



Doctoral Thesis

Quantum transport beyond the effective mass approximation

Author(s):

Luisier, Mathieu

Publication Date:

2007

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005340630> →

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. 17016

Quantum Transport Beyond the Effective Mass Approximation

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by
MATHIEU LUISIER
Dipl.-Ing. ETH
born 19 12 1978
citizen of Switzerland

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Wolfgang Fichtner, examiner
Prof. Dr. Mark Lundstrom, co-examiner

2007

Abstract

A three-dimensional full band simulator for nanowire field-effect transistors (FETs) is presented in this thesis. At the nanometer scale the classical drift-diffusion transport theory reaches its limits; quantum transport (QT) phenomena govern the motion of electrons and holes. The development of a QT simulator requires the assembly of several physical models and the choice of appropriate simplifications.

In the first part, the Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) formalism is reviewed, a method extensively used for the description of nanostructures. It is applied to the simulation of a two-dimensional ultra-thin-body (UTB) transistor and of a three-dimensional nanowire FET, both treated within the effective mass approximation (EMA) and in a coupled mode-space. However, the strong quantization effects that characterize structures with dimensions below five nanometers oblige an accurate QT simulator to go beyond the EMA.

The semi-empirical $sp^3d^5s^*$ tight-binding (TB) method is chosen as bandstructure model because (1) it reproduces the complete bulk ($E-k$) relation of a wide range of semiconductor materials, (2) it uses an atomic grid, and (3) its extension to nanostructures is straightforward. The integration of the TB method into a transport code is only possible, if open boundary conditions (OBC) are introduced. The available procedures to apply OBC in a three-dimensional multiband QT simulator are computationally too intensive since they represent a generalized eigenvalue problem or require iterative solvers. Therefore, a new method based on the scattering-boundary approach is developed in this work. It significantly reduces the computational burden associated with the OBC calculation. Furthermore, it can be formulated either in the NEGF or in the Wave Function formalism, and

it works for any channel orientation, material composition, and cross section shape.

Finally, simulations of nanowire FETs are achieved by self-consistently coupling the full-band transport solver to the three-dimensional computation of the electrostatic potential in the device (Poisson's equation). Two different wire types are studied, one with a perfect stoichiometric structure (atoms occupy all the lattice positions) and another with atomic roughness at the semiconductor-oxide interface. Channel orientations along the [100], [110], [111], and [112] axis are considered.

Zusammenfassung

In der vorliegenden Dissertation wird ein Simulator für dreidimensionale Nanowire-Feldeffekt-Transistoren (NW-FETs) präsentiert, der vollständige Bandstrukturen benutzt. Im Längenbereich von wenigen Nanometern stösst die klassische Drift-Diffusions-Transporttheorie an ihre Grenzen. Die Bewegung der Ladungsträger wird wesentlich durch Quantenphänomene bestimmt, so dass eine Beschreibung mittels Quanten-Transport (QT) notwendig wird. Die Entwicklung eines QT-Simulators erfordert die Kombination von verschiedenen physikalischen Modellen und die Wahl geeigneter Vereinfachungen.

Zuerst wird die Methode der Greenschen Funktionen im Nichtgleichgewicht (Non-Equilibrium Green's Functions - NEGF) wiederholend dargestellt, die für ihre breite Anwendung auf Nanostrukturen bekannt ist. Sie wird dann für die Simulation eines zweidimensionalen Ultra-Thin-Body-Transistors und eines dreidimensionalen NW-FETs eingesetzt. Beide Bauelemente werden mittels Effektivmassen-Approximation (EMA) in einem gekoppelten Modenraum behandelt. In Strukturen mit Abmessungen von weniger als fünf Nanometern werden die Quanteneffekte jedoch so stark, dass ein leistungsfähiger QT-Simulator über die EMA hinausgehen muss.

Als Bandstruktur-Modell wird die semi-empirische $sp^3d^5s^*$ Tight-Binding-Methode (TB-Methode) gewählt, da sie (i) die vollständige $E - k$ -Relation von verschiedenen Volumen-Halbleitern reproduziert, (ii) ein Atomgitter verwendet, und (iii) weil ihre Ausdehnung auf Nanostrukturen unkompliziert ist. Die Integration von TB-Bandstrukturen in einem QT-Simulator gelingt nur, wenn offene Randbedingungen (Open Boundary Conditions - OBC) gestellt werden. Bestehende Verfahren, mit denen die OBC in einem dreidimensiona-

len Multiband-QT-Simulator behandelt werden können, sind jedoch zu zeitaufwendig (iterative Löser und verallgemeinerte Eigenwertprobleme). Daher wird in der vorliegenden Arbeit eine neue Methode entwickelt, die auf der Scattering-Boundary-Näherung basiert. Mit dieser Methode wird der Rechenaufwand, der aus den OBC entsteht, entscheidend verringert. Sie kann sowohl im Rahmen der NEGF, als auch in einer Theorie basierend auf Wellenfunktionen, formuliert werden und funktioniert für jede Kanal-Orientierung, für beliebige Materialien und für alle Querschnittsformen.

Im letzten Teil der Arbeit werden selbstkonsistente Simulationen von NW-FETs durchgeführt, indem das Multiband-Transportmodell mit der Berechnung des dreidimensionalen elektrostatischen Bauelementpotentials (Poisson Gleichung) gekoppelt wird. Zwei verschiedene Typen von NW-FETs werden untersucht: (i) mit perfekter stöchiometrischer Struktur (Atome besetzen alle Gitterstellen des geometrisch idealen Quantendrahts) und (ii) mit einer Oberflächen-Rauhigkeit auf atomarer Skala an der Halbleiter-Oxid-Grenzfläche. Es werden Kanal-Orientierungen entlang $[100]$, $[110]$, $[111]$ und $[112]$ betrachtet.