 106, 113714 (2009)).

Marimea $V^{S/D}(r)$ fixează condiția la capete pentru contactele de sursă și drenă. Acestea sunt date de potențialul radial self-consistent corespunzător unui fir infinit dopat $n++$, care este totodată potențial asimptotic în cele două contacte. Distribuția exactă este dedusă în secțiunea următoare. V_g reprezintă tensiunea aplicată pe poarta, relativ la contactul împământat (sursă).

2) Obținerea potențialului self-consistent și densitatea de sarcină electronică pentru problema de imprastiere 2-dimensională;

Procedura iterativă de rezolvare a sistemului cuplat de ecuații, Schrödinger și Poisson, presupune un mixaj liniar între energia potențială W_{sc} și potențialul electrostatic V dat de ecuația Poisson

$$W_{sc}(r, z) = (1 - f_{mix}) W_{sc}(r, z) + f_{mix} eV(r, z). \quad (16)$$

Parametrul de convergență este definit pentru seturile de puncte \bar{W}_{sc} și \bar{V} :

$$\mathcal{C} = \frac{\|\bar{W}_{sc} - e\bar{V}\|_{\infty}}{\min(\|\bar{W}_{sc}\|_{\infty}, \|e\bar{V}\|_{\infty})}, \quad (17)$$

unde $\|x\|_{\infty} = \sup_n \{|x_n|\}$. Prin această definiție se urmărește limitarea erorii maxime relative în punctele de interes (regiunea de imprastiere).

Pentru a obține potențialul self-consistent și densitatea de sarcină electronică în cazul structurii de tip tranzistor cilindric, s-au desfășurat trei etape:

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

Se consideră un fir infinit cu dopare $n++$ și se calculează potențialul radial self-consistent $V^{S/D}(r)$. Schema de calcul self-consistent are ca punct de pornire alegerea energiei potențiale $W^{S/D}(r) = 0$. Astfel, modurile proprii E_{\perp}^{nm} pot fi determinate. În continuare, la fiecare iteratie, energia Fermi este calculată astfel încât

$$N_d = \frac{2}{\pi R^2} \int_0^{E_F} dE \sum_{n,m} g_{1D}(E - E_{\perp}^{nm}), \quad (18)$$

unde

$$g_{1D}(E) = \frac{m^{*1/2} \mathcal{H}(E - E_{\perp}^{nm})}{\sqrt{2\pi\hbar} \sqrt{E - E_{\perp}^{nm}}} \quad (19)$$

este densitatea de stări 1-dimensională pentru particule cu spin, pentru o direcție a vectorului de undă în direcția z ($k_z > 0$) și $\mathcal{H}(E)$ este distribuția Heaviside. Datorită dopajului puternic, semiconductorul $n++$ este degenerat și benzile generate de impurități se suprapun cu banda de conducție, ceea ce conduce la energii de ionizare mici. De aceea putem presupune că toți donorii semiconductorului degenerat sunt ionizați.

Rezultatele obținute pentru energia potențială self-consistentă, $W^{S/D}(r)$, precum și pentru densitatea de electroni, $n^{S/D}(r)$ sunt prezentate în Fig. 2. Factorul de mixing folosit este $f_{mix} = 0.1$, iar pentru parametrul de convergență s-a impus condiția $\mathcal{C} < 10^{-9}$. Condiția de anulare a funcției de undă la $r = R$ comprimă sarcina negativă în nanofir, introducând un salt în energia potențială de 0.151 eV. Pentru potențialul self-consistent obținut, energia Fermi este $E_F = 0.361eV$. Există numai 5 moduri proprii astfel încât $E_{\perp}^{nm} \leq E_F$. Numărul cuantic azimutal m poate lua valorile 0, ± 1 , ± 2 , ± 3 , în timp ce numărul cuantic n corespunzător direcției radiale are două valori numai pentru $m = 0$. Maximul larg în graficul densității de electroni în jurul valorii $r = 3nm$ este consecința suprapunerii contribuțiilor modurilor cu $m \neq 0$, care sunt similare funcțiilor Bessel corespunzătoare. De aceea este important de remarcat că, deși doparea $n++$ are valori relativ mari, datorită faptului că raza firului este mică, numărul redus de moduri transversale produce un potențial radial neuniform. Aceasta contrastează cu imaginea clasică a contactelor perfect ecranate.

(b) *Fir infinit cu dopare $n++$ și o regiune finită intrinsecă*

În această a doua etapă, este introdusă o regiune finită intrinsecă, de lungime L_i în firul infinit dopat $n++$. Densitatea de sarcină mobilă este construită în aproximația Hartree, folosind funțiile de undă (de imprastiere)

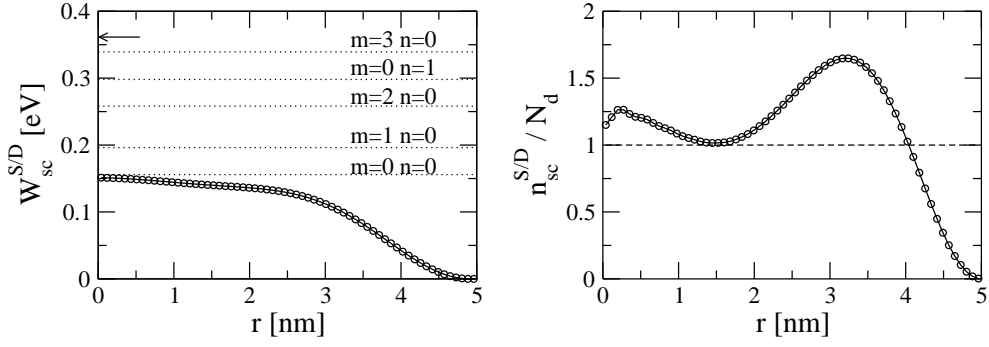


Figure 2: (Stanga) Energia potentiala self-consistentă a firului dopat, infinit. Sageata marcheaza pozitia nivelului Fermi. Linile punctate reprezinta energiile modurilor proprii perpendiculare E_{\perp}^{nm} . (Dreapta) Densitatea de electroni (cercuri) relativ la desitatea de sarcina pozitiva a donatorilor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

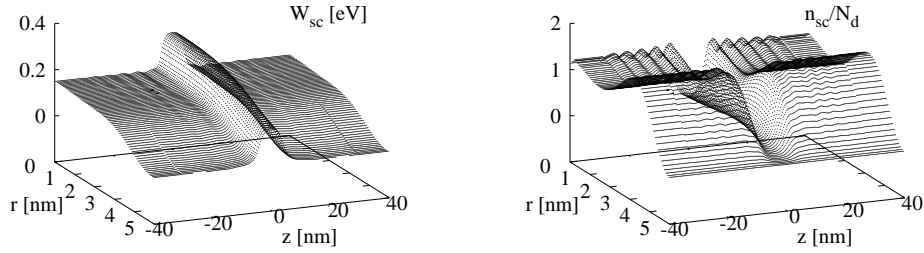


Figure 3: Energia potentiala self-consistentă W_{sc} (stanga) și densitatea de electroni n_{sc}/N_d (dreapta) pentru nano-firul dopat $n++$, având o regiune intrinsecă de lungime $L_i = 8nm$.

ale sistemului cuantic deschis:

$$\rho(r, z) = e \int_0^{E_F} dE \sum_{s,n,m} g_{1D}(E - E_{\perp}^{nm}) \times 2L_z |\Psi_{nm}^{(s)}(r, z; E)|^2. \quad (20)$$

În suma triplă, s ia valorile 1 și 2 pentru sursă și drenă, în timp ce n, m îndeplinesc condiția $E_{\perp}^{nm} \leq E$. Această sumă mai este cunoscută și sub numele de densitate locală de stări.

Grafele în coordonate (r, z) realizate pentru energia potentială $W_{sc}(r, z)$ și densitatea de electroni $n_{sc}(r, z)$ în regiunea de împrăștiere, în cazul unui fir cu lungimea regiunii intrinseci $L_i = 8nm$ sunt descrise în Fig. 3. Câteva secțiuni pentru $r = 0$, $r = R$ and $z = 0$ pentru $L_i = 4nm, 8nm$ sunt prezentate comparativ în Fig. 4. Ambele potențiale self-consistente au fost obținute pentru un parametru de convergență $\mathcal{C} < 10^{-6}$, folosind o bază cu $N_{br} = 32, N_{bz} = 32$ componente. Funcțiile de undă au fost obținute pentru un număr $N_E = 500$ energii în intervalul $[E_{\perp}^{00}, E_F]$. Așa cum era de așteptat, regiunea intrinsecă introduce o barieră în energia potentială a firului omogen dopat $n++$. Se poate observa că, pentru ambele structuri, maximumul energiei potențiale rămâne sub energia Fermi, ceea ce implică faptul că nano-firele prezintă o conductivitate relativ bună. Pentru sistemul cu regiune intrinsecă mai mare, bariera este mai înaltă, iar densitatea de sarcină electronică în bariera este mai scăzută. S-a stabilit că, prin reducerea numărului de energii utilizate sub valoarea $N_E = 500$, procedura self-consistentă nu mai converge în cazul sistemului cu $L_i = 8nm$. În general, pentru bariere mai largi, rezonanțele de tip Fabry-Perot au timpi de viață mai mari și, de aceea, un grid mai fin în energie este necesar.

Oscilațiile vizibile în ambele mărimi self-consistente calculate, $W_{sc}(r, z)$ și $n_{sc}(r, z)$, sunt oscilații de tip Friedel, care apar din cauza reflexiilor undelor electronice la bariera, în special în cazul electronilor cu energii mici. Pentru a asigura o conexiune lentă între lead-uri și regiunea de împrăștiere, potențialul și sarcina în interiorul regiunii de împrăștiere la interfețele cu leadurile sunt fixate la valori egale cu cele din lead-uri. Cele două regiuni au o dimensiune liniară de 10nm în lungul direcției z .

(c) Tranzistor nanofir

În a treia etapă este adăugată poarta cilindrică care înfășoară firul. Cu aceasta este introdusă funcționalitatea de tranzistor. Pornind de la potențialele self-consistente obținute la punctul (b) sunt calculate în continuare

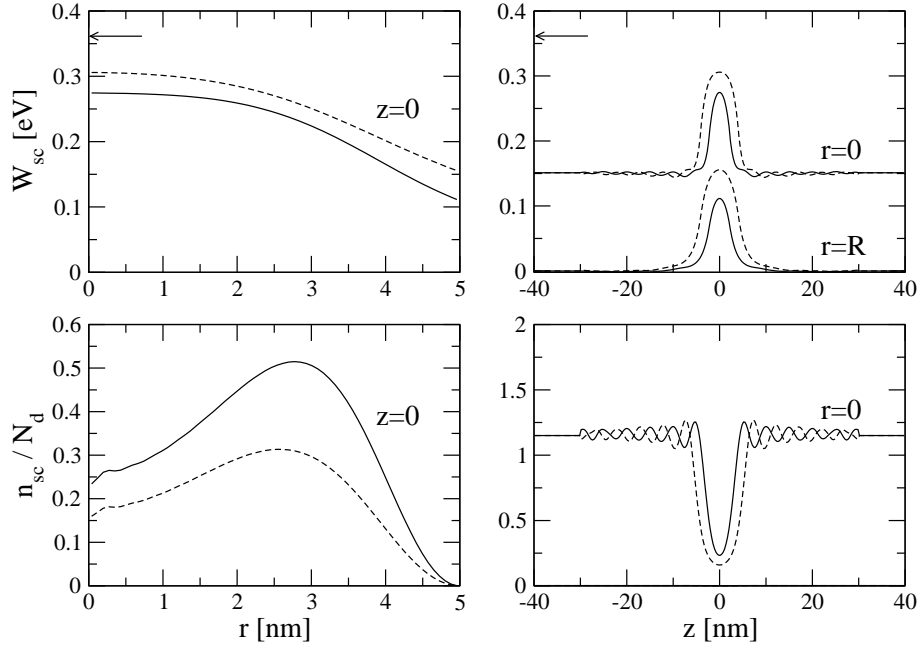


Figure 4: Energia potentiala self-consistentă W_{sc} (graficele superioare) și densitatea de electroni n_{sc}/N_d în direcție radială și longitudinală, pentru firul infinit cu regiune intrinsecă de $4nm$ (linii continue) și $8nm$ (linii întrerupte). Sagetile marchează poziția nivelului Fermi.

potentialele corespunzătoare sistemului cu tensiune V_g aplicată pe poarta.

Asa cum s-a indicat anterior, tranzistorul este în stare ON (conductanța sursa-drena mare) când nu există tensiune aplicată pe poarta. Aplicând un potențial negativ pe poarta, bariera introdusă de regiunea intrinsecă se mărește, iar conductanța scade. Rezultatele sunt indicate în Fig. 5 (stanga), obținute pentru $\mathcal{C} < 10^{-3}$, folosind o bază formată din $N_{br} = 32, N_{bz} = 64$ elemente. Curbele reprezintă energia potențială W_{sc} în direcție radială pentru $z = 0$. Pe măsură ce V_g descrește, înălțimea barierei ($W_{sc}(r)$) crește, în special în zonele radial periferice unde acțiunea porții devine din ce în ce mai importantă. Sistemul cu regiune intrinsecă mai mare ($L_i = 8nm$) releva un mai bun control exercitat de poarta cilindrică, prin faptul că energia potențială este mai ridicată în jurul valorii $r = 0$. O situație diferită se regăsește în cazul tranzistorului cu regiune intrinsecă mai mică ($L_i = 4nm$), unde câmpul electric generat de poarta este mai bine ecranat datorită concentrației mari de electroni localizați în regiunea intrinsecă.

3) Determinarea caracteristicii I-V în limita balistică;

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

$$G_{SD} = \frac{\Delta I_{SD}}{\Delta V_{SD}} = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T_{nm}^{SD}(E_F), \quad (21)$$

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 sursa-drena evaluată la energia Fermi pentru modul perpendicular (n, m) . Pentru un număr cuantic m fixat, marimile $\tilde{T}_{nm,n'm}^{SD}(E)$ reprezintă coeficienții de transmisie între modul n în sursa și fiecare mod n' în drena, calculate cu ajutorul matricii S .

În Fig. 5 sunt reprezentate comparativ conductanțele sursa-drena pentru cele două marimi 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 sursa-drena.

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 mărinde 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 drena. Panta graficelor din Fig. 5 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.

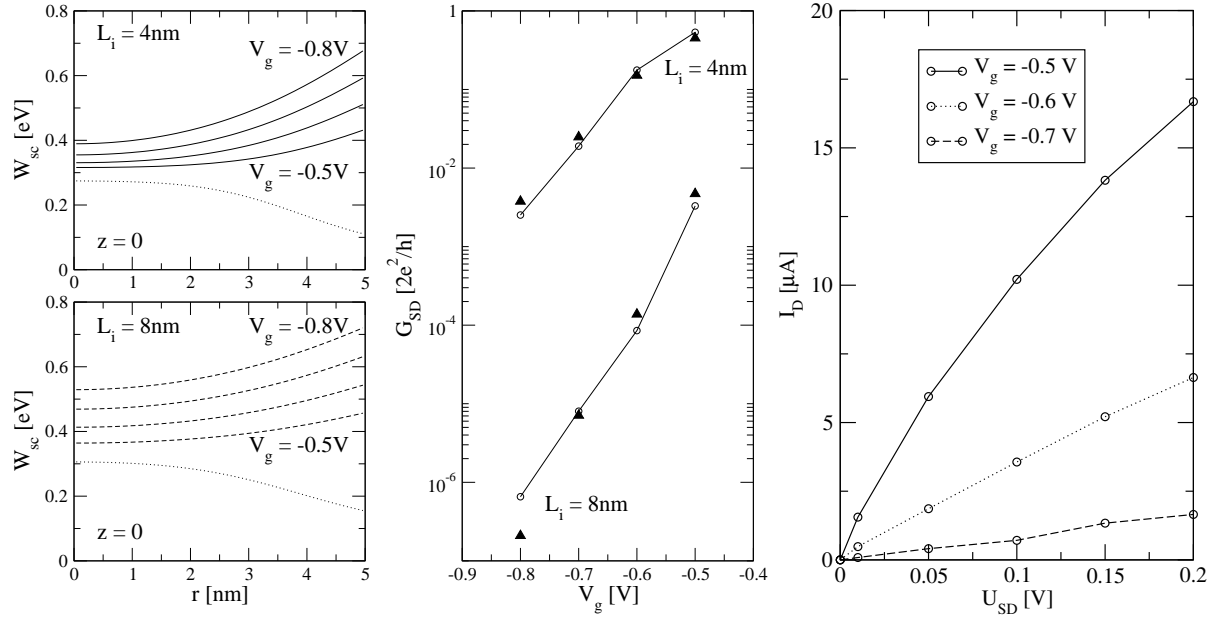


Figure 5: (Stanga) Energia potentiala self-consistenta W_{sc} in regiunea de imprastiere, pentru tensiuni diferite aplicate pe poarta $V_g = -0.5V, -0.6V, -0.7V, -0.8V$ si doua regiuni intrinseci de lungime $L_i = 4nm$ (linie continua) si $8nm$ (linie intrerupta). Liniile punctate corespund potentialelor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

Regimul nelinier sursa-drena este analizat pentru structura cu $L_i = 4nm$, in vecinatatea zonei de tranzitie de la regimul ON ($V_g = -0.5V$) la regimul OFF ($V_g = -0.7V$). Ecuația Poisson este rezolvata cu conditiile la capete V^S si V^D pentru sursa si, respectiv drena, avand relatia $V^D = V^S + U_{SD}$. Cum era de asteptat, panta caracteristicii I-V scade pe masura ce tensiunea aplicata pe drena U_{SD} creste. Mecanismul cuantic de saturatie este indicat in lucrarea [G. A. Nemnes et al., J. Appl. Phys., 98, 084308 (2005)]. Intrucat regiunea intrinseca are o lungime foarte redusa, se observa doar tendinta de quasi-saturare a curentului de drena.

4) Implementarea algoritmului 3-dimensional pentru problema de imprastiere.

Pentru rezolvarea problemei de imprastiere 3-dimensionale este folosita baza ortonormata $a_{ijk}(r, z, \theta) = u_i(r)v_j(z)w_k(\theta)$, cu

$$u_i(r) = \frac{\sqrt{2}}{RJ_{p+1}(\alpha_{ip})} J_p\left(\alpha_{ip} \frac{r}{R}\right), \quad 1 \leq i \leq N_r \quad (22)$$

$$v_j(z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2Z}}, & j = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{Z}} \cos\left[\frac{j\pi}{2Z}(z+Z)\right], & 1 \leq j \leq N_z \end{cases} \quad (23)$$

$$w_k(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, & k = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(ik\theta), & 1 \leq |k| \leq N_\theta \end{cases} \quad (24)$$

$J_p(r)$ este functia Bessel de ordin p , iar α_{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-dimensională 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 ΔW cu semne diferite. In acest model relativ simplu, energia potentiala a firului devine:

$$W(\vec{r}) = \begin{cases} W_{sc}(r) + \Delta W, & \vec{r} \in \mathcal{D}_S \\ W_{sc}(r), & \vec{r} \notin \mathcal{D}_S \end{cases}, \quad (25)$$

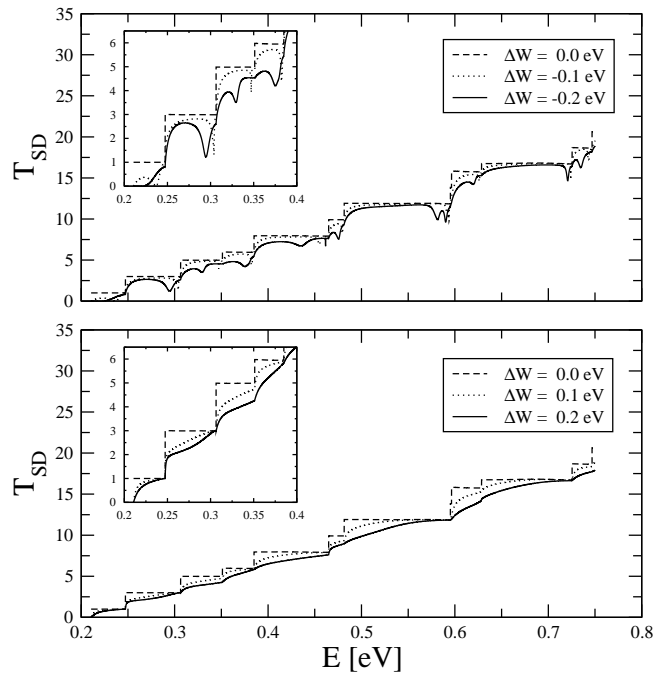


Figure 6: Transmisie sursa-drena vs. energie totala, pentru o concentratie de dopaj $n++$ $N_d = 10^{20} \text{cm}^{-3}$ si diferite potentiale perturbatoare $\Delta W = \pm 0.1, \pm 0.2 \text{eV}$. T_{SD} creste in pasi de 1 ($m = 0$) sau 2 ($|m| \neq 0$). Pozitiile treptelor sunt energiile modurilor perpendiculare $E_{\perp}^{m_1}$. In inset este descrisa in detaliu transmisia primelor moduri.

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. 6 este descrisa transmisia sursa-drena T_{SD} pentru un nano-fir cu dopare $N_d = 10^{20} \text{cm}^{-3}$, pentru cele doua tipuri de impuritati, raza domeniului fiind $R_0 = 2 \text{nm}$, plasat la $|\vec{r}_0| = 2.5 \text{nm}$ 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.

Anul 2011

Obiectiv unic: *Introducerea unei impuritati plasate arbitrar si determinarea modificarilor in caracteristica I-V*

Activitati:

- 1) *Implementarea unui algoritm eficient de calcul a primelor valori proprii in cazul matricilor mari cu multe elemente nule*
- 2) *Caracterizarea modificarilor in caracteristica I-V datorate imprastierii elastice pe impuritate (Fig. 6)*

Rezultatele prezentate in Fig. 6 au fost obtinute folosind $N_r = N_z = 2N_{\theta} = 16$ componente de baza, iar toate cele $16 \times 16 \times 17$ valori proprii calculate au fost incluse in sumarea din ec. (8). Pentru a demonstra ca numai o fractiune din numarul total de valori proprii este necesara pentru a obtine o buna reprezentare a primelor moduri, am adaugat in Fig. 7 (stanga) seturi suplimentare, in care sumarea s-a facut pentru 200, respectiv 400 de valori proprii. Se poate observa ca, desi acestea reprezinta numai 5% si, respectiv, 10% din numarul total de valori proprii calculate, exista inca o buna acuratete a rezultatelor. Folosind algoritmul QR implementat de LAPACK, timpul de diagonalizare este proportional cu N_b^3 (N_b este numarul elementelor din baza).

In continuare se va compara atat acuratetea cat si timpul de calcul, folosind implementarea algoritmului de diagonalizare bazat pe metoda Arnoldi cu restart implicit (IRAM). Sunt calculate primele 400 de valori proprii pentru doua alegeri privind numarul elementelor din baza, $N_b = 16 \times 16 \times 17 = 4352$ si, respectiv, $N_b = 32 \times 32 \times 17 = 17408$. Criteriul de convergenta pentru valorile proprii, tol , care reprezinta acuratetea

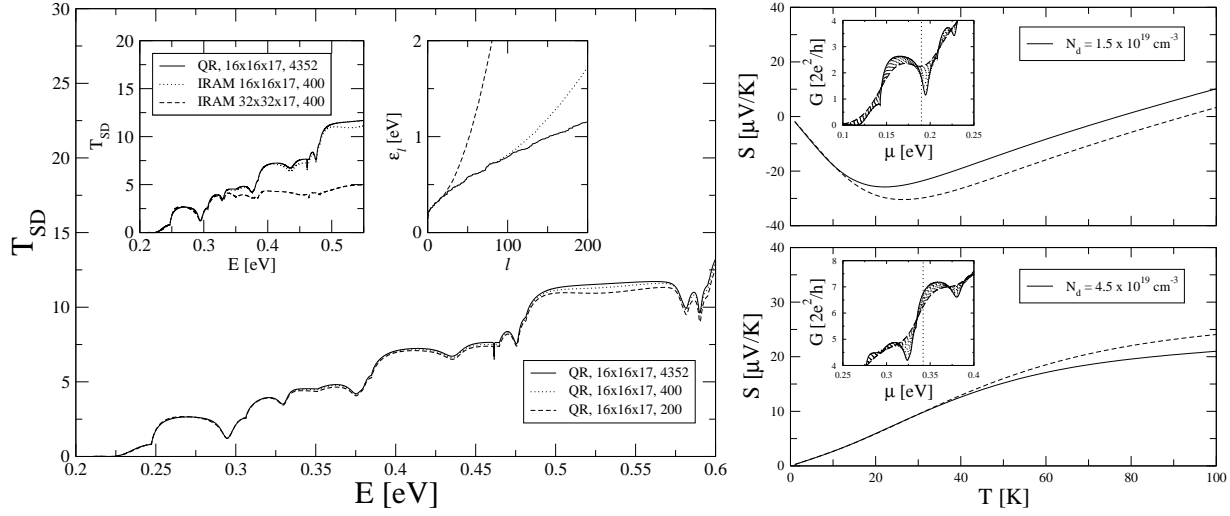


Figure 7: (Stanga) Acuratetea calculului transmisiei sursa-drena. Grafic principal: valorile proprii sunt calculate folosind algoritmul QR, avand $N_b = 4352$ elemente de baza; un numar de 4352, i.e. *toate* (linie continua), 400 (linie punctata) si 200 (linie intrerupta) de valori proprii au fost considerate in sumarea din ec. (8). Inset stanga: primele 400 de valori proprii sunt calculate folosind IRAM, pentru $N_b = 4352$ (linie punctata) and $N_b = 17408$ (linie intrerupta). Inset dreapta: valorile proprii Wigner-Eisenbud ϵ_l vs. index l , corespunzator datelor din insetul stanga. (Dreapta) Coeficient Seebeck vs. temperatura pentru $\Delta W = -0.2eV$, $N_d = 1.5 \times 10^{19} cm^{-3}$ (graficul superior) and $N_d = 4.5 \times 10^{19} cm^{-3}$ (graficul inferior), corespunzator ec. (27) (linie continua) si aproximatia pentru temperaturi joase (28) (linie intrerupta). Inseturile indica variatia conductantei in jurul nivelului Fermi (linie verticala punctata), de la $T = 0K$ (linie continua) la $T = 100K$ (linie intrerupta).

relativa a fost stabilit la 0.001. Astfel, avem $|\lambda_c - \lambda_t| < tol|\lambda_c|$, unde λ_t si λ_c sunt valorile proprii adevarate si, respectiv, cele calculate. Tipic, reducerea valorii tol conduce la sporirea timpului de calcul. Pe de alta parte, fixarea unei valori prea mari conduce la eliminarea unora dintre valorile proprii, in cazul in care acestea sunt apropiate. Se poate vedea din insetul (dreapta) din Fig. 7 (dreapta) ca discrepantele apar in jurul valorilor de $0.75eV$ si $0.4eV$, ceea ce are consecinte in acuratetea transmisiei (insetul stanga). Chiar si pentru cazul in care avem un numar mare de componente de baza, se obtine o buna descriere a primelor 3-4 moduri. Folosind metoda Arnoldi, timpul de calcul este redus de aproximativ 25 de ori, fata de algoritmul standard QR.

Ca o aplicatie, este calculat coeficientul Seebeck in fire cu impuritati. Pentru calculul acestui coeficient, in limita balistica, este necesara functia de transmisie (conductanta). In regim liniar, avem:

$$G(\mu, T) = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \right) T_{SD}(E), \quad (26)$$

$$S(\mu, T) = \frac{1}{eT} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dE \left(\frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \right) (E - \mu) T_{SD}(E)}{\int_{-\infty}^{\infty} dE \left(\frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \right) T_{SD}(E)}, \quad (27)$$

unde f_{FD} este distributia Fermi-Dirac. Folosind dezvoltarea Sommerfeld, expresia (27) devine in limita temperaturilor mici relatia Cutler-Mott:

$$S^{CM}(\mu, T) = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e} \frac{\partial \ln G}{\partial \mu}. \quad (28)$$

Consideram firul cu regiunea de impuritate de tip donor, cu potentialul de perturbatie maxim (in modul), $\Delta W = -0.2eV$. In Fig. 7 este redata dependenta coeficientului Seebeck ca functie de temperatura, pentru doua probe diferite, ce corespund dopajilor $N_d: 1.5 \times 10^{19} cm^{-3}$ ($E_F = 0.190eV$) and $4.5 \times 10^{19} cm^{-3}$ ($E_F = 0.342eV$). Parametrul N_d a fost ales astfel incat nivelul Fermi este situat in regiuni cu conductanta diferentia diferita: negativa pentru prima proba si pozitiva pentru a doua (vezi inset). Semnul coeficientului Seebeck depinde de derivata logaritmului conductantei G , in raport cu potentialul chimic. De aceea, in astfel de cazuri, in care este prezenta conductanta diferentia negativa, modificari mici in dopare pot induce coeficienti Seebeck cu semne diferite. Mai mult, crescand temperatura, se poate observa din Fig. 7 (upper plot) ca $\partial \ln G / \partial \mu$ se mareste si chiar schimba semnul. Astfel, este posibila observarea de coeficienti Seebeck cu semne diferite in aceiasi proba variind temperatura. In graficul inferior, ce corespunde unui dopaj de $4.5 \times 10^{19} cm^{-3}$, panta $\partial \ln G / \partial \mu$ descreste cu cresterea temperaturii, iar coeficientul Seebeck creste subliniar.

Concluzii:

Anul 2009:

Obiectivul unic al acestei etape a fost realizat în totalitate, obținându-se funcțiile de împrăștiere pentru potențialul radial simetric al tranzistorului. În acest scop, au fost obținute elementele de matrice ale Hamiltonianului, matricea S cu ajutorul formalismului matricii R și a fost elaborat codul C/MPI pentru obținerea transmisiilor și funcțiilor de undă.

Anul 2010:

Obiectivele (1-4) ale etapei a II-a au fost realizate în totalitate. Algoritmul cu diferențe finite de rezolvare a ecuației Poisson a fost implementat pentru geometria cilindrică. Utilizând codul de calcul a funcțiilor de undă de împrăștiere realizat în Etapa I, schema de calcul self-consistent a fost implementată. Sunt obținute astfel potențialul și densitatea de sarcină pentru structuri de tip tranzistor cu poarta cilindrică. Efecte ale ecranării în sistemele cuatice deschise analizate sunt puse în evidență. Caracteristica I-V a fost analizată prin intermediul conductanței sursă-drenă determinată în regim liniar cu ajutorul funcțiilor de transmisie. Este indicată și analizată caracteristica de trecere de la starea ON la starea OFF a tranzistorului. Regimul neliniar sursă-drenă a fost analizat, observându-se o tendință de quasi-saturatie a curentului de drenă. Codul de calcul al funcțiilor de împrăștiere este ulterior extins la cazul 3-dimensional. Este obținută funcția de transmisie în structuri cu exces de impurități, punându-se în evidență comportamentul calitativ diferit în cazul impurităților de tip donor și, respectiv, acceptor.

Anul 2011:

Este prezentată o abordare bazată pe metoda Arnoldi pentru determinarea sistemului de valori și vectori proprii, necesar în rezolvarea ecuației Schrödinger cu condiții asimptotice de împrăștiere, în formalismul matricii R . Timpul de calcul este redus semnificativ, în condițiile în care se obține o bună acuratețe în descrierea transmisiei corespunzătoare primelor moduri. Analiza firelor nanostructurate indică comportamente calitativ diferite: în cazul impurităților de tip acceptor, transmisia ideală în trepte este rotunjită, la limită obținându-se o dependență aproximativ liniară; în cazul impurităților de tip donor, minimele obținute în transmisie au drept consecință variația semnului coeficientului Seebeck. Mai mult decât atât, acesta se poate schimba odată cu variația temperaturii.

Obiectivele proiectului au fost realizate în totalitate. Suplimentar, tematica sistemului electronic în interacție în structuri de tip fir a fost abordată și extinsă din perspectiva tehnicilor specifice statisticii fracționare de excludere cât și din perspectiva DFT și a calculelor atomistice.

In cadrul proiectului, au fost publicate următoarele lucrări ISI:

- [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. P09011 (2010), arXiv:1007:4491
- [4] T.L. Mitran, Adela Nicolaev, **G.A. Nemnes**, L. Ion, S. Antohe, Computational Materials Science 50 (2011) pp. 2955-2959.

De asemenea, a fost publicat capitolul de carte:

- [5] "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);

Articol *under review*: **G.A. Nemnes**, C. Visan, S. Antohe, Thermopower of atomic-sized würtzite AlN wires, Physica E (minor revision)

Articol *in preparation*: C. Visan, T.L. Mitran, A. Nicolaev, **G.A. Nemnes**, L. Ion, S. Antohe, Ab initio study of defects and charge transport in AlN nanowires

Numarul de articole ISI prevazut este 2. Numarul de articole ISI realizat este 4. Factorul de impact cumulat al publicatiilor este ~ 7.4 .

Director proiect RP,
George Alexandru NEMNES