

Diss. ETH No. 19132

# Band Structure Effects and Quantum Transport

A dissertation submitted to  
ETH ZURICH

for the degree of  
Dr. sc. ETH Zürich

presented by

ANIELLO ESPOSITO

Dipl. Phys. ETH

born August 06, 1979

citizen of Schlieren ZH, Switzerland

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Wolfgang Fichtner, examiner

Prof. Dr. Giorgio Baccarani, co-examiner

2010

# Abstract

Topic of this thesis is the development and extension of quantum transport simulators for the modeling of nanowire and planar field effect transistors (FETs) at the nanometer scale, as well as the investigation of band structure effects by various atomistic methods in order to improve the effective mass approximation (EMA) used by the present simulators.

The accurate description of strongly scaled nanostructures, with typical dimensions below 5 nm, requires approaches which go beyond the EMA. The empirical tight-binding method (ETB) is widely appreciated since the related computational burden is notably smaller compared to other approaches such as the empirical pseudopotential method (EPM). On the other hand, the EPM yields a more physical picture of the charge density and the related computational burden is still small compared to fully ab-initio approaches. Detailed comparisons between the EMA, ETB, and EPM are carried out for various nanostructures. For this purpose, and for future use within a quantum transport simulator, a fully scalable band structure calculator for bulk, nanowires, and wells based on the EPM is provided. A popular nonparabolicity (NP) model for the improvement of the EMA is adapted for the case of nanowires and quantum wells. The parametrization of the present NP models is accomplished by means of the ETB.

The scattering matrix algorithm (SMA) for the description of quantum transport within the Landauer-Büttiker framework as well

as related numerical issues are thoroughly reviewed. For the description of nanowires with arbitrary cross sectional shapes, the finite element method (FEM) is implemented within the SMA. The parallelization of time consuming routines is accomplished by means of OpenMP and the MPI for the use on large scale compute clusters. Extensive calculations in order to investigate the impact of band structure effects on transfer characteristics of planar and nanowire FETs of various shapes are carried out. For this purpose, the NP models are implemented by means of a spectral method. Furthermore, detailed comparisons with a full-band tight-binding quantum transport simulator are carried out in order to validate the NP models.

Finally, inelastic scattering processes and NP are taken simultaneously into account for the simulation of nanowire FETs.

# Zusammenfassung

In dieser Dissertation werden Transportsimulatoren auf quantenmechanischer Basis entwickelt und erweitert. Sie dienen der Modellierung von Nanowire- und planaren Feld-Effekt-Transistoren (FETs) im Längenbereich von wenigen Nanometern, sowie der Untersuchung von Bandstruktur-Effekten mit verschiedenen Methoden. Letztere verbessern die gängige Effektivmassen-Approximation (EMA), die auch den vorliegenden Simulatoren zu Grunde liegt.

Die genaue Beschreibung der elektronischen Struktur von Bauelementen mit typischen Abmessungen im Bereich von 5 nm erfordert Methoden, die über die EMA hinausgehen. Hier ist die empirische Tight-Binding-Methode (ETB) sehr populär, da der mit ihr verbundene Rechenaufwand erheblich kleiner ist als bei anderen Verfahren, wie z.B. der empirischen Pseudo-Potential-Methode (EPM). Allerdings liefert die EPM eine physikalisch genauere Beschreibung der Ladungsträgerdichte, und der Rechenaufwand bleibt im Vergleich zu ab-initio-Methoden immer noch gering. Detaillierte Vergleiche zwischen EMA, ETB und EPM werden anhand verschiedener Nanostrukturen durchgeführt. Dazu wurde ein vollständig parallelisiertes Bandstruktur-Programm für Bulk, Wires und Wells basierend auf der EPM implementiert, das zukünftig in Transportsimulatoren eingesetzt werden kann. Ein weit verbreitetes Nichtparabolizitätsmodell (NP) zur Verbesserung der EMA wird auf Nanowires und Wells angepasst, wobei die Parametrisierung mithilfe der ETB-Methode erfolgt.

Der Streumatrix-Algorithmus (SMA) zur Beschreibung des Quantentransports im Rahmen des Landauer-Büttiker-Formalismus, sowie damit verbundene numerische Probleme werden tiefer analysiert. Für die Modellierung von Nanowires mit beliebigen Querschnittsflächen wird die Finite-Elemente-Methode im SMA benutzt. Die Parallelisierung von zeitaufwändigen Routinen wird mittels OpenMP und MPI für die Verwendung auf Grossrechnern bewerkstelligt. Umfangreiche Berechnungen von Transfer-Kennlinien verschiedener FETs verdeutlichen den Einfluss der Bandstruktur-Effekte. Dazu wurden die entwickelten NP-Modelle unter Benutzung einer spektralen Methode implementiert. Detaillierte Vergleiche mit einem atomistischen Tight-Binding-Transportsimulator ermöglichen die Validierung der NP-Modelle.

Schliesslich werden gleichzeitig NP-Effekte und inelastische Streuprozesse bei der Simulation von Nanowire FETs berücksichtigt.