



Doctoral Thesis

## Realistic Simulation of Semiconductor Nanostructures

**Author(s):**

May, Christian P.

**Publication Date:**

2009

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-006092601> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No. 18743

# **Realistic Simulation of Semiconductor Nanostructures**

A dissertation submitted to  
ETH ZURICH

for the degree of  
Doctor of Sciences

presented by  
CHRISTIAN P. MAY  
Dipl.-Phys., Univ. Tübingen

born August 25, 1978

citizen of  
Germany

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. Matthias Troyer, examiner  
Prof. Dr. Klaus Ensslin, co-examiner  
Prof. Dr. Thomas Schulthess, co-examiner

2009

# Abstract

There have been several semiconductor quantum dot calculations assuming simplifications such as parabolic confining potentials and a number of self-consistent solutions of coupled Poisson's and Schrödinger's equations in III/V semiconductor nanostructures. However, in particular the depletion mechanism in two-dimensional electron gases (2DEG) caused by local oxidation of the surface of AlGaAs/GaAs heterostructures with an atomic force microscope (AFM) has not been studied thoroughly.

In order to simulate such systems, we have devised and implemented a model that calculates the self-consistent potential and electron densities in the framework of Density Functional Theory in the Local Density Approximation in realistic semiconductor nanostructures. It has been applied and extensively tested against available experimental data for AlGaAs/GaAs heterostructures, which are nanostructured by oxide lines written on top of the semiconductor material by means of local anodic oxidation.

After looking at a toy model, we performed a thorough investigation of a quantum wire fabricated by writing two parallel oxide lines. The simulation data are in reasonable agreement with accessible experimental values. Of all parameters investigated, the oxidation depth turns out to be the most influential parameter. However, also the exact shape of the oxide line as well as the background doping uncertainty contribute to the overall error bounds (in decreasing order). We have consistently included in-plane gates and top gates in our model and obtained results for the scaling of the electronic width with gate voltage which agree with experimental findings.

The insight gained from these simulations has then been applied to a three-dimensional finite-element simulation of a quantum dot yielding data for the electronic dot size and lever arm which are in agreement with experiments. Due to the higher computational demand in this case, local grid refinement was introduced and the program has been designed to scale to many CPUs allowing it to run on supercomputer clusters.

We conclude that an effective mass Local Density Approximation model turns out to reproduce experimental results. Our simulations enable us to point out the critical parameters and rank them by influence, which in turn enables experimentalists to gain better control of their systems.

# Zusammenfassung

Halbleiter-Quantendots ziehen seit langer Zeit großes Interesse auf sich. Es existieren viele Arbeiten, die Vereinfachungen wie parabolische Potentiale annehmen, sowie einige selbstkonsistente Lösungen der gekoppelten Schrödinger- und Poisson-Gleichung. Jedoch wurde im Speziellen der Mechanismus der Verarmung des zweidimensionalen Elektronengases durch lokale Oxidation der Oberfläche von AlGaAs/GaAs-Heterostrukturen mit einem Rasterkraftmikroskop noch nicht eingehend untersucht.

Um solche Systeme zu simulieren, haben wir ein Modell entworfen und implementiert, das das selbstkonsistente Potential und die Elektronendichte im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie in der Lokalen Dichte-Approximation in realistischen Halbleiter-Nanostrukturen berechnet. Dieses wurde dann auf AlGaAs/GaAs-Heterostrukturen angewendet, die durch auf die Oberfläche mit lokaler anodischer Oxidation geschriebene Oxidlinien nanostrukturiert sind, und durch Vergleich mit verfügbaren experimentellen Daten validiert.

Nach Betrachtung eines vereinfachten Modells führten wir eine eingehende Untersuchung eines Quantendrahtes, der durch zwei parallele Oxidlinien hergestellt wurde, durch. Wir stellten eine Übereinstimmung der Ergebnisse dieser Simulationen mit dem Experiment fest und haben die Abhängigkeit der Resultate von verschiedenen nicht hinreichend bekannten Parametern untersucht. Von allen untersuchten Parametern erwies sich die Tiefe der Oxidlinien als entscheidender Faktor, jedoch tragen auch die genaue Form der Oxidlinie und die Hintergrundladung (in dieser Reihenfolge) zum Gesamtfehlerintervall bei. Wir haben ferner Top-Gates und In-Plane-Gates in unser Modell integriert und Ergebnisse für die Skalierung der elektronischen Breite mit Spannungen an diesen Gates erzielt, die mit dem Experiment übereinstimmen.

Die daraus gewonnenen Erkenntnisse wurden dann auf eine dreidimensionale Finite-Elemente-Simulation eines Quantendots angewendet, deren Ergebnisse für die elektronische Dot-Größe und den Hebelarm mit dem Experiment kompatibel sind. Aufgrund der hohen Anforderung an Rechenleistung und Speicherkapazität wurde eine lokale Verfeinerung des Gitters verwendet und das Programm parallelisiert, um auf Höchstleistungsrechnern laufen zu können.

Wir fassen zusammen, daß ein Modell der Effektiven Masse in der Formulierung der Lokalen

Dichteapproximation die experimentellen Daten für die betrachteten Heterostrukturen mit Oxidlinien reproduziert. Unsere Simulationen versetzen uns in die Lage, die kritischen Parameter eines solchen Systems zu identifizieren und deren quantitativen Einfluß auf Meßergebnisse zu bestimmen, was Experimentatoren hilft, eine bessere Kontrolle über ihre Systeme zu bekommen.