



Doctoral Thesis

## **Dissipative quantum transport simulations in two-dimensional semiconductor devices from first principles**

**Author(s):**

Szabó, Áron

**Publication Date:**

2016

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010659234> →

**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. 23465

**Dissipative quantum  
transport simulations in  
two-dimensional  
semiconductor devices from  
first principles**

A thesis submitted to attain the degree of  
DOCTOR of SCIENCES of ETH ZURICH

(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

ÁRON SZABÓ

MSc. in Engineering Physics, Budapest University of  
Technology and Economics

born on April 16th, 1987

citizen of Hungary

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Mathieu Luisier, examiner  
Prof. Dr. Nicola Marzari, co-examiner

2016

# Abstract

In this thesis a simulation framework for efficient and accurate atomic-level treatments of electron transport in the presence of electron-phonon interactions in nanoscale devices is developed. It is based on the non-equilibrium Green's function (NEGF) formalism with every building blocks of the considered systems determined from *ab initio* density-functional theory (DFT) calculations. The strength of this approach is demonstrated through the investigation of transistors made of single- and few-layer semiconductors as well as van der Waals heterostructures.

DFT simulations represent a robust technique in the modeling of nanostructures, but their practical use is restricted to scales below realistic device sizes due to the heavy computational burden associated with them. This limitation is circumvented here by transforming the delocalized crystal electron states into maximally localized Wannier functions (MLWFs) that serve as the basis for the employed NEGF quantum-transport solver. The electron-phonon coupling strengths are also extracted from DFT calculations where the atoms are displaced from their original positions by small numerical values.

The analysis of MoS<sub>2</sub> field-effect transistors (FETs) reveals that the inclusion of electron-phonon scattering in the computational model is essential for transition metal dichalcogenide (TMD) devices, the ballistic approach leading to unphysical negative differential resistance phenomena. It is also found that due to the strong screening effects a double-gate design is required to benefit from the improved carrier mobility in triple-layer MoS<sub>2</sub> compared to a single- or double-layer device. The performance of other TMDs as well as black phosphorus FETs are studied and compared to each other in order to support

the on-going experimental efforts in the pursuit for ultimate high-performance logic devices.

The proposed framework has been extended to simulate heterostructures in addition to homogeneous FET channels. A MoTe<sub>2</sub>-SnS<sub>2</sub> van der Waals heterojunction tunneling transistor is investigated as possible efficient subthermionic low-power switch. The effect of metal contacts on two-dimensional semiconductors is also examined. The thesis provides detailed explanations with step-by-step tutorials on the application of the MLWF technique in transport problems. Such approaches have recently started to gain increasing attention from the device modeling community.

# Zusammenfassung

Diese Arbeit behandelt die Entwicklung einer Rahmenstruktur für die Simulation von effizienten und präzisen Elektronentransport-Verfahren auf atomarer Skala, mit Berücksichtigung von Elektron-Phonon Wechselwirkung. Es basiert auf dem Formalismus der Greenschen Funktion im Ungleichgewicht (Non-Equilibrium Green's Function - NEGF), bei der jede Basiskomponente des betrachteten Systems durch Ab-Initio Dichtefunktionaltheorie (Density Functional Theory - DFT) bestimmt wurde. Die Stärke dieses Ansatzes wird durch die Untersuchung von Transistoren gezeigt, die durch Einzel- bzw. Mehr-Schicht Halbleitermaterialien, sowie van der Waals Heterostrukturen, aufgebaut sind.

DFT Simulationen stellen eine stabile Modellierungstechnik für Nanostrukturen dar, aber ihr praktischer Nutzen ist, durch den hohen Rechenaufwand, limitiert zu Größenordnungen, die kleiner als realistische Strukturen sind. Diese Limitierung kann hier umgangen werden, indem die delokalisierten Kristallelektronenzustände in maximal-lokalisierte Wannier Funktionen (Maximally Localised Wannier Function - MLWF) umgewandelt werden, die als Basis für den eingesetzten NEGF Quanten-Transport Rechner dienen. Die Elektron-Phonon Wechselwirkung wird ebenso der DFT Berechnung entnommen, indem die Atome minimal von ihrer Ausgangsposition verschoben werden.

Die Analyse von  $\text{MoS}_2$  Feldeffekt Transistoren (Field-Effect Transistor - FET) offenbart, dass der Einbezug von Elektron-Phonon Streuung im Rechenmodell für Übergangsmetall-Dichalkogenide (Transition Metal Dichalcogenide - TMD) essentiell ist, da der ballistische Ansatz zu unphysikalischen negativen Differentialwiderständen führt. Durch starke Abschirmeffekte ist auch ein Doppel-Gate Design nötig, um von der verbesserten Ladungsträger-Mobilität in Triple-Schicht

MoS<sub>2</sub> zu profitieren, die es im Gegensatz zu Einzel- oder Doppelschichten besitzt. Die Leistung anderer TMDs, sowie von schwarzen Phosphor-FETs, wird untersucht und miteinander verglichen, um die laufenden Experimente bei der Herstellung von High-Performance Logik-Schaltungen zu unterstützen.

Die vorgeschlagene Rahmenstruktur ist erweitert worden, um Heterostrukturen zusätzlich zu homogenen FET Kanälen zu simulieren. Ein MoTe<sub>2</sub>-SnS<sub>2</sub> van der Waals Heteroübergang-Tunneltransistor wird als möglicher effizienter sub-thermionischer Kleinleistungsschalter untersucht. Der Effekt der Metallkontakte in zweidimensionalen Halbleitern wird ebenso betrachtet. Die Arbeit liefert detaillierte Erklärungen mit schrittweiser Anleitung zur Anwendung der MLWF Technik bei Transportproblemen. Solche Ansätze erlangen unlängst erhöhtes Interesse der Modellierungsgesellschaft.