

DISS. ETH NO. 23881

Large-Scale Nanoelectronic Device Simulation from First Principles

A thesis submitted to attain the degree of
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

Mohammad Hossein **BANI-HASHEMIAN**

M.Sc. in Computational Science, Uppsala University

M.Sc. in Mathematics, Uppsala University

born on 19.05.1981

citizen of Iran

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Joost **VANDEVONDELE**, examiner

Prof. Dr. Mathieu **LUISIER**, co-examiner

Prof. Dr. Stefan **GOEDECKER**, co-examiner

2016

Abstract

Due to the technological challenges associated with manufacturing nanoelectronic devices at atomic level and in order to avoid time-consuming and expensive experimental trials, utilizing computer-aided design and atomistic simulation tools is inevitable. Free from system-specific empirical parameterizations, density functional theory (DFT)-based quantum transport approaches can rigorously model the charge transport mechanism across nanometer-sized devices taking into account the material properties of the simulated structure, as well as the quantum mechanical effects that influence the device operation at atomic-scale. Through integrating the first-principles simulation package, CP2K, and the quantum transport simulator, OMEN, and leveraging their modeling and computational strengths, we have developed an advanced massively parallel device simulator based on DFT and non-equilibrium Green's function (NEGF) methods capable of handling realistically large nanostructures with active regions composed of thousands of atoms. Highly efficient algorithms have been implemented in OMEN for calculating open boundary conditions (OBCs) and solving the transport equations exploiting hybrid computational architectures. To evaluate the electrostatic contribution to the DFT Hamiltonian, constructed by CP2K, the Poisson equation has to be solved subject to boundary conditions specific to nano-transistors. To this end, a plane-wave (Fourier) based algorithm is proposed for solving the generalized Poisson equation with a position-dependent dielectric constant subject to periodic or homogeneous Neumann conditions on the boundaries of the simulation cell and Dirichlet type conditions imposed at arbitrarily-shaped subdomains. For all the boundary setups, consistent ionic forces have been implemented making the Poisson solver applicable to other formalisms like energy-conserving Born-Oppenheimer/Ehrenfest molecular dynamics. The capabilities of the first-principles device simulator presented in this work is demonstrated in applications such as gate-all-around (GAA) Si nanowire field-effect transistors (NWFETs), Si double-gate ultra-thin-body field-effect transistors (DG UTBFETs) and carbon nanotube field-effect transistors (CNT-FETs) all consisting of several thousands of atoms.

Zusammenfassung

Aufgrund der technologischen Herausforderungen im Zusammenhang mit der Herstellung nanoelektronischer Bauelemente auf atomarer Längenskala und um zeitraubende und teure experimentelle Versuche zu vermeiden, ist die Verwendung computergestützter Designs und atomistischer Simulationswerkzeuge unvermeidlich. Dichtefunktionaltheorie (DFT)-basierte Quantentransport Ansätze können den Ladungstransport Mechanismus über nanometer-große Bauelemente rigoros modellieren. Dies geschieht ohne systemspezifische empirische Parametrisierungen, sowohl unter Berücksichtigung der Materialeigenschaften der simulierten Struktur, sowie auch quantenmechanischer Effekte, die den Betrieb eines Bauelements auf atomarer Skala beeinflussen. Durch die Kombination des *ab-initio* Simulationspakets, CP2K, und des Quantentransport Simulators, OMEN, konnten wir die Modelle und rechnerischen Stärken beider Programme vereinen. Dadurch haben wir einen fortschrittlichen massiv parallelen Halbleiterbauelemente-Simulator auf Basis von der DFT und der Methode der Green'schen Funktionen im Nichtgleichgewicht (non-equilibrium Green's function - NEGF) entwickelt, der in der Lage ist, realistisch große Nanostrukturen mit aktiven Bereichen, bestehend aus Tausenden von Atomen, zu verarbeiten. Hocheffiziente Algorithmen wurden in OMEN für die Berechnung der offenen Randbedingungen (Open Boundary Conditions - OBC) und die Lösung der Transportgleichungen implementiert, die hybride Rechnerarchitekturen ausnutzen. Um den elektrostatischen Beitrag zum, von CP2K konstruierten, DFT-Hamiltonian zu bewerten, soll die Poisson-Gleichung mit für Nanotransistoren spezifischen Randbedingungen gelöst werden. Zu diesem Zweck, wird ein ebene Welle (Fourier) basierter Algorithmus zur Lösung der verallgemeinerten Poisson-Gleichung mit positionsabhängiger Dielektrizitätskonstanten unter periodischen oder homogenen Neumann Bedingungen an den Grenzen der Simulationszelle und Dirichlet-ähnlichen Bedingungen in beliebig geformten Unterregionen vorgeschlagen. Für alle Randbedingungen, wurden konsistente ionische Kräfte implementiert, die den Poissonlöser für andere Formalismen, wie energieerhaltende Born-Oppenheimer/Ehrenfestsche Moleküldynamik, anwendbar macht. Die Fähigkeiten des *ab-initio* Halbleiterbauelemente-Simulators werden in einer Reihe von mehreren Tausend Atomen großen Anwendungen demonstriert. Diese Anwendungen umfassen: Gate-all-around (GAA) Si Nanowire-Feldeffekttransistoren (NWFET), Si Doppel-Gate untradünne Körper Feldeffekttransistoren, (DG UTBFET) und Kohlenstoffnanoröhren-Feldeffekttransistoren (CNT-FET).