

Diss. ETH No. 15435

Simulation Approaches for Nano-Scale Semiconductor Devices

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Technical Sciences

presented by
FREDERIK OLE HEINZ

Dipl. Phys. ETH
born 11 October 1974
citizen of Germany

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Wolfgang Fichtner, examiner
Prof. Dr. Giuseppe Iannaccone, co-examiner

2004

Abstract

Topic of this dissertation are the development and implementation of a three-dimensional simulation environment for semiconductor nano-electronics devices, that are dominated by quantum effects, and the modelling of the properties of various candidate structures for future ultra-large scale integrated circuits. In this context, Coulomb blockade in the presence of strong quantum confinement, quantum-ballistic transport and the effect of atomistic doping in aggressively scaled semiconductor devices have been studied. The simulation framework presented in this work extends the SIMNAD quantum mechanics simulator developed at the Integrated Systems Laboratory in a previous project and couples it to the standard device simulator DESSIS-ISE.

Basis of the simulation model is an effective mass formulation of density functional theory in local density approximation. In its generalisation to finite temperatures it may be used for the computation of the quantum mechanically correct charge distribution inside the device. Additionally, in conjunction with Bardeen's transfer Hamiltonian method, it may be used to compute tunnelling currents between classically insulated regions (channels, quantum dot) of the device. Doing so requires knowledge of the statistical mechanics of the quantum dot. To make the necessary phase space averages tractable, a Monte-Carlo approach is used.

On the classically conducting regions of the device the drift-diffusion model may be used for current computation. Coupling the device simulator DESSIS-ISE with the SIMNAD quantum mechanics simulator results in a simulation tool capable of modelling devices that feature both classical dissipative currents and 3D quantum effects.

Zusammenfassung

Thema der Dissertation sind Entwicklung und Implementierung einer dreidimensionalen Simulationsumgebung für nanoelektronische Halbleiterbauelemente, deren Eigenschaften von Quanteneffekten dominiert werden, sowie die Simulation verschiedener Halbleiternanostrukturen, die als mögliche Komponenten zukünftiger höchstintegrierter Schaltkreise vorgeschlagen worden sind. In diesem Zusammenhang wurden Untersuchungen über Coulomb-Blockadeeffekte in Bauelementen mit starken Quantisierungseffekten sowie über quantenballistischen Transport und den Einfluß diskreter Dotierung auf die Leitfähigkeit extrem miniaturisierte Halbleiterbauelemente angestellt. Die vorgestellte Simulationsumgebung basiert auf dem Quantenmechaniksimulator SIMNAD, der im Rahmen eines Vorgängerprojektes am Institut für Integrierte Systeme entwickelt wurde. SIMNAD wurde stark erweitert und zur Erhöhung der Flexibilität an den klassischen Bauelementsimulator DESSIS-ISE angekoppelt.

Als Grundlage des entwickelten Simulationsmodells dient eine Effektivmassenformulierung der Dichtefunktionaltheorie in der lokalen Dichtenäherung. In ihrer Verallgemeinerung auf endliche Temperaturen kann diese einerseits dazu verwendet werden, die Ladungsverteilung innerhalb der Halbleiterstruktur quantenmechanisch korrekt zu bestimmen; andererseits können damit in Verbindung mit Bardens Transfer-Hamiltonian-Methode verschiedenen im klassischen Sinne gegeneinander isolierten Bereichen (Quantenpunkte) des Bauelements berechnet werden. Dies erfordert allerdings Kenntnis der statistischen Mechanik des Quantenpunktes. Um die dabei auftretenden Mittelungen über den Phasenraum bewältigen zu können, wurde eine Monte-Carlo Methode verwendet.

Auf den klassisch leitenden Gebieten lassen sich Ströme mittels des Drift–Diffusionsmodells berechnen. Durch Koppelung des quantenmechanischen Simulators SIMNAD an den Bauelementsimulator DESSIS_{-ISE} erhält man ein Simulationswerkzeug, mit dem man sowohl klassische Leitungsströme als auch dreidimensionale Quanteneffekte im selben Bauelement behandeln kann.