

Diss. ETH No. 13526

Simulation of single-electron devices

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Ph. D.

presented by
ANDREAS SCHOLZE
Dipl. Phys., University of Jena
born June 14, 1969
citizen of Germany

accepted on the recommendation of
Prof. Wolfgang Fichtner, examiner
Prof. Klaus Ensslin, co-examiner

2000

Preface

Devices utilizing the repulsion of additional electrons from tiny metallic or semiconducting islands (Coulomb blockade) in conjunction with correlated tunneling of single electrons from externally controlled reservoirs are called single-electron devices. In contrast to conventional field-effect transistors where switching is accomplished by electrostatically opening a channel and allowing for a macroscopic current to flow, the switching in single-electron transistors (SETs) is based on adding or removing a single electron from a quantum dot, which is the analogue to the channel. As such, single-electron devices represent the ultimate physical limit of miniaturization in electronics which is thought to be reached within the next decades.

This work is concerned with the numerical modeling of single-electron devices. The main focus is on the simulation of the local quantities such as the carrier densities and the electrostatic potential and the terminal characteristics of single-electron transistors.

After giving an introduction into the physics of single-electron devices by means of the so-called orthodox theory, the physical models used for the description of a SET driven in linear response are derived. The distribution functions and the transition rates for a quantum dot in equilibrium with the drain and the source reservoir and the linearization of the corresponding master equation is discussed in detail. The evaluation of the resulting equation for the linear-response conductance requires the calculation of the self-consistent many-body groundstate of a system of quantized electrons within the framework of density-functional theory as well as the calculation of the tunneling rates which are evaluated on the basis of Bardeen's transfer-Hamiltonian formalism. Finally, the numerical methods used for the implementation of a simulation software, especially devised for the simulation of single-electron transistors, are discussed. Nonlinear solvers are of key importance for the proposed simulation approach, and therefore, much space is devoted to the quasi-Newton methods employed to solve the nonlinear Schrödinger/Poisson equation which results from carrier confinement in semiconductor quantum

dots, -wires, and -wells. An introduction into methods for linear-equation solving and eigenvalue problems at finite-difference grids is given.

Besides the focus of this work on basic models and methods for single-electron device simulation, the simulator was employed in a comprehensive study of a GaAs/AlGaAs heterostructure SET. The device was modeled using the realistic layer structure and the exact lateral gate geometry assuming various levels of quantization in the leads, the tunneling barriers and the quantum dot. Despite some discrepancies with the experimental data which are assumed to be due to an oversimplified model for narrow split-gate structures, the main features in the Coulomb-blockade characteristics could be explained on the basis of the self-consistent calculations. In addition to the conductance results, a discussion of the capacitances of the system is given on the basis of preprocessed data from the simulation output. Especially, the problem of a meaningful definition of a quantum dot self-capacitance was studied in more detail.

This work shows that the proposed method provides a physically sound and numerically stable framework for further investigations of single-electron transistors. The software implementation, for which the preliminary name SIMNAD (Simulation and Modeling of Nanodevices) is used, allows for the simulation of a variety of structures including GaAs/AlGaAs heterostructures and silicon SETs. However, for increased predictive capabilities more investigations into various problems including the treatment of narrow split-gate structures on active surfaces or the role of discrete doping centers, for instance, is certainly mandatory.

Einleitung

Bauelemente, die auf der Abstossung von Elektronen von winzigen metallischen oder halbleitenden Inseln (Coulomb-Blockade) in Verbindung mit korreliertem Tunneln einzelner Elektronen von extern kontrollierten Reservoiren basieren, werden Einzelelektronen-Bauelemente genannt. In herkömmlichen Feldeffekt-Transistoren fliesst ein makroskopischer Strom durch das Öffnen eines Kanals. Im Unterschied dazu wird in Einzelelektronen-Bauelementen ein Strom durch die Bewegung von nur einem Elektron zwischen einem Quanten-Punkt, dem Analogon zum Kanal, und der Umgebung erzeugt. Daher stellen Einzelelektronen-Bauelemente einen physikalisch bedingten Endpunkt in der nach wie vor rasant fortschreitenden Miniaturisierung der Elektronik dar. Dieser Punkt wird wahrscheinlich innerhalb der nächsten Jahrzehnte erreicht werden.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der numerischen Modellierung von Einzelelektronen-Bauelementen. Dabei liegt der Schwerpunkt auf der Simulation sowohl lokaler Grössen wie der Ladungsdichten und des elektrostatischen Potentials, als auch der Berechnung der Kennlinien von Einzelelektronen-Transistoren.

Nach einer kurzen Einführung in die Physik von Einzelelektronen-Bauelementen auf der Basis der sogenannten orthodoxen Theorie werden die physikalischen Modelle abgeleitet, die zur Beschreibung von Einzelelektronen-Transistoren verwendet werden. Die Verteilungsfunktionen und die Übergangsraten für einen Quanten-Punkt im Gleichgewicht mit dem *Drain*- und dem *Source*-Reservoir und die Linearisierung der entsprechenden Master-Gleichung werden ausführlich diskutiert. Die Linearisierung der Master-Gleichung führt auf die Leitfähigkeit im Rahmen der Linearen-Antwort-Theorie. Für die Auswertung der entsprechenden Gleichung werden der selbstkonsistente Mehrteilchen-Grundzustand für ein System quantisierter Elektronen auf der Basis der Dichtefunktional-Theorie und die Tunnelraten unter Verwendung der Transfer-Hamiltonian-Methode nach Bardeen berechnet. Schliesslich werden die numerischen Methoden diskutiert, die bei

der Implementierung eines Programms zur Simulation von Einzelelektronen-Transistoren verwendet wurden. Da die nichtlinearen Gleichungslöser von herausragender Bedeutung für den gewählten Simulationsansatz sind, werden Quasi-Newton-Methoden sehr ausführlich behandelt, die bei der Lösung der nichtlinearen Schrödinger/Poisson-Gleichung für Ladungsträger in einsperrenden Potentialen verwendet werden. Eine Einführung in Methoden zur Diskretisierung von linearen Operatoren mit Finiten-Differenzen und der numerischen Behandlung linearer Gleichungssysteme beziehungsweise von Eigenwertproblemen ist gegeben.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Entwicklung von Modellen und Methoden für die Simulation von Einzelelektronen-Bauelementen. Der daraus resultierende Simulator wird auf einen GaAs/AlGaAs Einzelelektronen-Transistor angewendet. Das Bauelement wird auf der Basis der realistischen Schichtstruktur und der exakten *Gate*-Geometrie modelliert, wobei verschiedene Arten von einsperrenden Potentialen sowohl für Quanten-Punkte, -Drähte und -Tröge berücksichtigt werden. Trotz einiger Abweichungen zu den experimentellen Daten, die vermutlich mit den stark vereinfachten Annahmen zusammenhängen, die bei der Behandlung der eng beieinander liegenden *split-gates* gemacht wurden, können die wichtigsten Besonderheiten in der Coulomb-Blockade-Kennlinie auf der Basis der selbstkonsistenten Rechnungen erklärt werden. Zusätzlich zu den Leitfähigkeits-Kennlinien werden die verschiedenen Kapazitäten an Hand der simulierten Daten diskutiert. Insbesondere wird das Problem untersucht, wie eine Quanten-Punkt-Selbstkapazität sinnvoll definiert werden kann.

Diese Arbeit zeigt, dass die vorgeschlagene Methode einen physikalisch korrekten und numerisch stabilen Rahmen für zukünftige Untersuchungen an Einzelelektronen-Transistoren bietet. Die Implementierung, für die der vorläufige Name SIMNAD (*Simulation and Modeling of Nanodevices*) verwendet wird, erlaubt die Simulation einer Vielzahl von Strukturen, einschliesslich von GaAs/AlGaAs Heterostrukturen und Silizium Einzelelektronen-Transistoren. Um eine bessere Übereinstimmung mit experimentellen Daten zu erreichen, müssen allerdings weitere Untersuchungen zu verschiedenen Problemen, wie zum Beispiel der Behandlung eng beieinander liegender Kontakte auf aktiven Oberflächen oder der Rolle diskreter Dotierzentren, vorgenommen werden.