

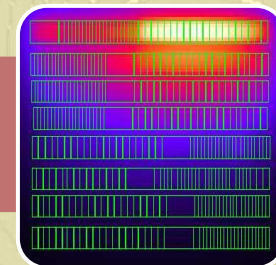
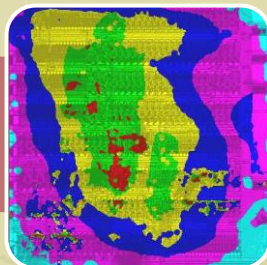
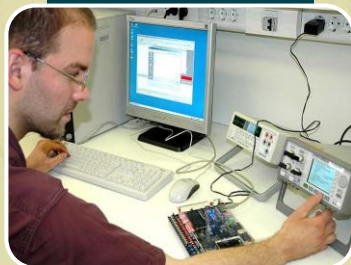
Budapest Műszaki és  
Gazdaságtudományi  
Egyetem

## Elektronikus Eszközök Tanszéke

Nanoelektronika, nanotechnológia  
(VIEEMA00)

Kvantumvölgyes szerkezetek,  
a részecske dinamika elve a szimulációban

Dr. Poppe András



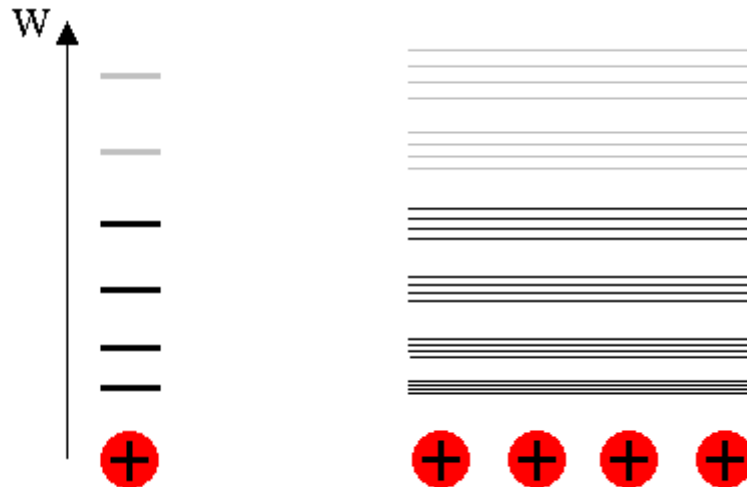
# ELEKTRONOK LOKALIZÁCIÓJA ÉS ENERGIA ÁLLAPOTAI



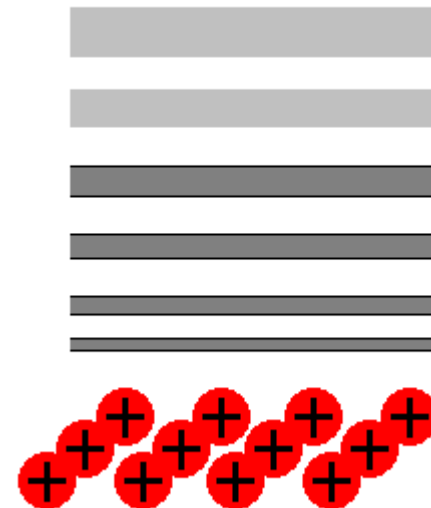
# Energiasávok a kristályos anyagban

## ► Kvantimfizikai ismeretek, pl. Pauli elv

Diszkrét energia szintek:  $N$  db atom –  $N$  darab szintre hasadás:



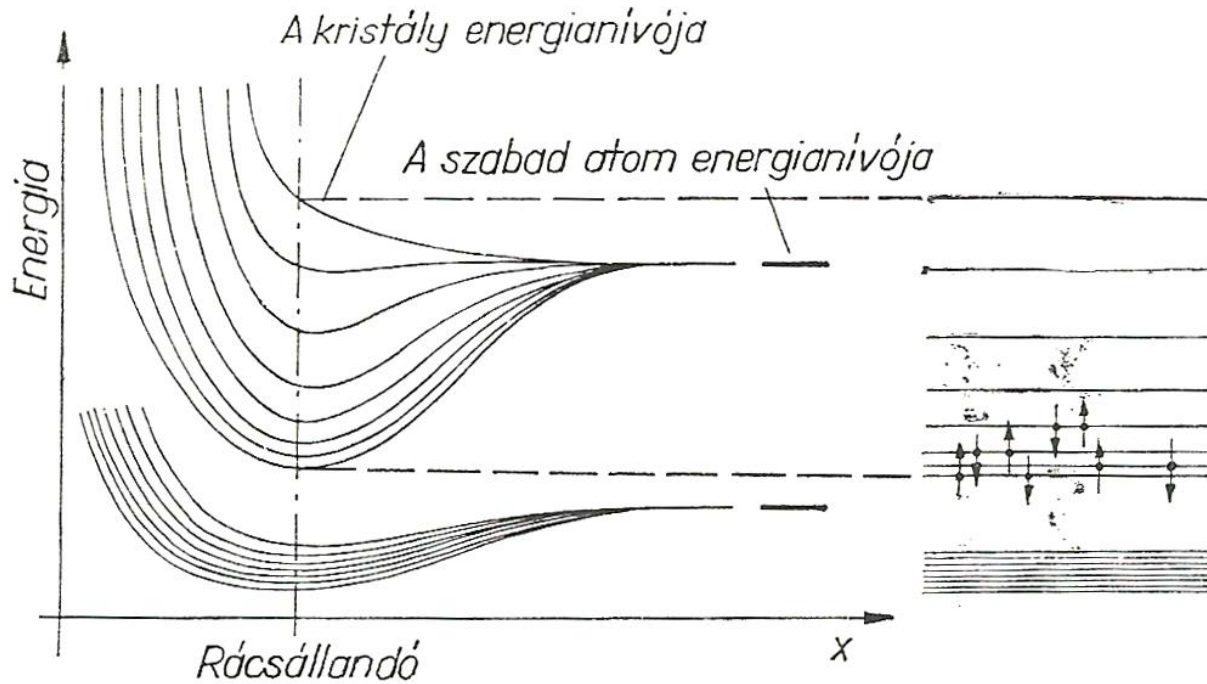
Egykristályban szinte folytonos sávokká hasadnak:



Az egyedülálló atom energiaszintjei a kristályban sávokká (band) szélesednek.

# Energiasávok a kristályos anyagban

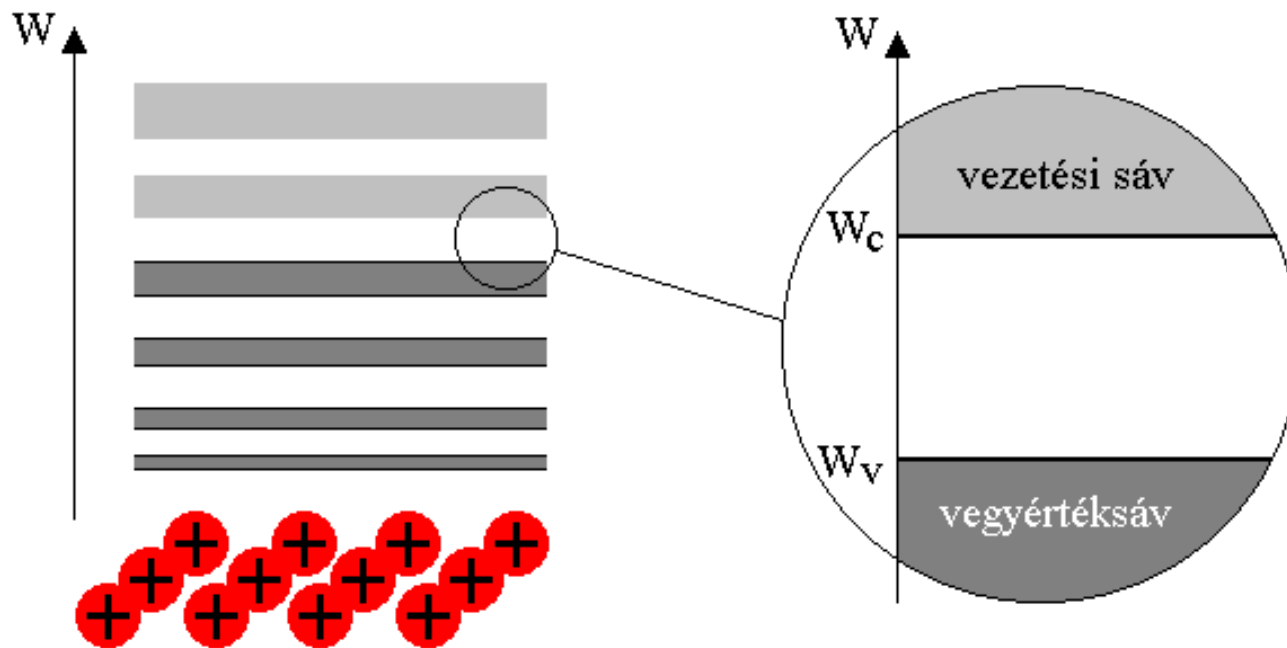
► Simonyi Károly: *Elektronfizika*



3.28 ábra.

Egy atom energianívóinak felhasadása a többi, közelében levő atom hatására. A jobb oldal az energiaszintek helyzetét mutatja a szaggatott vonal mentén

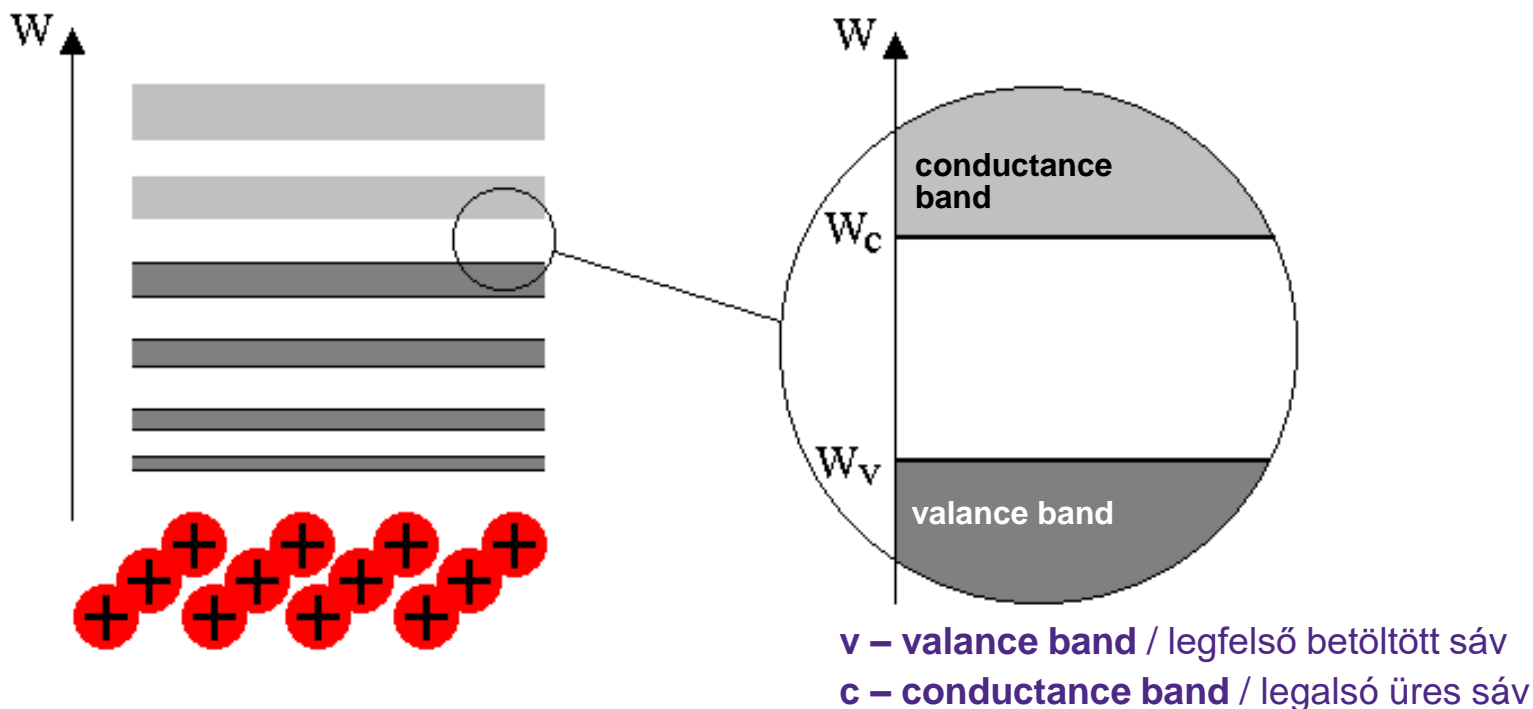
# Vegyérték sáv, vezetési sáv



Áramvezetési szempontból fontos:

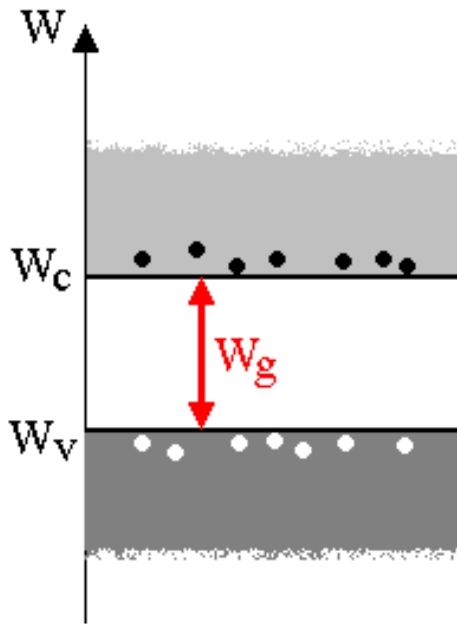
- a legfelső, (majdnem) teli sáv
- a fölötte levő, (majdnem) üres sáv

# Vegyérték sáv, vezetési sáv

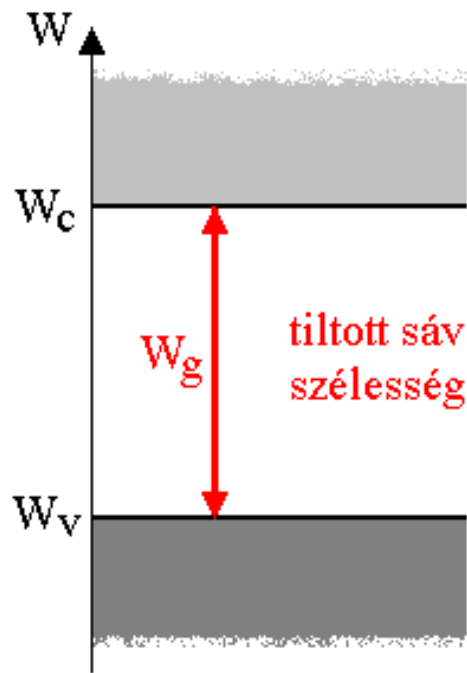


- ▶ Vegyérték sáv – ezek az elektronok hozzák létre a kémiai kötések
  - majdnem tele van
- ▶ Vezetési sáv – ezek az elektronok áramot tudnak vezetni
  - majdnem üres

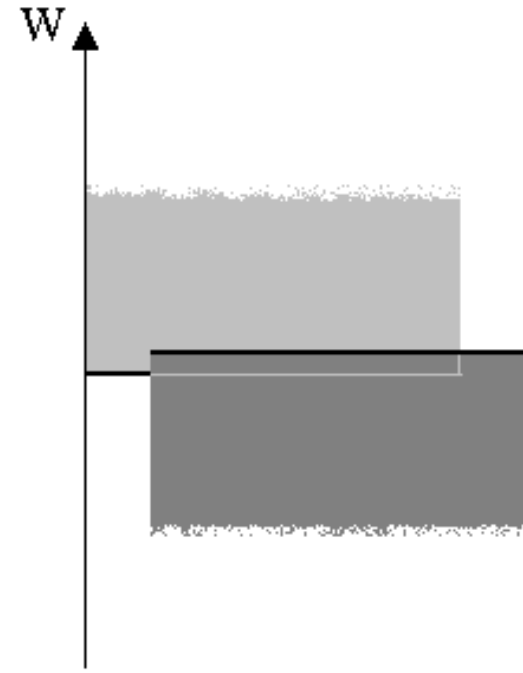
# Vezetők és szigetelők



félvezető



szigetelő



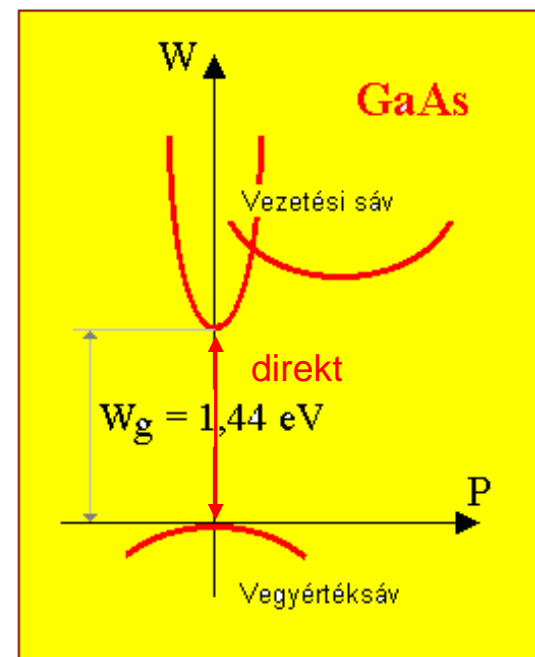
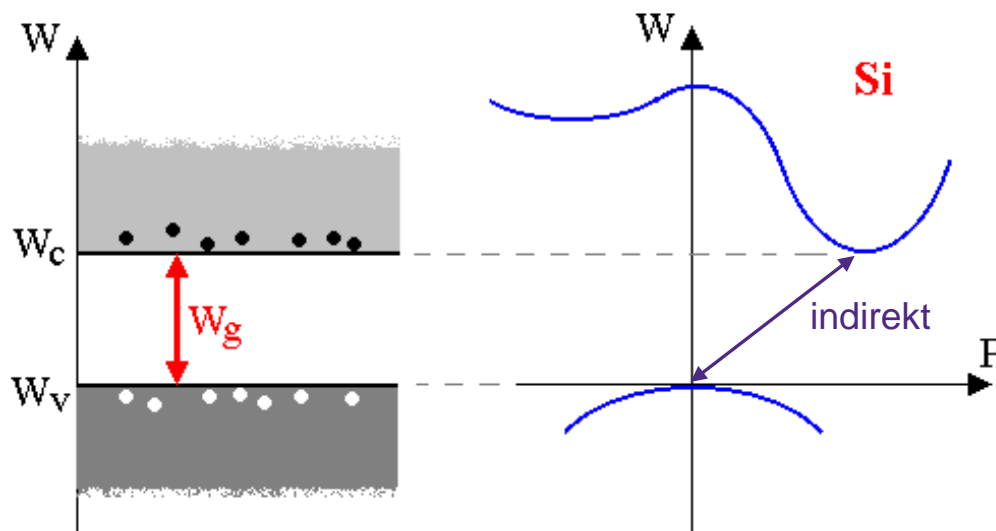
fém

Szilíciumra:  $W_g = 1.12 \text{ eV}$

$\text{SiO}_2$ -ra:  $W_g = 4.3 \text{ eV}$

$$1 \text{ eV} = 0.16 \text{ aJ} = 0.16 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

# Félvezetők sáv szerkezete



$$W = \frac{1}{2m} p^2 \rightarrow W = \frac{1}{2m_{eff}} P^2$$

$$F = \frac{dP}{dt}$$

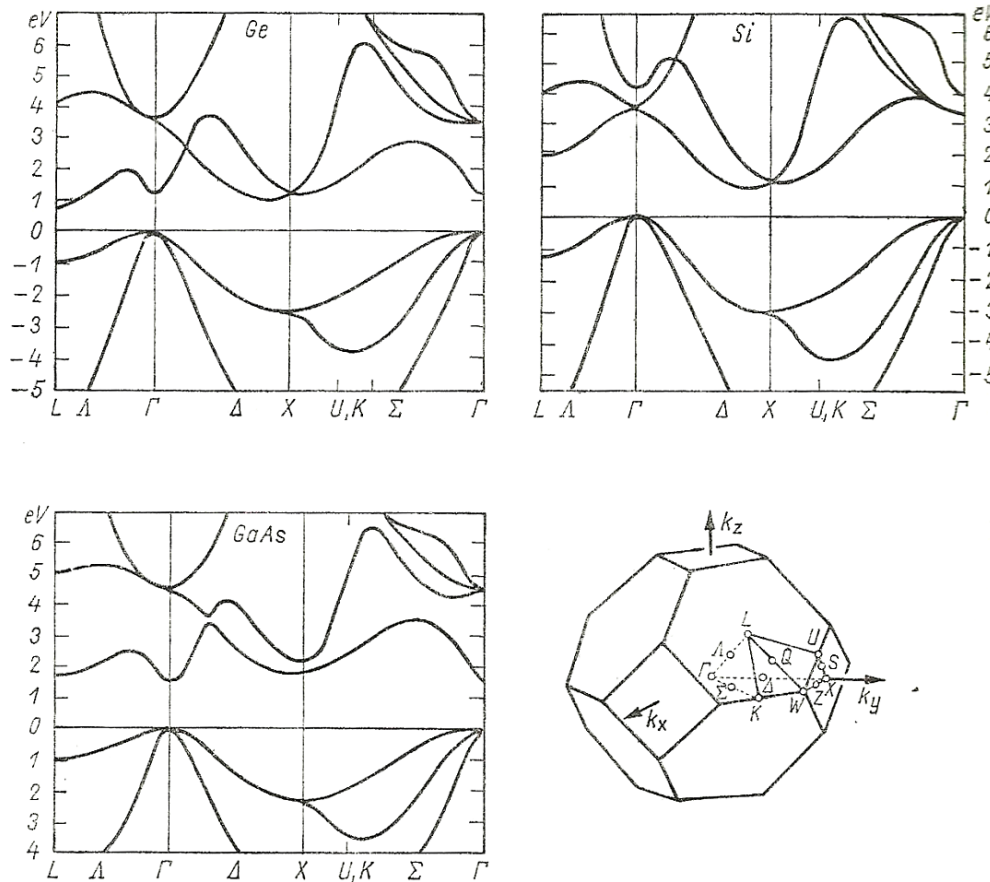
$$P = \frac{h}{2\pi} k$$

GaAs: direkt sáv  $\Rightarrow$  opto-elektronika (pl. LED-ek)  
Si: indirekt sáv



# Valódi sáv szerkezetek

## ► Simonyi Károly: *Elektronfizika*



Brillouin-zóna

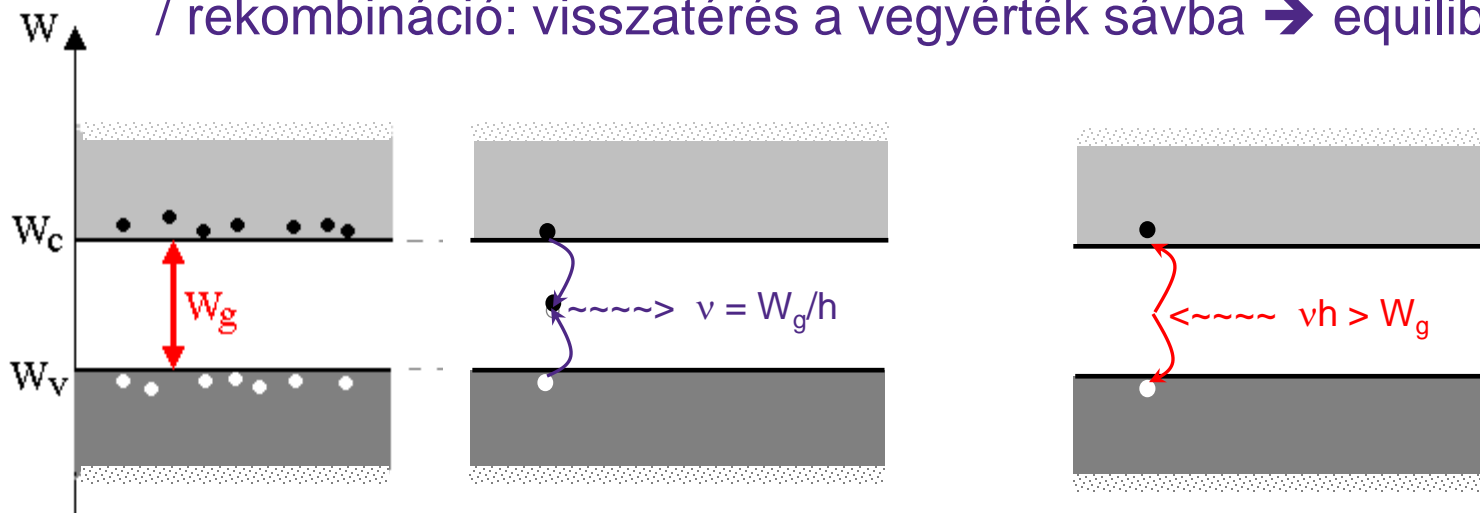
<https://hu.wikipedia.org/wiki/Brillouin-zóna>

3.36 ábra.

A  $W_n = W_n(\mathbf{k})$  kapcsolat gyakorlatilag fontos ábrázolási módja Ge, Si és GaAs esetén. Az első zóna és a fontosabb vonalak láthatók, amelyek mentén a  $W$ -értékeket meghatározták (*Marvin és mások: Phys. Rev. Vol. 141. 789. old.*)

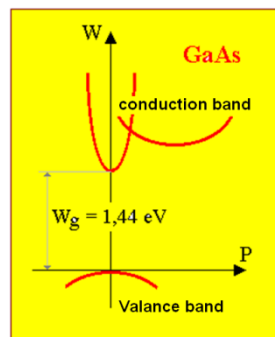
# Generáció / rekombináció

Spontán folyamatok: termikus gerjesztés – ugrás a vezetési sávba / rekombináció: visszatérés a vegyérték sávba → equilibrium

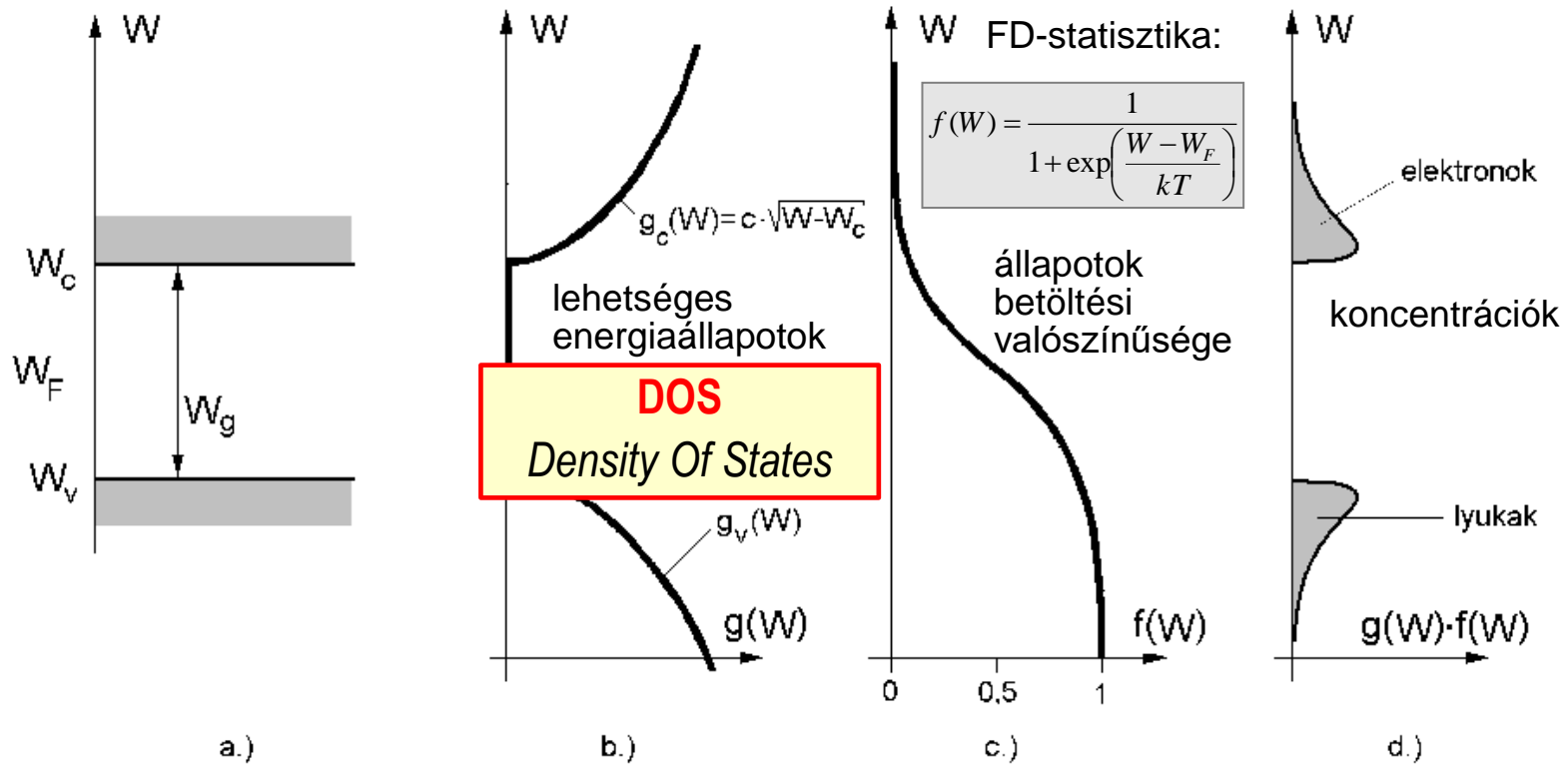


Direkt **rekombináció**  
fényemisszióval jár(hat),  
lásd: **LED-ek**

Fényelnyelés generációt  
okozhat – lásd: **napelemek**



# Hordozókoncentrációk számítása



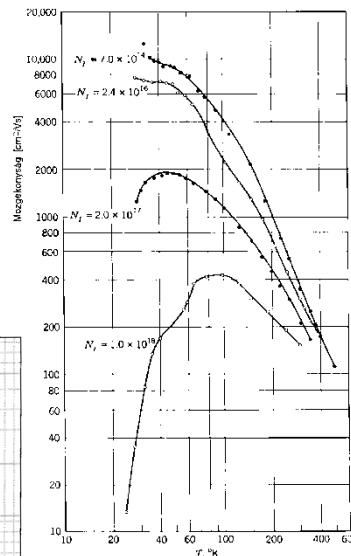
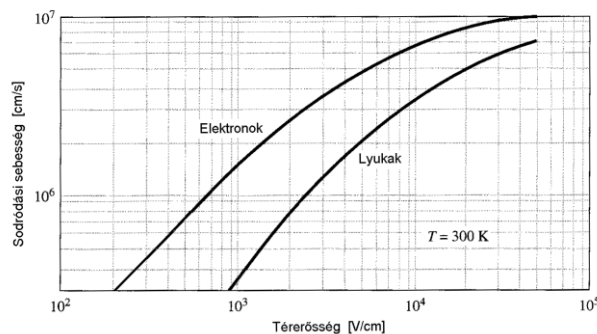
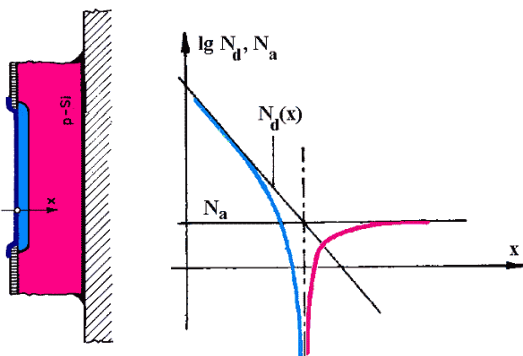
$$n = \int_{W_c}^{\infty} g_c(W) f(W) dW$$

$$p = \int_0^{W_v} g_v(W) [1 - f(W)] dW$$

# Mikor igaz mindez?

## ► Nagy kiterjedésű tér

- Nincs térbeli lokalizáció, tehát beszélhetünk energiasávokról
- Sok mozgásképes töltéshordozó van, tehát van értelme definiálni a következőket:
  - Töltéshordozó koncentráció
  - Töltéshordozók mozgékonyága
- Sok adalék atom van, tehát van értelme definiálni az
  - adalékkoncentrációt / adalékprofil



- A töltés és energiátaszportot jól leírja a drift-diffúziós egyenlet:

$$\overline{J_n} = qn\mu_n \overline{E} + qD_n \overline{\text{grad } n}$$
$$\overline{J_p} = qp\mu_p \overline{E} - qD_p \overline{\text{grad } p}$$

Ehhez még hozzá kellene venni a hőmérséklet-gradiens hatását, mint egy újabb "hajtó erőt"...

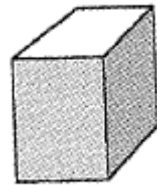
# Mi történik, ha szűk térbe kényszerül egy $e^-$ ?

## ► Lokalizált elektron: mint az atommag körüli elektron

- Diszkrét energia szintek
- A lokalizáció (confinement) milyenségétől függenek a lehetséges energiaállapotok

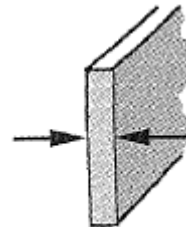
Struktúra

Nagy térrész:  
klasszikus  
viselkedés



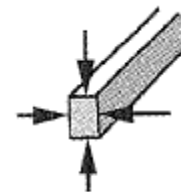
(a)

Kvatumvölgy:  
PI. 2DEG



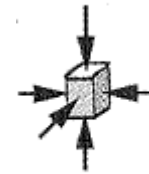
(b)

Kvatumszál:



(c)

Kvatumptöty:

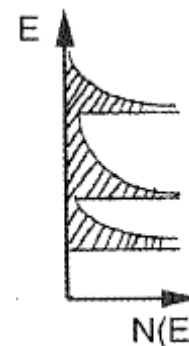
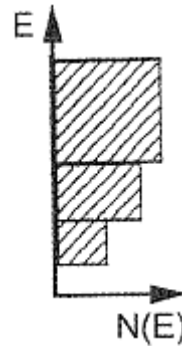
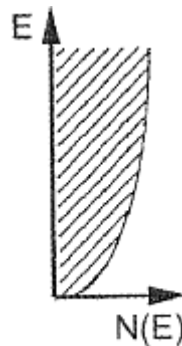


(d)

DOS

Density Of States

(állapotsűrűség fv.)



[http://en.wikipedia.org/wiki/Density\\_of\\_states](http://en.wikipedia.org/wiki/Density_of_states)

Mint az atomban...



# A kis térrész hatása

- ▶ Már akkor is “baj van” a klasszikus, **kontinuum szemlélettel**, ha még beszélhetünk folytonos sávstruktúráról és állapotsűrűség függvényről...
- ▶ Példa:  $1\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$ -es p-Si kocka,  $N_A = 10^{16}/\text{cm}^3$ 
  - $1\ \mu\text{m} = 10^{-4}\ \text{cm} \rightarrow 1\ \mu\text{m}^3 = 10^{-12}/\text{cm}^3 \rightarrow$  adalék atomok száma:  $10^4$
  - Kezd megkérdőjelezhetővé válni a koncentráció / adalék profil / mozgékony fogalma
  - $0.1\ \mu\text{m}$ -os élhosszúság mellett az adalék atomok száma:  $10$  !!
    - Adalékok aktuális eloszlása nagy fluktuációt mutat
    - Koncentrációról nincs is értelme beszélni
    - Ez egyben a többségi töltéshordozók száma is
      - Mozgékonyaságról sincs értelme beszélni
  - **Ismétlés:** mikroelektronikai tervezési aranyszabály: nagy pontosságú alkatrészeket sose tervezünk minimális mérettel...

# A kis térrész hatása

- ▶ Már egy  $1\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$  gate felületű MOS tranzisztor esetében is az inverziós csatornában egyidejűleg megtalálható töltéshordozók száma  $10^3$  nagyságrendű
  - a *drift-diffúziós modell* lényegében érvényét veszti
- ▶ Mit tehetünk?
  - Fizikai eszközszimuláció:
    - ún. *Monte Carlo módszerek*, amelyek figyelembe veszik a *véletlen* hatását...
  - Érvényesek a MOS eszközkarakterisztikák?
    - Szerencsére nagyobb időléptékben a véletlenek kiátlagolódnak, ezért a folytonos egyenleteink továbbra is jó **átlagos** eszközkarakterisztikák, de fontossá válnak pl. a Spice program Monte Carlo analízis opciói (eszközparaméterek szórásának figyelembe vétele)

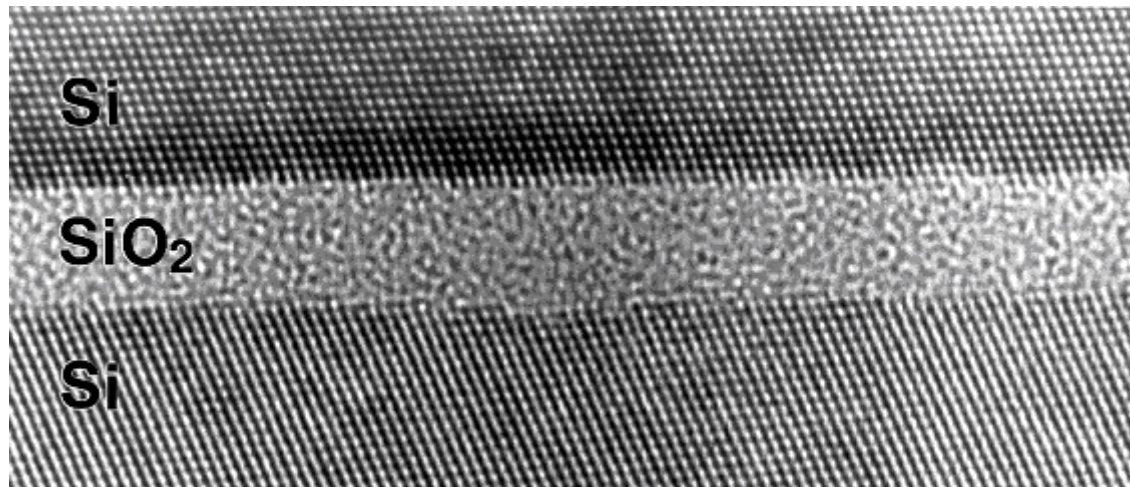


# Kis méretű MOS struktúrák fizikai szimulációja

## ► Megszámlálható sokaságok

- Helyhez kötött töltések (adalékok)
- Töltéshordozók

Kontinuum szemlélet helyett korpuszkuláris (részecske) szemlélet



Megszámlálható atomok egy mikroszkópi felvételen...

Mi lehet egy jó feltétel a kontinuum / korpuszkuláris szemlélet választásához?

Méret  $\approx$  részecske szabad úthossza  $\rightarrow$  korpuszkuláris szemlélet kell



# Kis méretű MOS struktúrák fizikai szimulációja

## ► Speciális szemléletű Monte Carlo szimulációs módszer: *részecske dinamika elvén működő szimuláció*

### ▪ Eredetileg: *molecular dynamics simulation*

- Vegyészet
- Asztrofizika
- ...

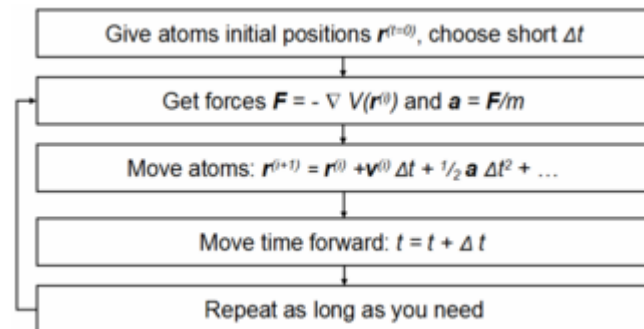
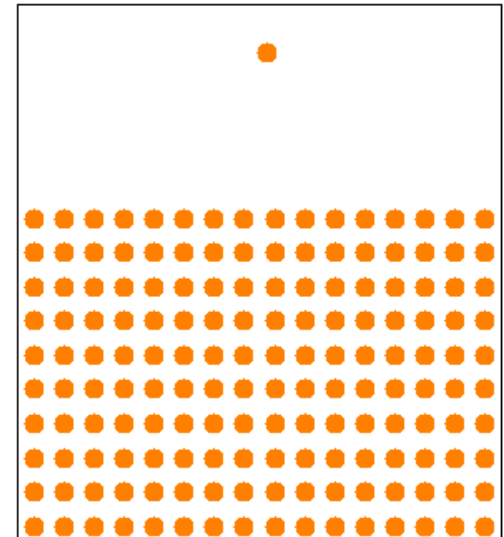
### ▪ Feltételezések:

- Részecskék értelmezhetők  
**tömeg**
- Mozgásegyenletük ismert  
**mozgásegyenlet**
- A rájuk ható erők ismertek  
**erő törvény**

### ▪ Ezek figyelembe vételével részecskék *trajektóriáinak* számítása

Pl.: Egy kristályrács  
atomjainak  
mozgása, ha  
meglőjük azokat

time 0.0041 ps



[http://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_dynamics](http://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_dynamics)

# Kis méretű MOS struktúrák fizikai szimulációja

## ► MOS tranzisztorok csatornájában mozgó elektronokra

- **Tömeg:** a diszperziós reláció szerinti  $m_{\text{eff}}$  **effektív tömeg tenzor**

- **Erők:**

- A külső potenciálok (S, D, G, B) következtében a struktúra belsejében fellépő elektrosztatikus erők

- A Laplace-egyenlet megoldásából

$$\text{div } \mathbf{D} = 0$$

- Elektron-elektron szóródás:

- A Coulomb-törvénnyel számolva

$$\mathbf{E}_{\text{Coulomb}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{j=1}^N \frac{q_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^3}$$

- Elektron-adalékion szóródás

- A Coulomb-törvénnyel számolva

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r})_{\text{Coulomb}} + \mathbf{E}(\mathbf{r})_{\text{External}}$$

- Si-SiO<sub>2</sub> hatása

- Kvantummechanikai hatások érvényre juttatása (2DEG, diszperziós reláció)

- Töltött felületi állapotokon való szóródás (Coulomb-tv.)

- Visszaverődés (irány *megtartása* / *változása* véletlenszerűen)

- Interakció a rácsrezgésekkel (fononokkal): kvantummechanikai alapokon nyugvó heurisztikus modellek

- Impulzus és energia megmaradás betartásával

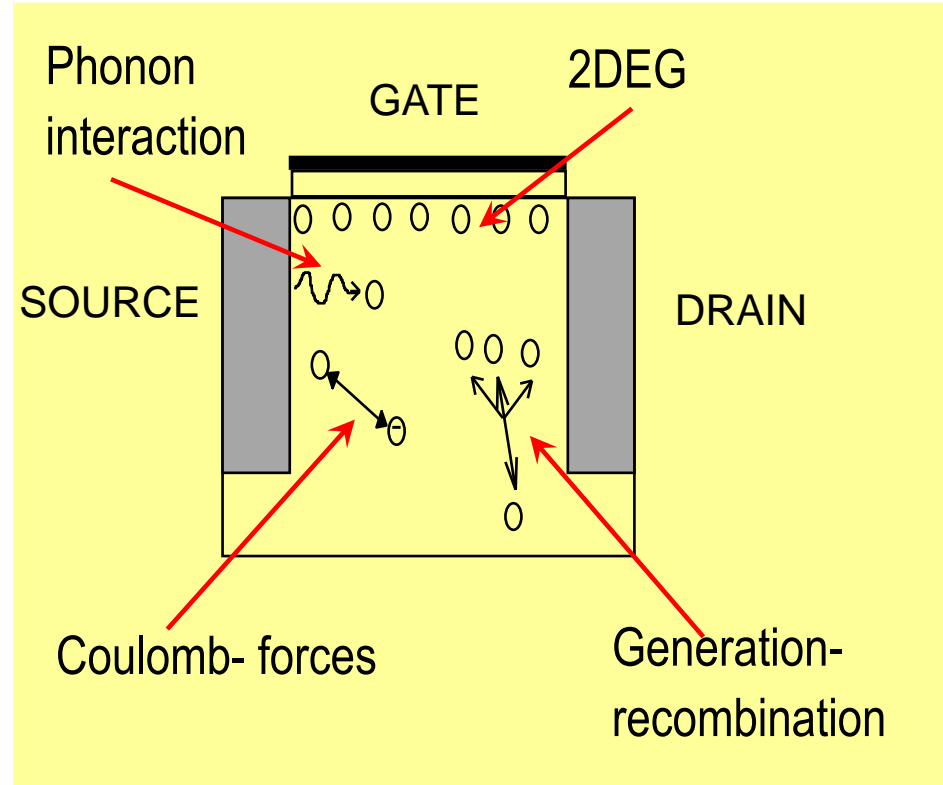
- **Mozgás törvény:** Newton 2. törvénye

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = m_{\text{eff}}(\mathbf{k}_i) q \mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$$

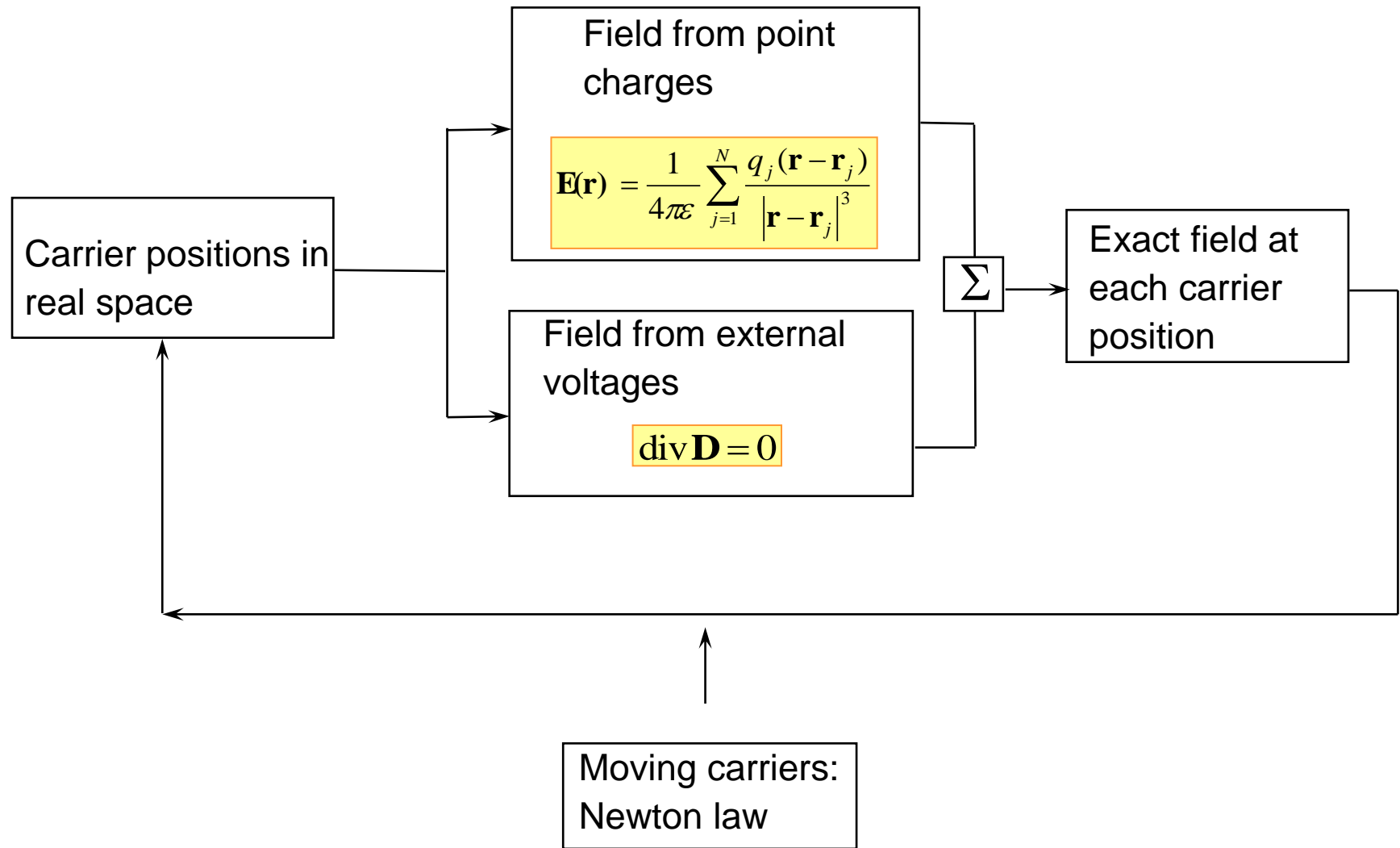
# Kis méretű MOS struktúrák fizikai szimulációja

## ► Egyebek:

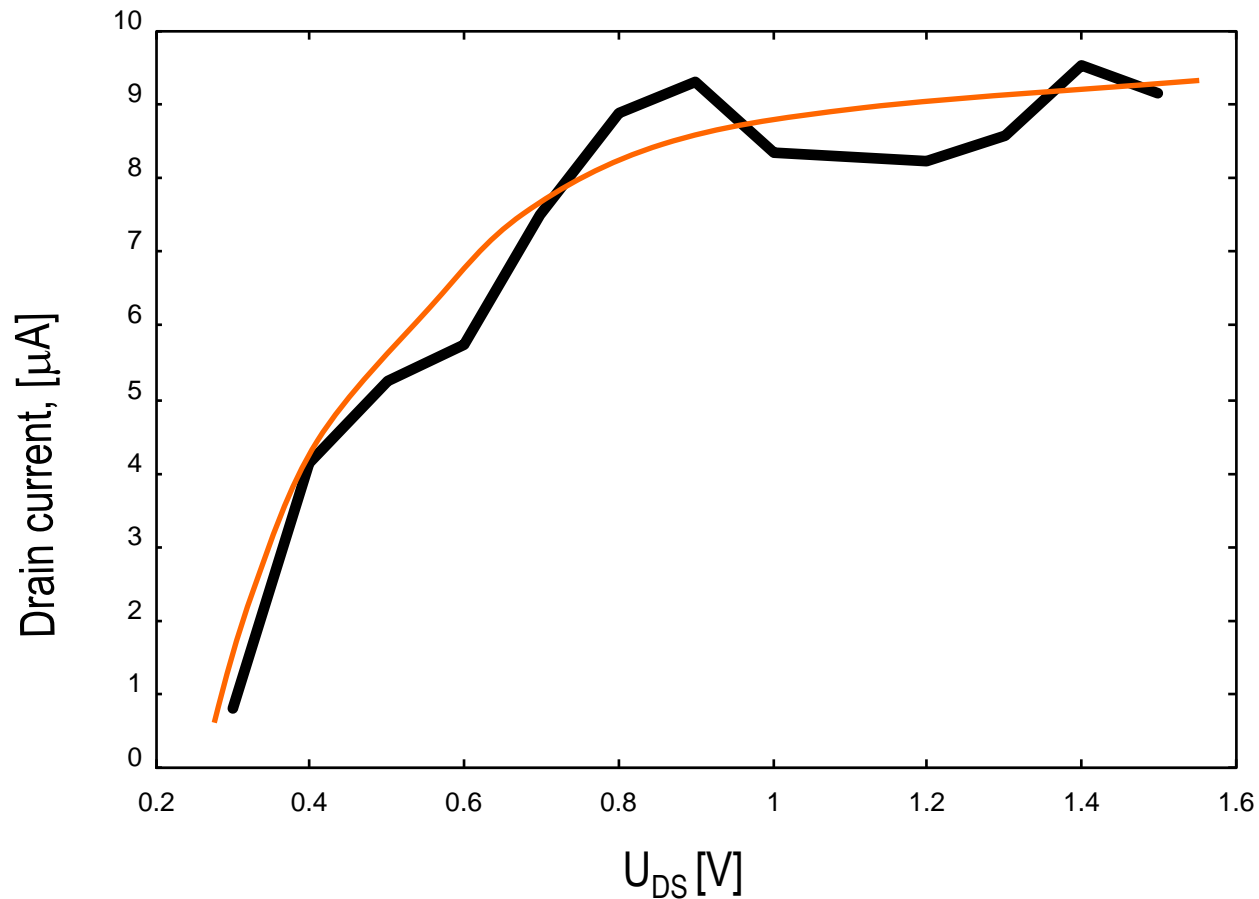
- Generáció-rekombináció modellezése
- Hőterjedés modellezése – most már ez is *nano heat-transfer*
- Elektron injektálása a source-nál, elektron kiléptetése a drain-nél
- Peridokus határfeltétel a rajzra merőleges irányban



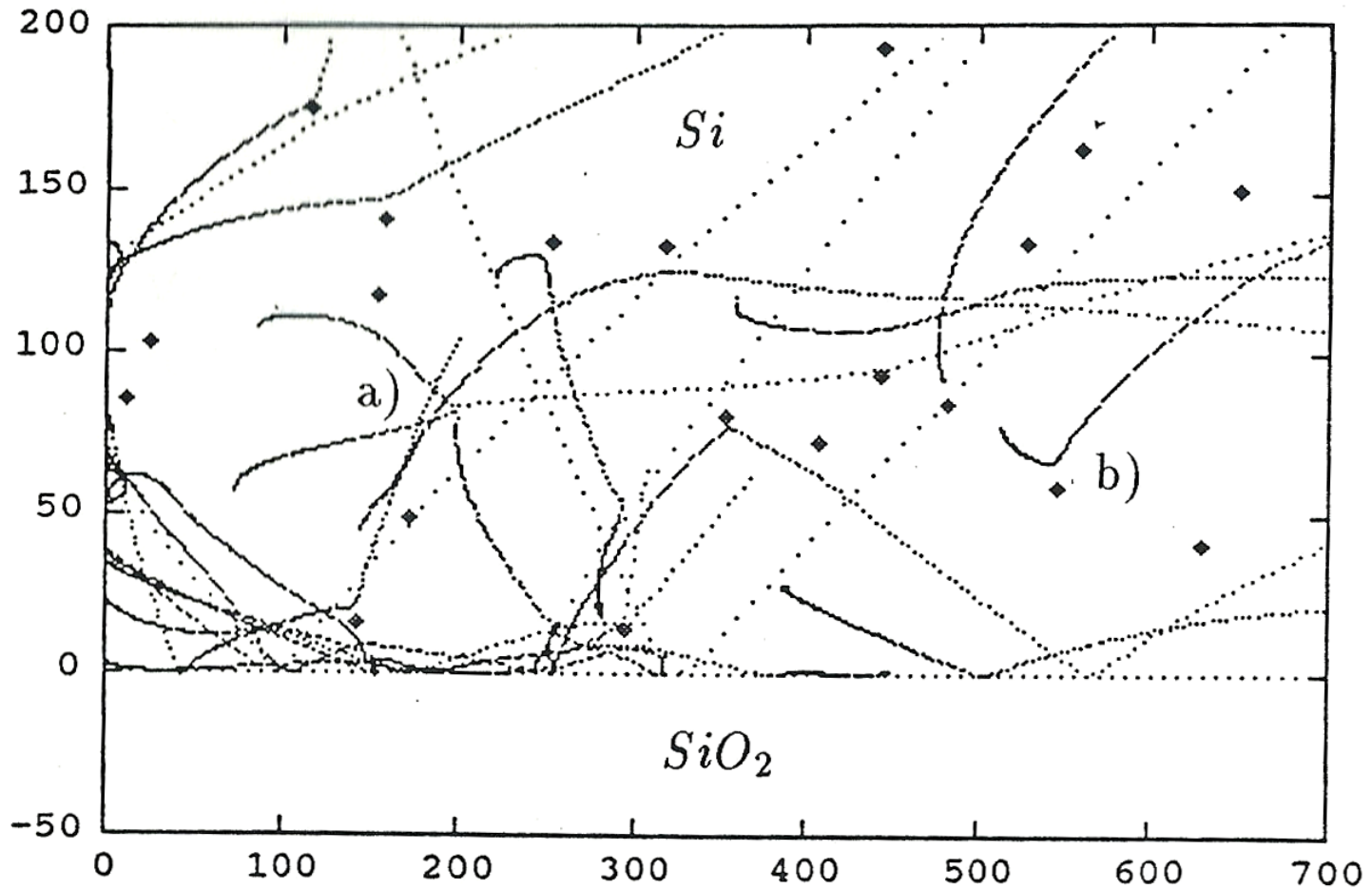
# A szimuláció menete:



# MD szimulációval számított MOS karakterisztika

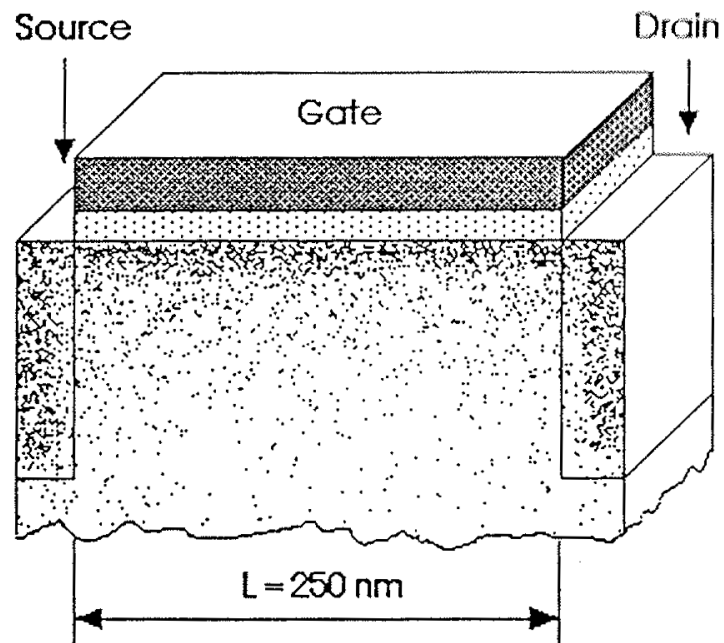
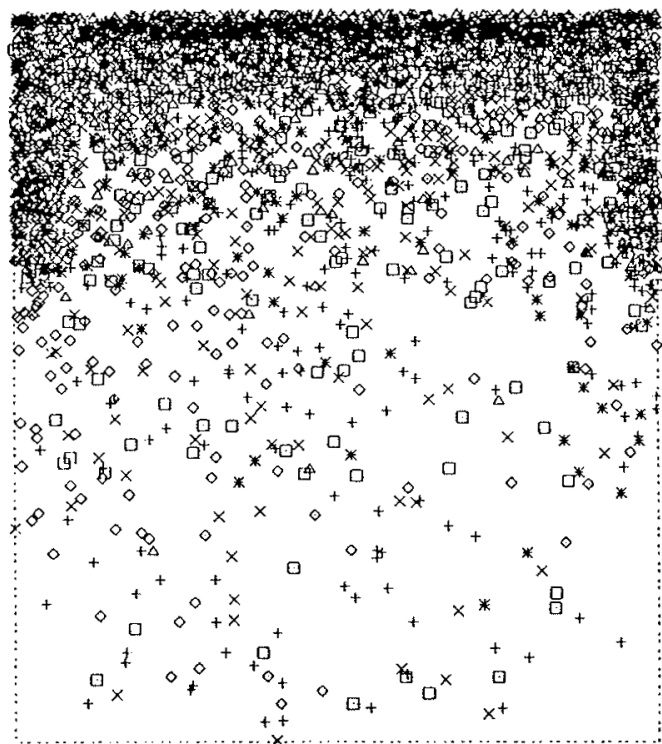


# MD szimuláció eredménye: trajektóriák



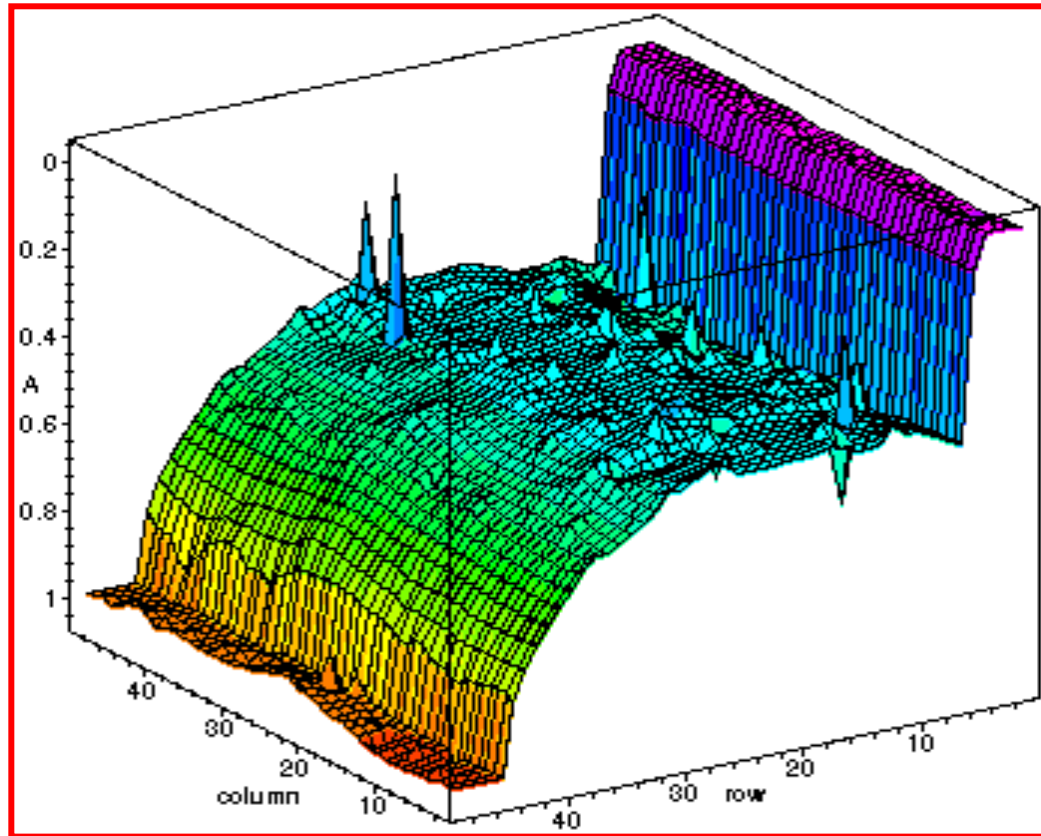
Probléma: Heisenberg-reláció (a hely is impulzus bizonytalansága)

# MD szimuláció eredménye: pozíciók



5.4. ábra: Elektroneloszlás a szimulált struktúra közepén. A különböző markerek a különböző völgyekhez tartozó elektronokat jelentik. Az elektroneloszlás jól kirajzolja a source és a drain helyét.

# Eredő potenciáleloszlás a MOS struktúrában:



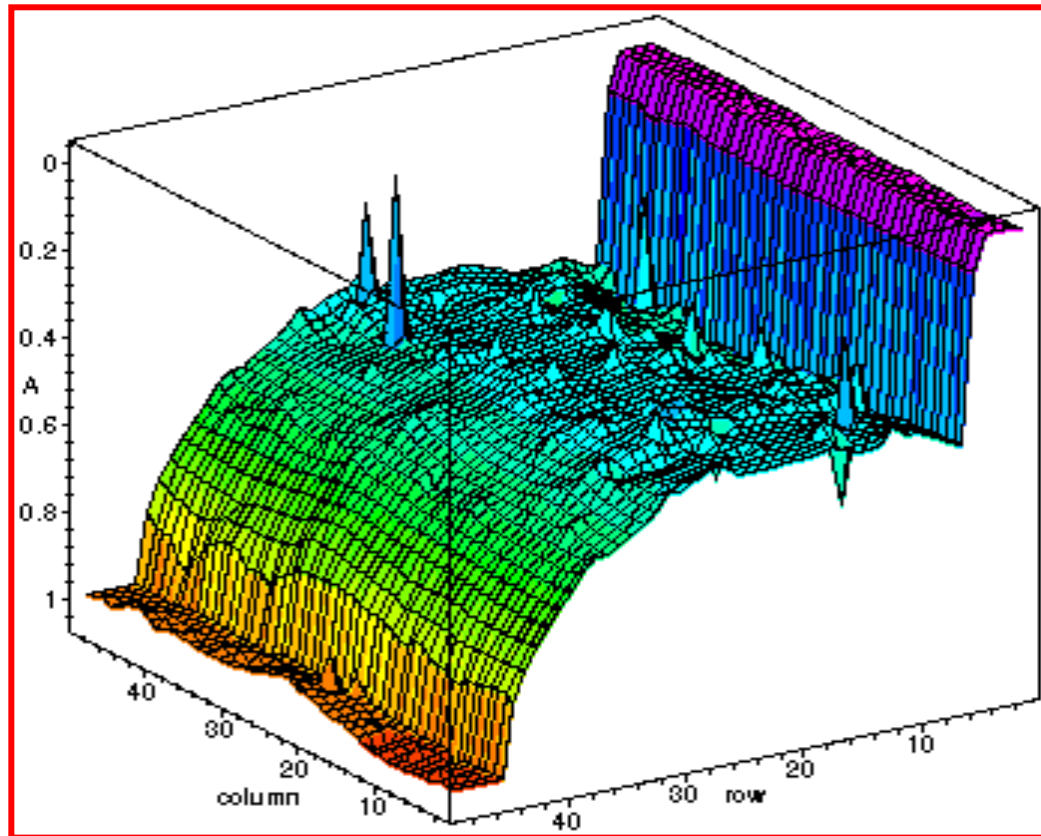
- ▶ Csúcsok a ponttöltések körül
- ▶ Háromszög alakú potenciálgödör a gate-nél
  - **Elektronok lokalizációja az inverziós csatornában: 2DEG** (kétdimenziós elektrongáz)



# ELEKTRONOK POTENCIÁL GÖDÖRBEN



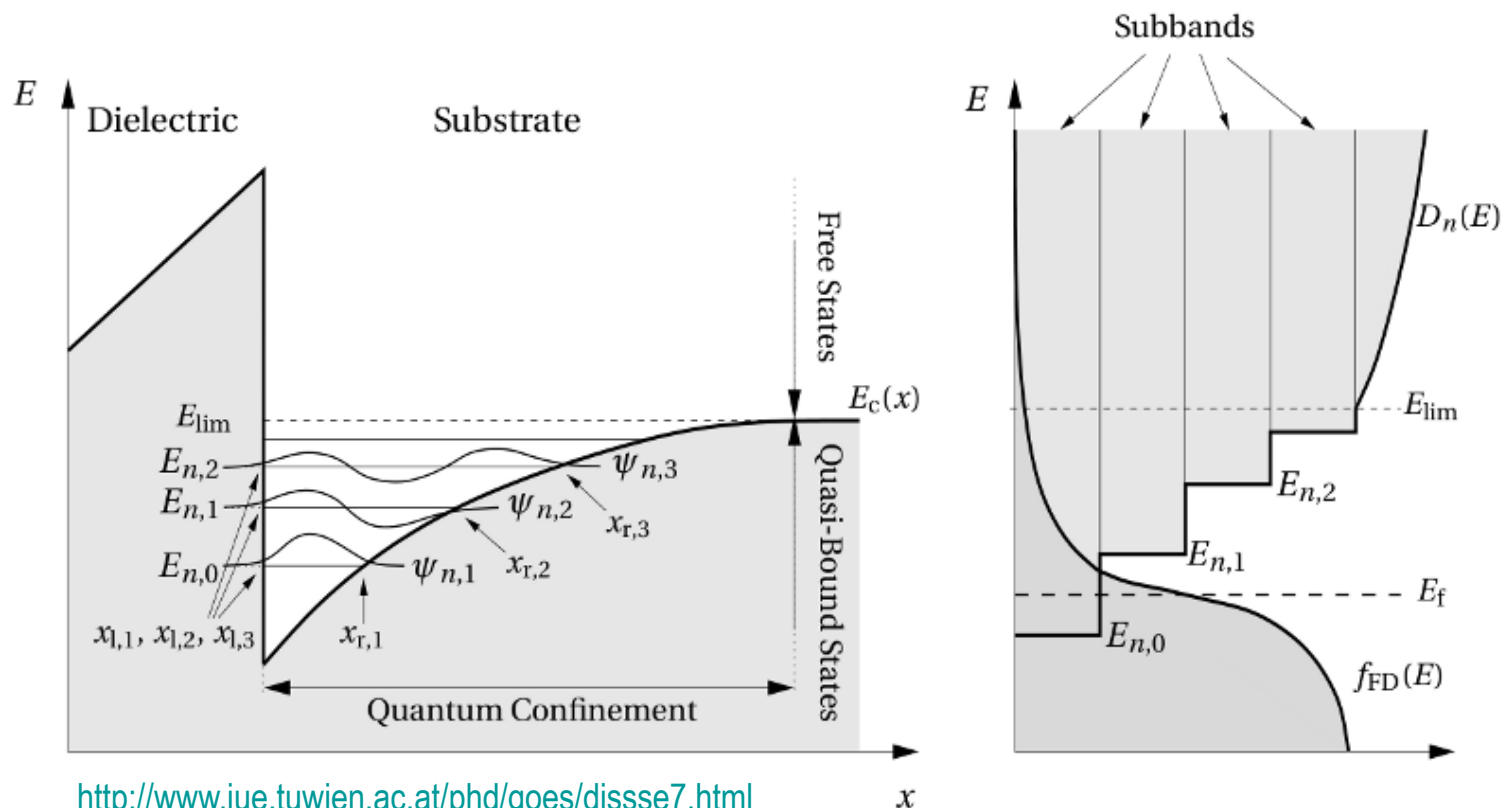
# Eredő potenciáleloszlás a MOS struktúrában:



- ▶ Csúcsok a ponttöltések körül
- ▶ Háromszög alakú potenciálgödör a gate-nél
  - **Elektronok lokalizációja az inverziós csatornában: 2DEG** (kétdimenziós elektrongáz)

# Kvantumvölgyes struktúra: az inverziós réteg

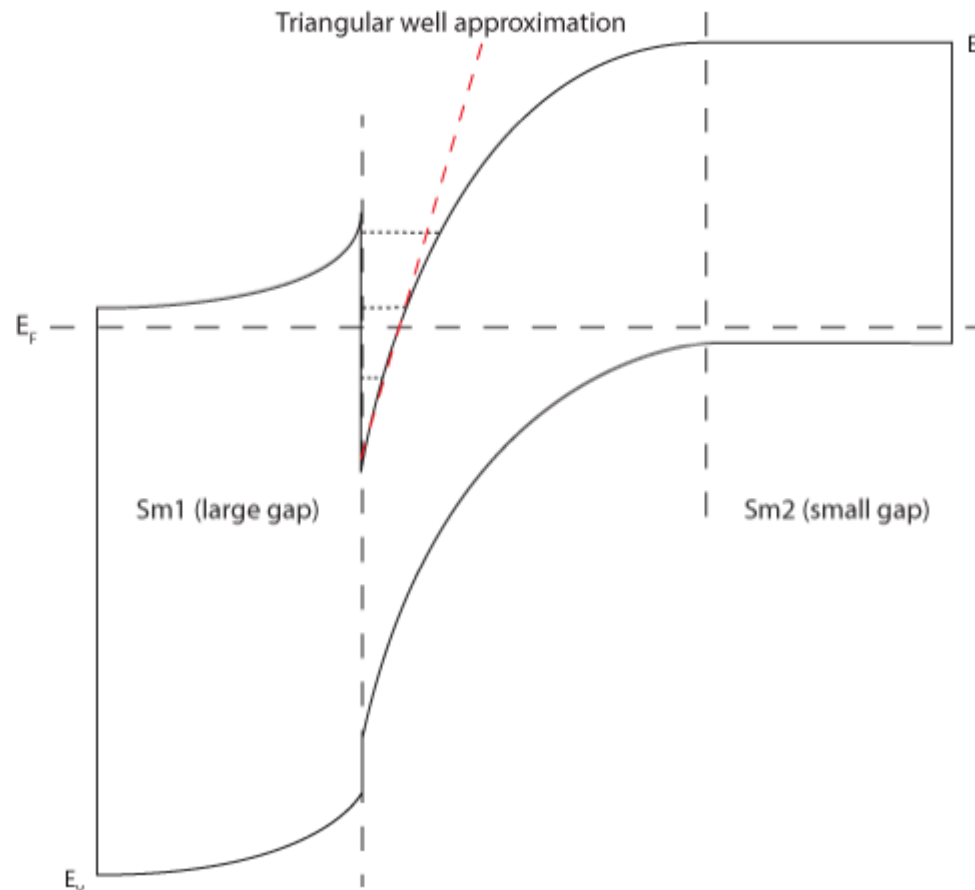
- ▶ Lokalizáció a Si-dielektrikum határfelületénél
- ▶ A DOS függvény megváltozik
- ▶ A  $\mathbf{k}$ -térben a (határfelületre merőleges) z-iránynak megfelelő kvantáltság alakul ki: két dimenziós elektron-gáz – 2DEG



<http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/goes/dissse7.html>

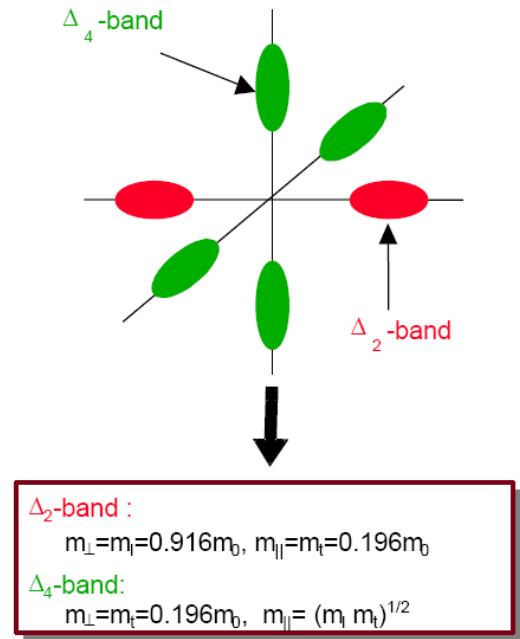
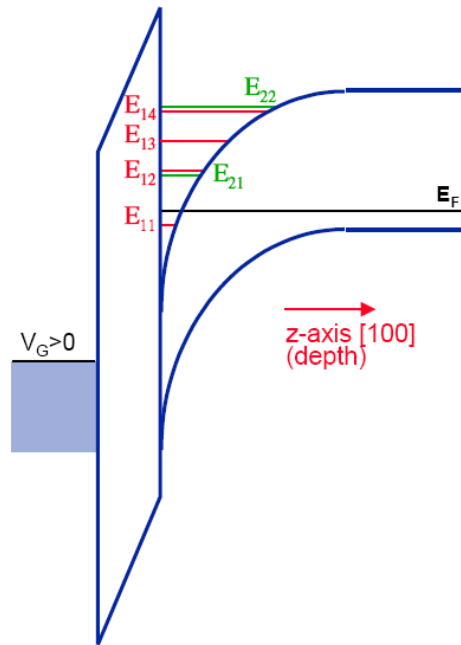
# Si-dielektrikum határfelület: $\Delta$ -potenciálvölgy

- ▶ A Si-dielektrikum határfelületnél a hirtelen potenciál ugrás és a sávelhajlás alkotta gödröt **közelítőleg háromszög alakúnak** lehet tekinteni:



# Si-dielektrikum határfelület: $\Delta$ -potenciálvölgy

- ▶ A Si-dielektrikum határfelületnél a hirtelen potenciál ugrás és a sávelhajlás alkotta gödröt **közelítőleg háromszög alakúnak** lehet tekinteni:



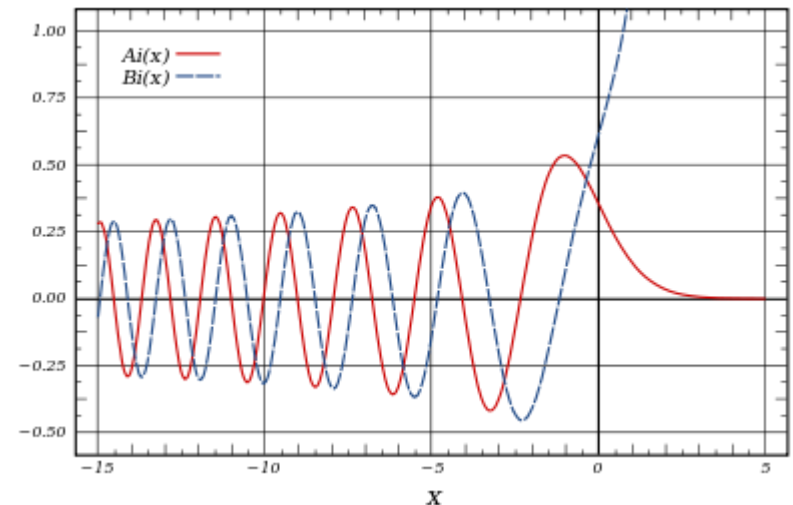
effektív  
tömeg  
tenzor

**Figure 11.** (left) Potential diagram for inversion of *p*-type semiconductor. (right) Constant-energy surfaces for the conduction-band of silicon showing six conduction-band valleys in the  $\langle 100 \rangle$  direction of momentum space. The band minima, corresponding to the centers of the ellipsoids, are 85% of the way to the Brillouin-zone boundaries. The long axis of an ellipsoid corresponds to the longitudinal effective mass of the electrons in silicon  $m_l$ , while the short axes correspond to the transverse effective mass  $m_t$ .

# A hullámfüggvények és az energianívók

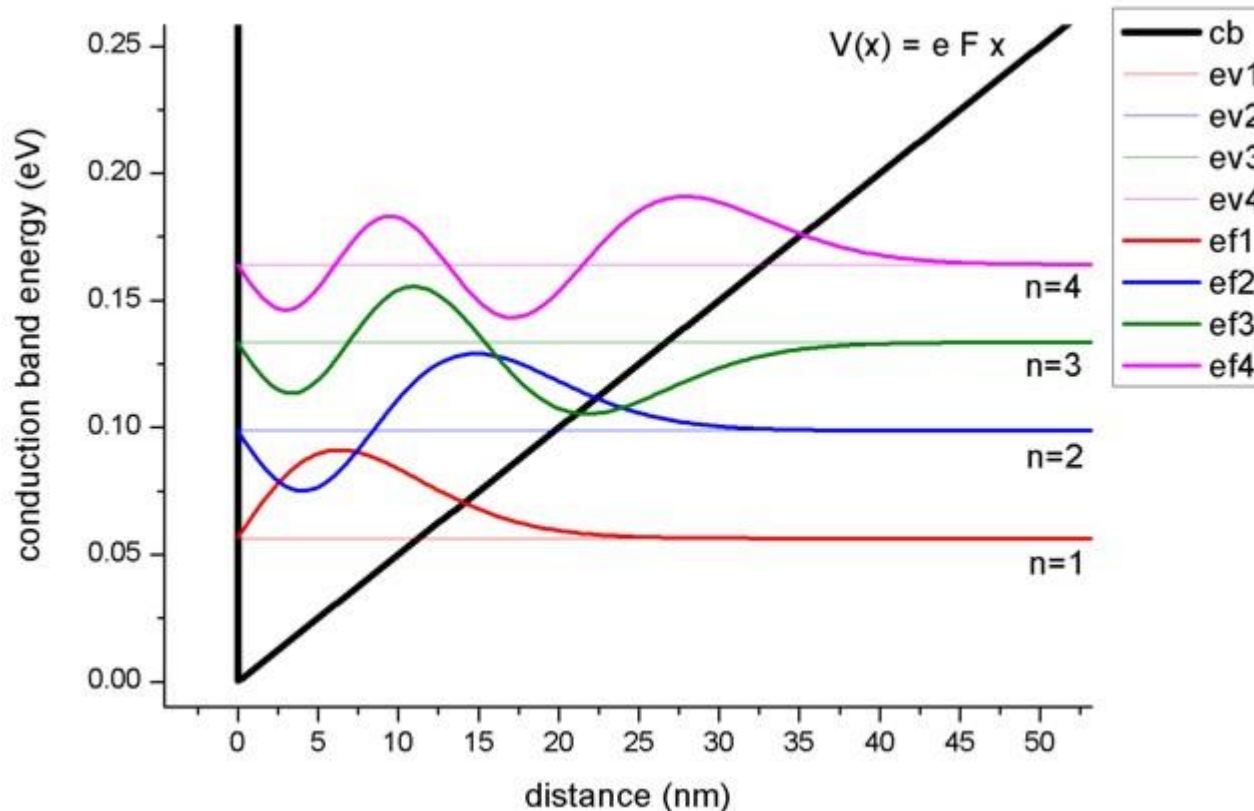
- ▶ A potenciál gödörben a kialakuló energia nívókat a **Schrödinger-egyenlet és a Poisson-egyenlet** önkonzisztens megoldásával lehet csak meghatározni
  - Az egzakt sávelhajás figyelembe vételével ez nagyon körülményes, nagy CPU kapacitást igénylő numerikus számítás eredménye
- ▶ **Közelítő modellt** alkalmaznak:
  - *háromszög alakú potenciál gödör modell*
  - Schrödinger egyenlet analitikus megoldása: az elektronok hullámfüggvényei az ún. *Airy-függvények* segítségével adhatók meg

$$\begin{aligned} \text{Ai}(0) &= \frac{1}{3^{\frac{2}{3}}\Gamma(\frac{2}{3})}, & \text{Ai}'(0) &= -\frac{1}{3^{\frac{1}{3}}\Gamma(\frac{1}{3})}, \\ \text{Bi}(0) &= \frac{1}{3^{\frac{1}{6}}\Gamma(\frac{2}{3})}, & \text{Bi}'(0) &= \frac{3^{\frac{1}{6}}}{\Gamma(\frac{1}{3})}. \end{aligned}$$



# A hullámfüggvények és az energianívók

- Az elektronok hullámfüggvényei és az energia nívók az *Airy-függvények* segítségével adhatók meg



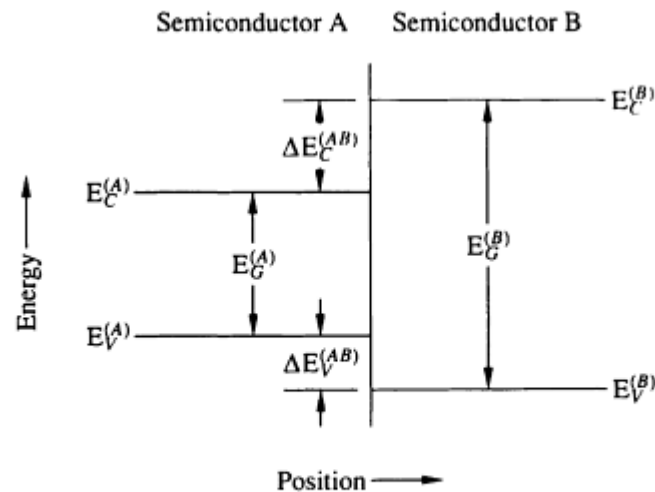
# TOVÁBBI KVANTUMVÖLGYES SZERKEZETEK





# A heteroátmenet

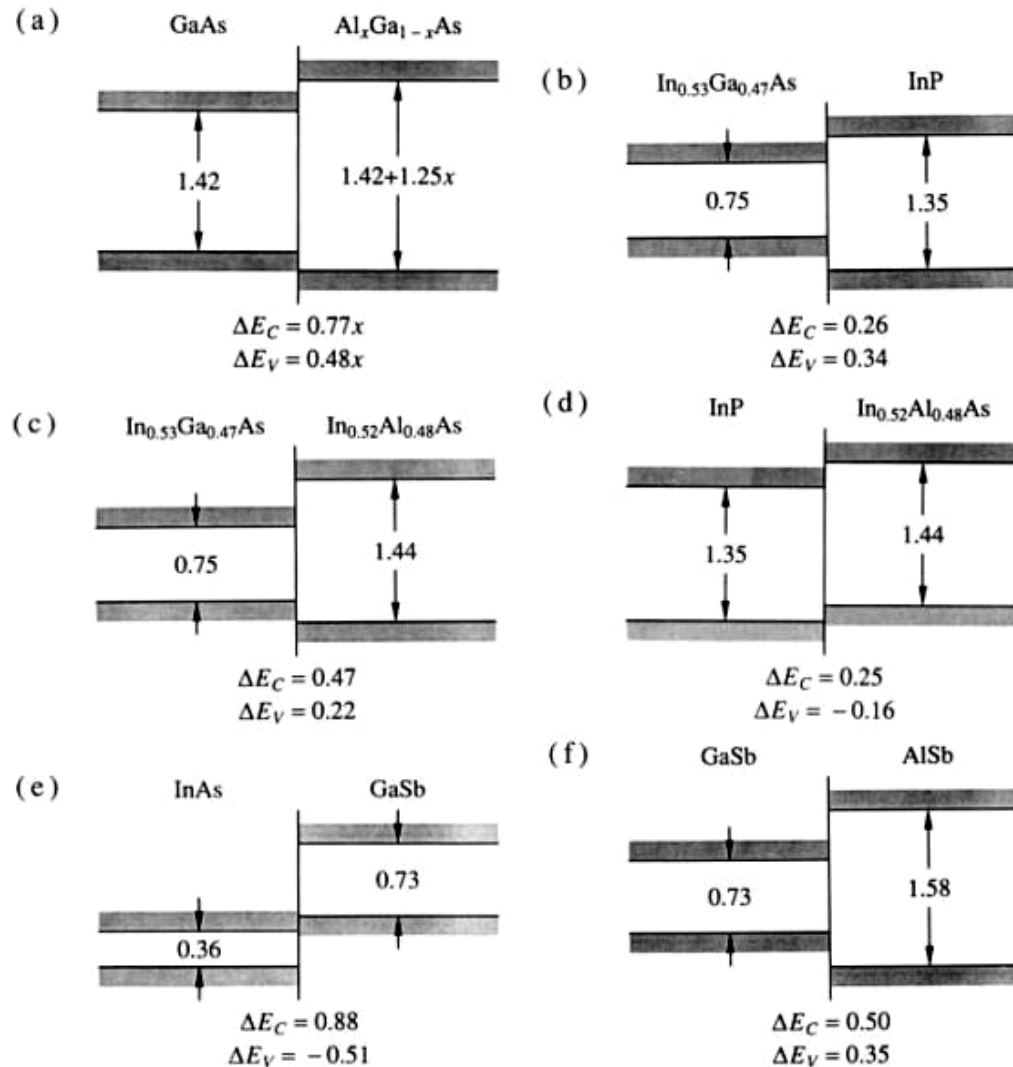
- Olyan változás a félvezető anyagban, ahol nem csak a vezetési sáv alja és a vegyérték sáv teteje változik (ez az ún. homo-junction), hanem a tiltott sáv szélessége is változik:



**Fig. 3.** Definition of the quantities required to describe the band alignment of a heterojunction.

# A heteroátmenet

## ► Példák:



# A heteroátmenet

## ► Példák:

*The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*

93

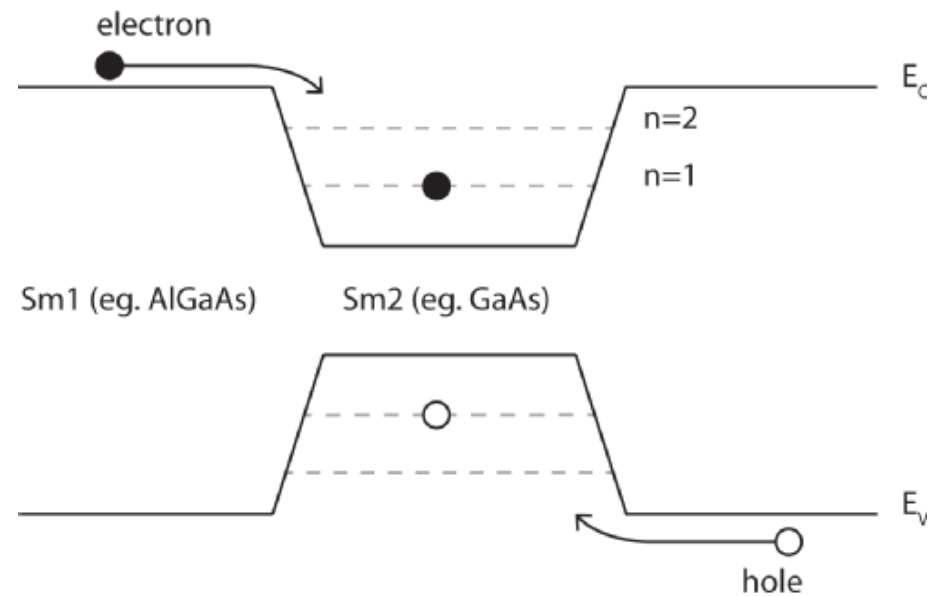
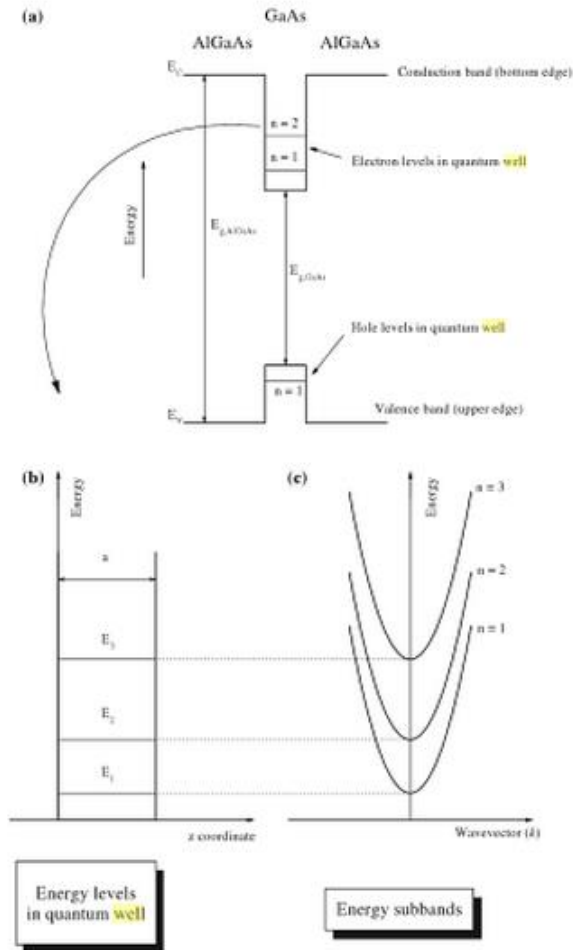
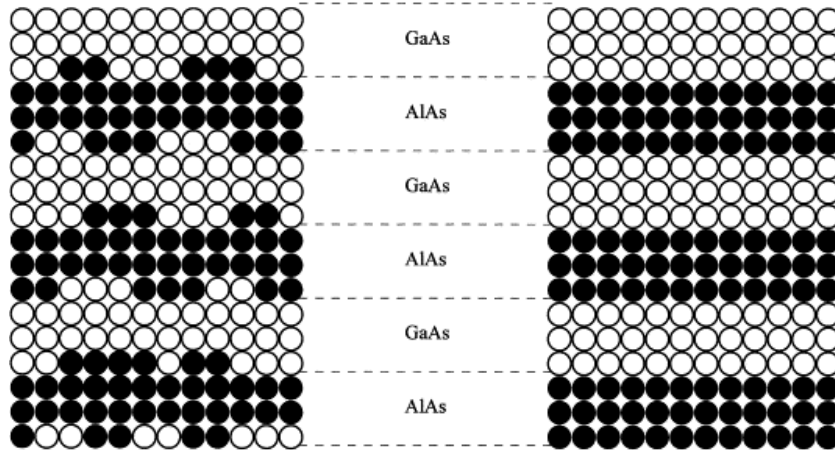


Figure 4.1. (a) AlGaAs–GaAs–AlGaAs square potential well; (b) energy levels; (c) energy subbands.

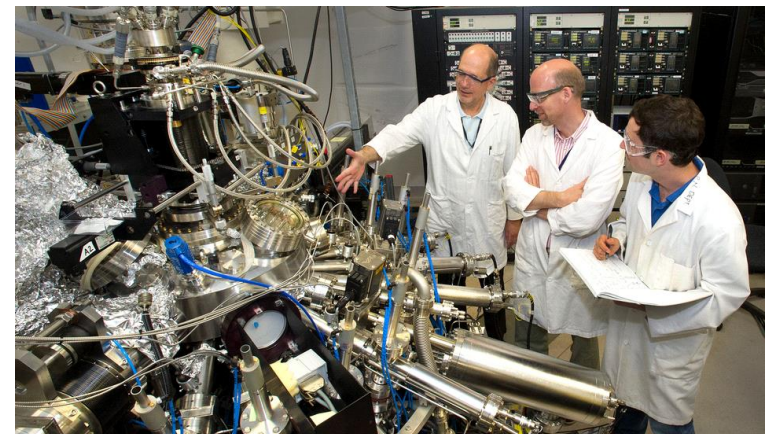
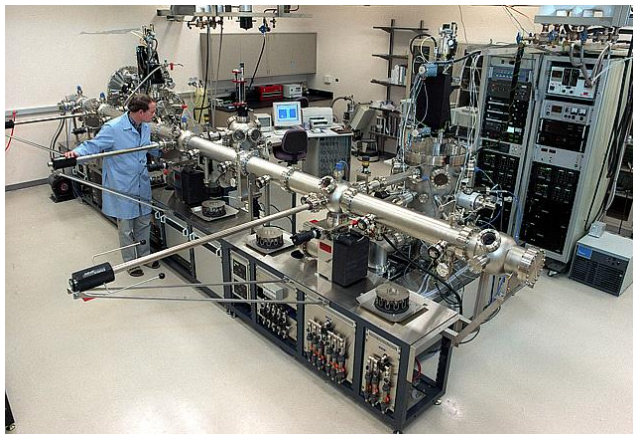
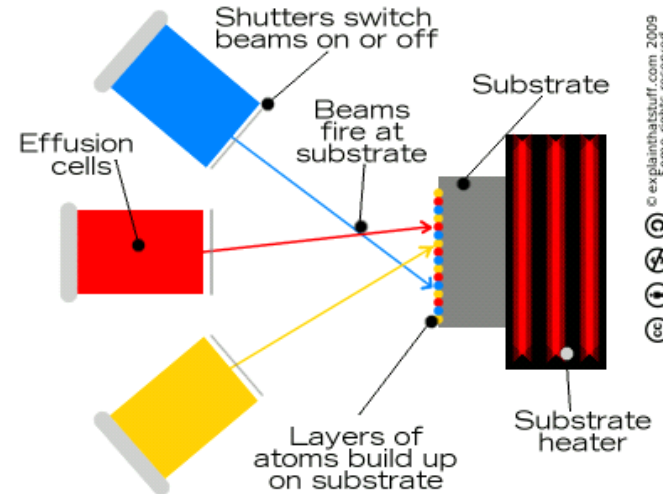
# Hogy készül?

- ▶ MBE-vel (lásd a kurzus korábbi előadását)
- ▶ Folyadékfázisú epitaxiával (MFA, IR-LED)



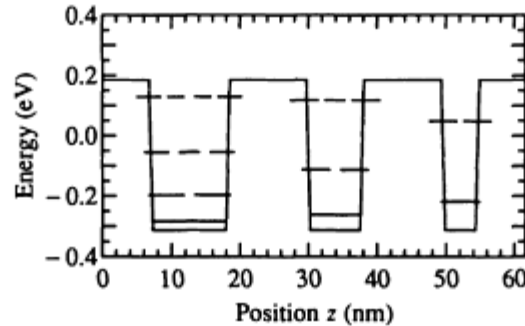
Non-phase locked growth

Phase locked growth

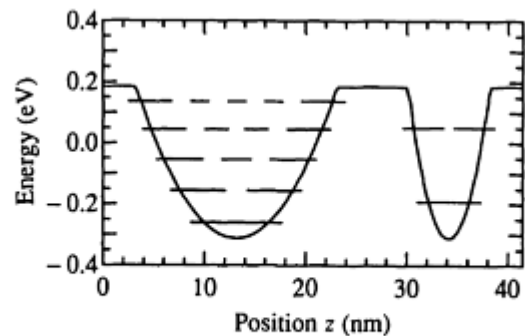


# Különböző heteroátmenetes kvantumvölgyek

## ► Lehetséges potenciál menetek és energia szintek



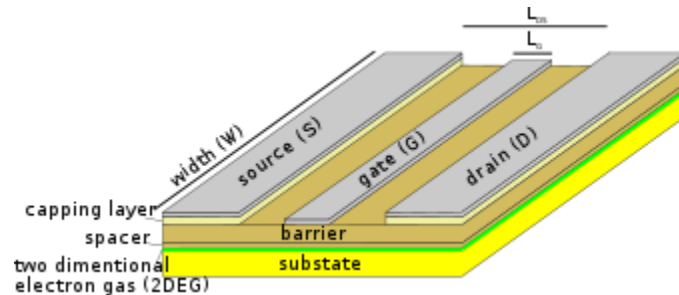
**Fig. 5.** Energy-band profile of a structure containing three quantum wells, showing the confined states in each well. The structure consists of GaAs wells of thickness 11, 8, and 5 nm in  $\text{Al}_{0.4}\text{GaAs}$  barrier layers. The gaps in the lines indicating the confined state energies show the locations of nodes of the corresponding wave functions.



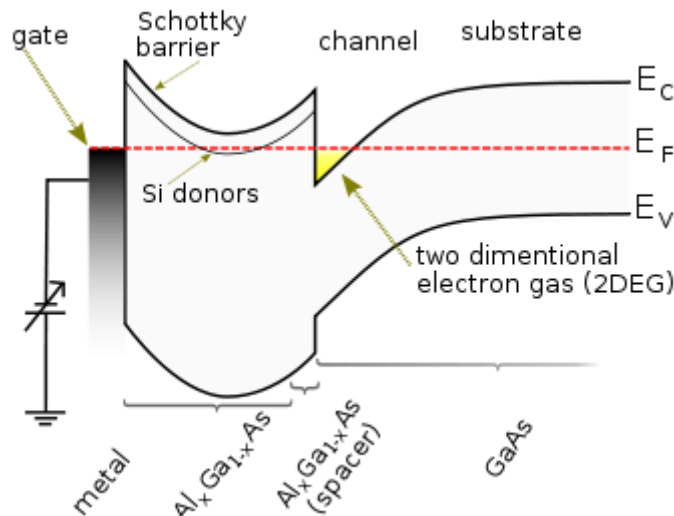
**Fig. 6.** Energy band profile of a structure containing two parabolic quantum wells. The composition is similar to that of Fig. 5, and the overall widths of the wells are 20 and 8 nm.

# Példa: a HEMT

- ▶ HEMT = *high electron mobility transistor*
- ▶ GaAs eszközben egy heteroátmenettel 2DEG-et hoznak létre → nagy elektron mozgékonyág



Cross section of a GaAs/AlGaAs/InGaAs pHEMT



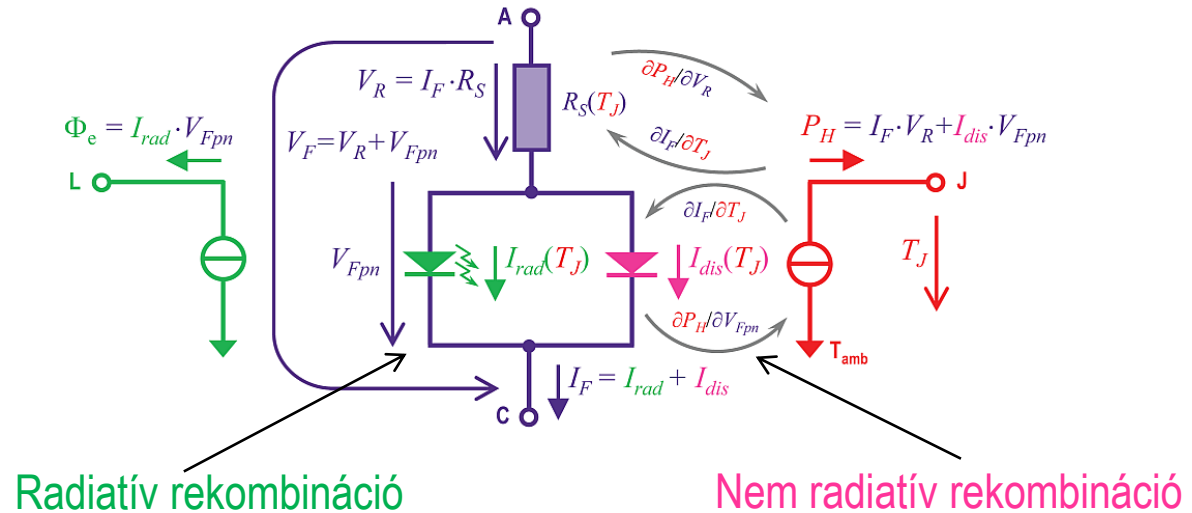
Band diagram of GaAs/AlGaAs heterojunction-based HEMT, at equilibrium.

- ▶ Mikrohullámú technika, radartechnika, rádiócsillagászat
- ▶ Kis zaj, nagy működési frekvencia



# Példa: LED-ek

## ► LED model:



## ► Hatékonyság növelése:

Az ún. kvantumhatásfok növelése

- Radiatív rekombináció növelése
- Nem radiatív rekombináció csökkentése

Az ún. kicsatolási hatásfok növelése

- Keletkezett foton kerüljön a külvilágba, ne abszorbeálódjon

## ► A radiatív rekombináció valószínűsége növelhető nagyobb töltéshordozó koncentrációval

- Erre a dupla heteroátmenetes kvantumvölgyes szerkezet alkalmas

# Példa: LED-ek

- Szinte minden modern LED-re jellemző a dupla heteroátmenetes szerkezet

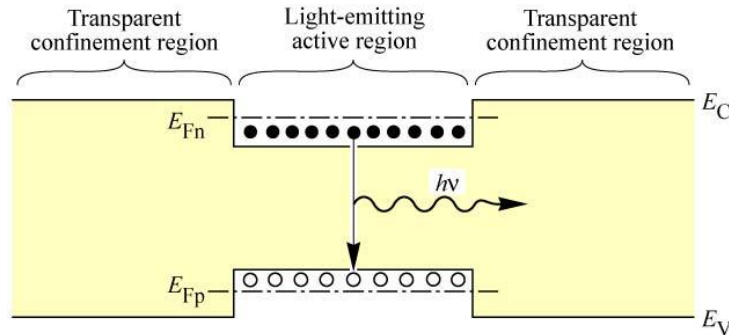


Fig. 9.2. Double hetero-structure with optically transparent confinement regions. Re-absorption in the active region is unlikely due to the high carrier concentration in the active region and the resulting Burstein–Moss shift of the absorption edge.

E. F. Schubert  
*Light-Emitting Diodes* (Cambridge Univ. Press)  
[www.LightEmittingDiodes.org](http://www.LightEmittingDiodes.org)

- Magyarózat:

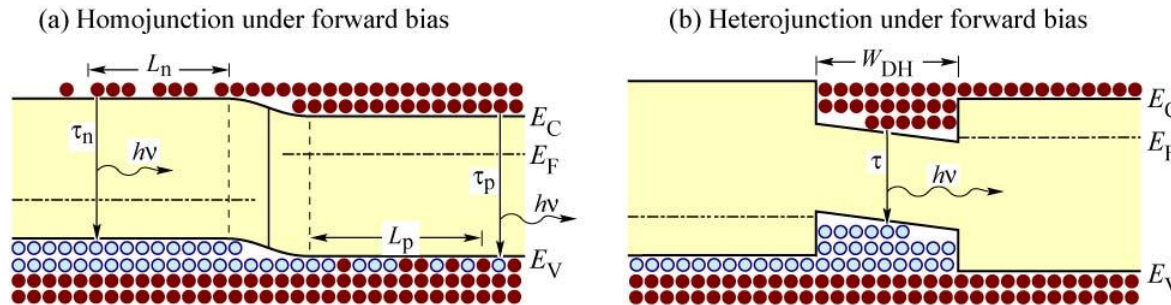


Fig. 7.2. Free carrier distribution in (a) a homojunction and (b) a heterojunction under forward bias conditions. In homojunctions, carriers are distributed over the diffusion length. In heterojunctions, carriers are confined to the well region.

E. F. Schubert  
*Light-Emitting Diodes* (Cambridge Univ. Press)  
[www.LightEmittingDiodes.org](http://www.LightEmittingDiodes.org)

<http://www.ecse.rpi.edu/~schubert/Light-Emitting-Diodes-dot-org/chap07/chap07.htm>



# Példa: LED-ek

- ▶ A töltéshordozók tipikus diffúziós hossza  $\sim 1..20 \mu\text{m}$ , a dupla heteroátmenetében az aktív réteg  $\sim 0.01 .. 1 \mu\text{m}$
- ▶ Nagyobb lesz a töltéshordozó koncentráció, mint egy több diffúziós hossznyi *homojunction*-ban

$$R = B \cdot n \cdot p$$

R: radiatív rekombinációs ráta

B: ún. bimolekuláris együttható

# Példa: LED-ek

## ► A makroszkopikus szerkezet:

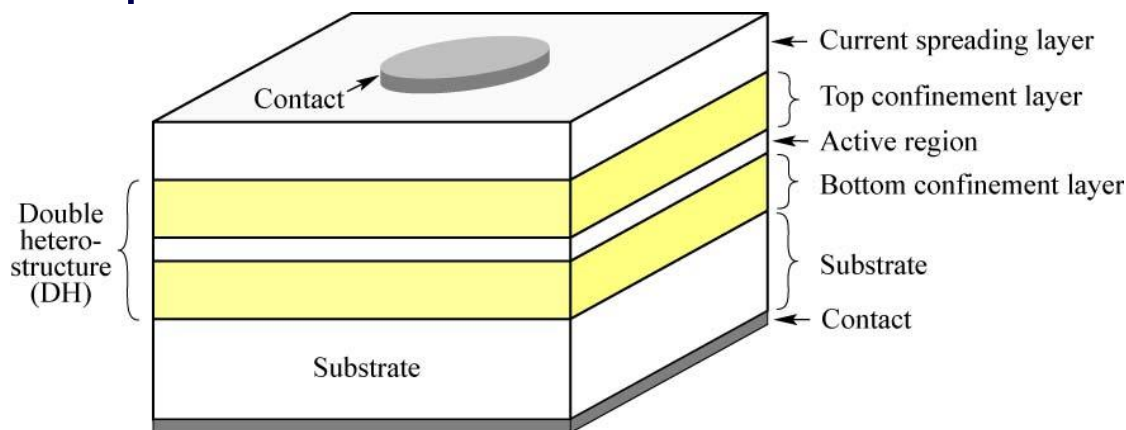


Fig. 7.1. Illustration of a double heterostructure consisting of a bulk or quantum well active region and two confinement layers. The *confinement* layers are frequently called *cladding* layers.

E. F. Schubert  
*Light-Emitting Diodes* (Cambridge Univ. Press)  
[www.LightEmittingDiodes.org](http://www.LightEmittingDiodes.org)

- A dupla heteroátmenetes szerkezet a kicsatolási hatásokra nézve is előnyös
  - A befoglaló (confinement) rétegek sáv szélessége nagyobb, mint az aktív rétegé, ezért azok az aktív rétegben keltett fényre nézve átlátszóak

# HŐVEZETÉS NANO MÉRETEKBEN



# Mi a helyzet a hővezetéssel?

- ▶ A kontinuum szemlélet itt is addig alkalmazható, amíg “kellően sok” fonon van, illetve a fononok szabad úthossza meghaladja a struktúra méreteit
- ▶ Mi a helyzet a nano-hőtranszferrel?
  - A klasszikus Fourier-féle egyenlet (ami formailag analóg a diffúziós egyenlettel) nano méretekben és nagyon rövid időskálán érvényét veszti

*“Nowadays, with the continuous miniaturization of electronic devices and the increased speed of their operation, the limits of the Fourier theory applicability have been reached.”*

*M. Janicki et al, SEMI-THERM 2015 (15-19 March 2015, San Jose)*
  - *A molecular dynamics* módszer itt is szóba jöhet:

*“Certainly, there exist alternative mathematical approaches and models adequate for nanoscale heat transfer computations at the device level, such as the Boltzmann transport equation or the molecular dynamics simulations which were discussed extensively in [2].”*

*M. Janicki et al, SEMI-THERM 2015 (15-19 March 2015, San Jose)*
  - Jó közelítés: Fourier-egyenlet + korrekciós formula a kis méretekre/időskálára

# Nanotechnika a *thermal management*-ben

- ▶ Gyémánt – a legjobb hővezetőképességű szén módosulat
  - TIM: nem nyert,
  - félvezető eszköz: feljövőben
- ▶ CNT használata:
  - Kimagasló hővezető képesség hosszanti irányban
  - Gondok:
    - Rögzítés a felületre / tapadás
      - Nem lehet úgy használni, mint a szokásos TIM anyagokat
    - Nagy átmeneti hőellenállás a felületen
    - Nem azonos hosszúak a szálak → rossz hőátadás a másik oldalon
- ▶ Grafén használata
  - Jó *in-plane* hővezető képesség → jó hőelosztó réteg lehetne
  - Gondok:
    - Rögzítés a felületre / tapadás
      - Nem lehet úgy használni, mint a szokásos TIM anyagokat
- ▶ Ezüst nanorészecskék használata:
  - Szokásos TIM anyagok töltő részecskéi: jobb átlagos hővezető képesség, de nem olyan drámaian jó, mint amit a CNT-től vártak
  - A szinterelt nano-ezüst rögzítések – különösen teljesítmény félvezetőknél
    - Sok technológiai kísérlet folyt/folyik ezekkel az anyagokkal

<http://project-nanotherm.com/>

<http://www.nanopack.org/>



# Ajánlott irodalom:

- ▶ **Nanotechnology for Microelectronics and Optoelectronics**, szerzők: Jose Martinez-Duart, Raul J. Martin-Palmer, Fernando Agullo-Rueda

<https://books.google.hu/books?id=V2IU4LpUuxQC&printsec=frontcover&hl=hu#v=onepage&q&f=false>

- ▶ **Heterostructures and Quantum Devices**, szerkesztette: Norman G. Einspruch, William R. Frensley

<https://books.google.hu/books?id=nsvNBQAAQBAJ&printsec=frontcover&hl=hu#v=onepage&q&f=false>

- ▶ **Light Emitting Diodes**, szerző: Fred Schubert (Cambridge University Press 2006)