

Игорь И. Абрамов

**Основы моделирования элементов
микро- и наноэлектроники**

Монография

LAP LAMBERT Academic Publishing

Impressum / Выходные данные

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek: Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Alle in diesem Buch genannten Marken und Produktnamen unterliegen warenzeichen-, marken- oder patentrechtlichem Schutz bzw. sind Warenzeichen oder eingetragene Warenzeichen der jeweiligen Inhaber. Die Wiedergabe von Marken, Produktnamen, Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen u.s.w. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutzgesetzgebung als frei zu betrachten waren und daher von jedermann benutzt werden durften.

Библиографическая информация, изданная Немецкой Национальной Библиотекой. Немецкая Национальная Библиотека включает данную публикацию в Немецкий Книжный Каталог; с подробными библиографическими данными можно ознакомиться в Интернете по адресу <http://dnb.d-nb.de>.

Любые названия марок и брендов, упомянутые в этой книге, принадлежат торговой марке, бренду или запатентованы и являются брендами соответствующих правообладателей. Использование названий брендов, названий товаров, торговых марок, описаний товаров, общих имён, и т.д. даже без точного упоминания в этой работе не является основанием того, что данные названия можно считать незарегистрированными под каким-либо брендом и не защищены законом о брендах и их можно использовать всем без ограничений.

Coverbild / Изображение на обложке предоставлено: www.ingimage.com

Verlag / Издатель:

LAP LAMBERT Academic Publishing

ist ein Imprint der / является торговой маркой

OmniScriptum GmbH & Co. KG

Bahnhofstraße 28, 66111 Saarbrücken, Deutschland / Германия

Email / электронная почта: info@omniscryptum.com

Herstellung: siehe letzte Seite /

Напечатано: см. последнюю страницу

ISBN: 978-3-659-88718-5

Copyright / АВТОРСКОЕ ПРАВО © 2016 OmniScriptum GmbH & Co. KG

Alle Rechte vorbehalten. / Все права защищены. Saarbrücken 2016

Содержание

Предисловие	3
Глава 1. Основные положения	9
1.1. Основные определения. Парадокс	9
1.2. Концепции и подходы физики открытых систем	11
1.3. Подходы к описанию явлений переноса и синтезу моделей элементов	15
<i>Список литературы к главе 1</i>	17
Глава 2. Модели полуклассического подхода	19
2.1. Строгие методы	19
2.2. Иерархия приближений и исходных уравнений полуклассического подхода	24
2.3. Классы моделей	32
2.4. Пределы применимости подходов	43
<i>Список литературы к главе 2</i>	47
Глава 3. Численное моделирование в рамках полуклассического подхода	51
3.1. Физические проблемы	51
3.2. Математические проблемы	64
3.3. Проблемы разработки программ	74
3.4. Проблемы, определяемые вычислительной техникой, оборудованием, идентификацией параметров моделей и заданием исходных данных	78
<i>Список литературы к главе 3</i>	82
Глава 4. Квантовомеханические формализмы	87
4.1. Приборные структуры нанoeлектроники	87
4.2. Основные формализмы	94
4.2.1. Формализм волновых функций	96
4.2.2. Формализм матриц плотности	99
4.2.3. Формализм квантовых функций распределения	103
4.2.4. Формализм функций Грина	105
4.2.5. Фейнмановские интегралы по траекториям (путям)	107

4.3. Общие замечания	108
<i>Список литературы к главе 4</i>	110
Глава 5. Резонансно-туннельные структуры	115
5.1. Модели формализма волновых функций	118
5.2. Модели формализма матриц плотности	123
5.3. Модели формализма функций Вигнера	125
5.4. Модели формализма функций Грина	136
5.5. Модели на основе других уравнений	146
<i>Список литературы к главе 5</i>	150
Глава 6. Одноэлектронные структуры	159
6.1. Классификация одноэлектронных приборных структур	160
6.2. Модели ортодоксальной теории	162
6.3. Физико-топологические модели	174
6.4. Другие модели, включая модифицированные	180
6.5. Перспективы одноэлектроники	195
<i>Список литературы к главе 6</i>	199
Глава 7. Структуры на квантовых проволоках	211
7.1. Результаты теории неупорядоченных систем	214
7.2. Квантовые проволоки	223
7.3. Приборные структуры на эффектах квантовой интерференции	248
7.4. Перспективы приборов на квантовых проволоках	276
<i>Список литературы к главе 7</i>	280
Глава 8. Нанотранзисторы с МДП-структурой	305
8.1. Модели полуклассического подхода	308
8.2. Модели квантовомеханического подхода	331
8.3. Заключение	383
<i>Список литературы к главе 8</i>	386
Приложение	411

Предисловие

Смысл книги. Одно из самых сложных в настоящее время изделий электронной промышленности – интегральная схема (ИС). Современная ИС может содержать более 10^8 элементов на кристалле и среди искусственных объектов наиболее близка по своей организации, структуре и возможностям к человеческому мозгу. В то же время мозг может интерпретироваться в качестве объекта органической гибридной наноэлектроники, созданного Природой. Отметим лишь следующие факты: 1) передача информации в мозгу осуществляется с помощью электрических сигналов; 2) активными структурами, участвующими в этом процессе, являются органические молекулы, т.е. объекты с нанометровыми размерами. В связи с этим речь идет об органической наноэлектронике. Гибридная же она потому, что, кроме электрических, здесь очень важны, по крайней мере, биохимические процессы. Уровень интеграции мозга человека около 10^{10} нейронов. Ожидается, что ИС твердотельной наноэлектроники будут содержать 10^{10} и более элементов на кристалле. Таким образом, речь идет о создании искусственных интеллектуальных информационных систем по многим показателям сравнимых и превосходящих мозг, но на твердом теле*. Основным же преимуществом систем на твердом теле, судя по всему, останется быстроедействие.

Качество таких высокоинтегрированных систем во многом будет определяться активным элементом или приборной структурой, т.е. "кирпичиками" системы. Здесь уместна следующая аналогия. Известно, что из плохого кирпича хорошее надежное здание не построишь.

Для глубокого исследования и анализа элементов ИС необходимо использовать математическое моделирование, причем соответствующие физико-математические модели

* Строго говоря, речь идет о неорганических твердых телах, как это традиционно принято в твердотельной электронике.

должны характеризоваться достаточно высокой степенью адекватности. Такие модели, как правило, сложны и реализуются с применением численных методов на высокопроизводительных ЭВМ. Следовательно, здесь целесообразно использование концепции вычислительного эксперимента.

Целью предлагаемой монографии является рассмотрение физических основ, проблем, принципов и подходов к моделированию физических процессов в самых разнообразных приборных структурах микро- и нанoeлектроники.

Выбор такой цели данной книги, кроме отмеченного, вызван также следующими двумя основными причинами. С одной стороны, в настоящее время физико-математическим моделям посвящена достаточно обширная научная литература и начинающему специалисту становится очень сложно ориентироваться в этом "бурном" информационном потоке. С другой стороны, несмотря на такое обилие, нет монографии, в которой рассматривались бы основные принципы математического моделирования физических процессов в приборных структурах микро- и нанoeлектроники с единых позиций, а также проведена систематизация моделей. По изложенным причинам, работая в данной области более 40 лет (с 1975 года), мне показалось, что назрела необходимость появления такой книги, т. е. обобщающей монографии, в которой рассматривались бы принципиальные вопросы научного направления.

История написания книги. Осознавая отмеченные выше основные аргументы, я начал работать над книгой еще с января 2002 года. Многие достаточно серьезные объективные сложности поставленной задачи (необходимо было разобраться с рядом очень непростых вопросов, объем проанализированных первоисточников составил не менее 3000 статей и книг) привели к тому, что работа над ней растянулась на годы. Этому

затягиванию процесса также способствовала и традиционная "текучка", связанная с преподавательской и научно-исследовательской работами (докторанты, аспиранты, магистранты, студенты, при этом часто ворох пустых и никому не нужных бумаг и т. д. и т. п.). Понимая, что все это в конечном итоге – лишь попытка самооправдания (время-то уходит!), я начал постепенно публиковать с 2006 года в прекрасном российском журнале "Нано- и микросистемная техника" накапливающийся материал. Так появился цикл статей [1]. Последней "каплей" в этом процессе явилось то, что я преподаю дисциплину "Моделирование приборов микро- и наноэлектроники" для магистрантов специальности "Нанотехнологии и наноматериалы (в электронике)" в Белорусском государственном университете информатики и радиоэлектроники (БГУИР). Поэтому подобная обобщающая работа просто необходима. В результате и появилась данная книга.

Монография написана на основе указанного цикла статей [1]. При этом были устранены погрешности, к сожалению, появившиеся в цикле статей в основном вследствие бескорректного и, однако, самого экспрессного способа печати в журнале. Замечу, что наиболее серьезные погрешности цикла были отмечены в [2]. Главы монографии достаточно независимы. Такая структура книги позволит опытному специалисту ознакомиться только с теми из них, которые представляют для него наибольший интерес. Этому также способствует предельно краткая аннотация, предшествующая каждой главе, и отдельный по главам список литературы. Тем не менее, советую все же и опытным специалистам начать с первой главы. Кроме того, в приложении к книге приводятся две важные с моей точки зрения статьи [3, 4], облегчающие работу с книгой.

С чего же начать? Данный вопрос часто возникает у начинающих специалистов. Для них рекомендую по элементам ИС микроэлектроники начать с курса лекций (главы 1 – 4) [5]. По приборным структурам наноэлектроники – с изучения следующих добротных учебных пособий* [6 – 10], по крайней мере некоторых из этих книг. Другие литературные источники можно найти в предлагаемой читателю монографии. Однако, сразу же замечу, что автор не претендует на полноту охвата всей имеющейся на сегодняшний день литературы по рассматриваемому научному направлению, да это и невозможно, а поэтому заранее приносит свои извинения тем специалистам, работы которых возможно не включены в прилагаемые списки библиографических источников по главам книги.

1. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники // Нано- и микросистемная техника. 2006, ч. I, № 8, С. 34 – 37; ч. II, № 9, С. 26 – 36; 2007, ч. III, № 1, С. 36 – 47; ч. IV, № 2, С. 24 – 32; ч. V, № 3, С. 57 – 70; ч. VI, № 7, С. 10 – 24; 2009, ч. VII, № 7, С. 14 – 29; № 8, С. 7 – 23; 2010, ч. VIII, № 9, С. 27 – 37; № 10, С. 28 – 41; № 11, С. 29 – 42.
2. Нано- и микросистемная техника. 2007, № 12, С. 73; 2011, № 2, С.40.
3. Абрамов И.И. Термин "элемент" в микро- и наноэлектронике // Нано- и микросистемная техника. 2008, № 6, С. 2 – 4.
4. Абрамов И.И. Методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем полупроводниковых приборов и структур // Микросистемная техника. 2002, № 6, С. 18 – 23.
5. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва – Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.

* С книгами [9, 10] автор ознакомился уже после опубликования всего цикла статей [1].

6. Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.
7. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы нанозлектроники: Учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. 332 с.
8. Мартинес-Дуарт Дж.М., Мартин-Палма Р.Дж., Агулло-Руеда Ф. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. М.: Техносфера, 2007. 368 с.
9. Датта С. Квантовый транспорт: от атома к транзистору. Москва – Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Институт компьютерных исследований, 2009. 532 с.
10. Нанозлектроника. Ч. I Введение в нанозлектронику / Под ред. А.А. Орликовского. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. 720 с.

Благодарности. Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю признательность профессорам В.М. Борздову, Б.Г. Коноплеву, И.Г. Неизвестному, Е.А.Рындиному, Ю.А. Чаплыгину, R.W. Dutton, D.K. Ferry, M.V. Fischetti, G.I. Haddad, G. Klimeck, S.E. Laux, M.S. Lundstrom, X. Oriols, R. Pinnau, L.F. Register, A. Seabaugh, S. Selberherr, D. Vasileska, доктору наук И.А. Обухову, кандидату наук В.В. Вьюркову за любезно предоставленные публикации, дополнительную информацию, сотрудникам научно-исследовательской лаборатории "Физика приборов микро- и нанозлектроники" БГУИР, совместно с которыми проведены исследования частично описанные в работе, моим ученицам Н.В. Коломейцевой, И.А. Романовой и И.Ю. Щербаковой за подготовку рукописи книги к печати. Без помощи этих людей монография вряд ли состоялась бы.

P.S.: Данная монография под названием "Физические основы, проблемы и принципы моделирования элементов микро- и

нанозлектроники" должна была быть опубликована издательством ФИЗМАТЛИТ в соответствии с издательским лицензионным договором № 23.05/2011–001 от 23 мая 2011 г. (подписан генеральным директором Андреевой М.Н.) еще в 2012 году. Однако, к сожалению, этого не было сделано издательством вплоть до истечения срока действия договора в 2016 году, т.е. издательство не выполнило свои обязательства по договору. Автор прекратил действие договора и его возможную пролонгацию в 2016 году (согласно ему же) с этим "ведущим научным академическим издательством"... (по мнению самого же издательства, см. сайт www.fml.ru). Замечу, что я издавал свои книги в 8 издательствах различных стран, включая Россию, однако такого не было, чтобы издательство не выполнило свои обязательства... Нонсенс!

Автор возвращает читателю данную монографию без каких-либо изменений*, однако, под новым более компактным названием. Хочется также выразить свою искреннюю признательность издательству LAP LAMBERT Academic Publishing за оперативную публикацию книги, а также порядочный стиль работы с авторами.

* С более поздними исследованиями автора можно ознакомиться в статье: Абрамов И.И. Физика и моделирование приборных структур и устройств микро- и нанозлектроники // Доклады БГУИР. 2014. №2(80). С. 32–42. Работа доступна в интернете.

ГЛАВА 1

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

В главе сформулированы основные положения, которые будут необходимы для рассмотрения анализируемых вопросов с единых позиций для элементов как микроэлектроники, так и нанoeлектроники.

1.1. Основные определения. Парадокс

Для облегчения восприятия дальнейшего материала приведем основные определения. В литературе можно встретить более или менее удачные определения в области математического моделирования. В качестве базовых были выбраны следующие книги [1,2]. Применительно к рассматриваемой области необходимый спектр основных определений был сформулирован в [3,4]. Следуем именно этим работам.

Определение: Под математической моделью (или просто моделью) элемента понимаем набор математических объектов (чисел, переменных, векторов, множеств и т.п.) и математических соотношений, в совокупности отражающих тем или иным образом физические процессы, происходящие в исследуемой приборной структуре.

Таким образом, будем рассматривать только модели физического типа (I-й тип, физико-математические модели). Заметим, что модели формального типа (II-й тип, чисто математические модели) могут с успехом использоваться в ряде важных случаев, например, на этапах функционально-логического, архитектурного проектирования ИС. Граница между моделями этих двух типов иногда бывает весьма условной. Так, при более глубоком рассмотрении в наиболее удачных формальных моделях все же устанавливается связь с

базовыми физическими закономерностями функционирования исследуемого объекта, например фрагмента ИС [5,6].

Далее приведем определение основных характеристик модели.

Определение: Адекватность модели – это степень соответствия или правильность отображения описываемых моделью физических процессов, реально протекающим в элементе.

Определение: Точность модели обычно оценивают по точности описания выходных (интегральных) характеристик элемента относительно экспериментальных данных.

Эти два определения устанавливают принципиальную разницу между адекватностью и точностью модели, которые в работах даже специалистов иногда отождествляются. Приведем пример. Так, часто формально можно описать вольт-амперную характеристику (ВАХ) приборной структуры с высокой точностью полиномами определенной степени, но такая модель в общем случае не будет адекватной, так как никак не вытекает из физической сущности работы элемента.

Определение: Универсальность определяется применимостью модели к описанию элементов с необходимой степенью точности в определенном диапазоне управляющих воздействий (токов, напряжений, температур и т.д.)

Определение: Экономичность модели характеризуется затратами времени и памяти системы "оборудование (ЭВМ, измерительная установка и т.п.) – человек" для подготовки исходных данных модели, ее реализацию и обработку результатов.

Легко заметить противоречивость требования высокой точности, универсальности и экономичности модели. Так как чем выше точность и универсальность модели, тем, как правило, ниже ее экономичность; больше требуемые затраты времени и памяти ЭВМ.

Необходимо отметить, что с диалектической точки зрения модель не может быть полностью адекватной (соответствовать) самому элементу, т.е. она всегда лишь приближенно отображает свойства реальных элементов. Этим мы подчеркиваем идеальный характер модели. В дальнейшем мы также убедимся в справедливости основного парадокса моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники, заключающегося в том, что чем меньше носителей заряда непосредственно участвуют в транспорте, тем, как правило, более сложную физико-математическую модель необходимо использовать.

1.2. Концепции и подходы физики открытых систем

Анализ литературы показывает, что в современной физике существует целый ряд нерешенных проблем, а квантовая механика, к сожалению, не является панацеей от всех бед. В принципе, в этом нет ничего удивительного, так как квантовая механика является теорией, т.е. основывается на моделях, а следовательно, – идеализациях. Данный взгляд полностью согласуется с теоремой Гёделя, в которой утверждается, что не существует конечной аксиоматической системы, позволяющей разрешить все проблемы. Тем не менее, постулаты квантовой механики привели к созданию одной из самых мощных физических теорий окружающего нас мира.

В настоящее время наметилось ряд тенденций в обобщении и дальнейшем развитии квантовой механики. Наиболее успешные подходы, по-видимому, развиваются в рамках физики открытых систем (ФОС) [7–10]. Введем определение открытой системы, следуя И. Пригожину – одному из основателей ФОС.

Определение: Открытой системой является система, которая обменивается с окружающей (внешней) средой энергией и массой.

В соответствии с приведенным определением рассматриваемые элементы микро- и наноэлектроники могут интерпретироваться как объекты ФОС, т.е. открытые системы. К ним же могут быть отнесены и ИС, интегрированные системы, включающие отмеченные приборные структуры.

По изложенным причинам именно *в рамках ФОС возможен, с точки зрения автора, единый подход к описанию самых разнообразных приборных структур микроэлектроники и наноэлектроники.*

Рассмотрим основные концепции и подходы, развиваемые в настоящее время в рамках ФОС и которые могут представить практический интерес при исследовании элементов.

Существует две принципиально различные концепции представления открытых систем на микроуровне, т.е. на "первом шаге" перехода от реального объекта к его описанию в виде строгой модели. В рамках первой концепции описание ФОС изначально основывается на известных обратимых уравнениях квантовой механики, в частности, уравнении Шредингера и его следствиях. Необходимая необратимость при описании ФОС вводится на последующих огрубленных уровнях описания [9, 10]. В рамках второй концепции описания ФОС необратимость по сути дела постулируется на начальном уровне (микроуровне) описания. В одном из подходов, в частности [8], предлагается в связи с этим отказаться от традиционного изначального описания исходя из уравнения Шредингера, т.е. оперирования с величинами в гильбертовом пространстве. С математической точки зрения необходимо перейти к более общим оснащенным гильбертовым пространствам, а исходное уравнение Лиувилля – фон Неймана также постулируется. Итак, и в том и в другом случаях мы начинаем с постулата. Это и есть "первый шаг" – начало идеализации.

Здесь, действительно, возникает очень сложная проблема – проблема "первого шага". И она часто связывается в известными

парадоксами и проблемами квантовой механики, хотя, по-видимому, является более философской. Основной вопрос интересный для нас по сути дела следующий: возможно ли описать систему точно? Ясно, что на практике для сложных систем – это, как правило, невозможно. А возможно ли в принципе? Оставим этот вопрос без ответа по двум причинам. Первая причина уже была пояснена и следует из описанного выше общеполитического взгляда на модель – это всегда идеализация, если речь идет об относительно сложных системах. Такими, в частности, и являются элементы. В связи с этим уместно вспомнить слова А. Эйнштейна, который отметил, что "доказать "сверхчеловеческую" объективность научной истины не удастся никогда". Вторая причина связана с указанным выше ответом на более важный вопрос, что на практике полное описание невозможно. Таким образом, мы с Вами изначально постулируем, что *любая модель приборной структуры микроэлектроники и наноэлектроники на любом уровне описания является приближенной, т.е. содержит погрешности в описании.*

Рассмотрим основные подходы к описанию открытых систем, которые приводят к положительным результатам или являются продуктивными. К ним могут быть отнесены:

- 1) модель системы (на различных уровнях строгости описания), которая включает основную систему, ее окружение и взаимодействие между ними;
- 2) модель, в основе которой лежит уравнение для матрицы плотности системы и получить которое можно после суммирования по степеням свободы окружения;
- 3) модель, включающая ограниченные интегралы по траекториям (квантовые коридоры), на основе фейнмановской формулировки квантовой механики;

- 4) модель на основе уравнения Шредингера с комплексным гамильтонианом;
- 5) модель на основе уравнения для матрицы плотности в оснащенных гильбертовых пространствах;
- 6) модель на основе стохастического уравнения Шредингера.

Указанные известные подходы имеют достоинства и недостатки. В целом, они, хотя и могут приводить к различным уравнениям модели, однако часто устанавливается их эквивалентность. Например, показано [10], что модель на основе ограниченных интегралов по траекториям может быть сведена к модели на основе уравнения Шредингера с комплексным гамильтонианом. Это замечание имеет важное значение, так как позволяет нам не углубляться в отмеченную ранее философскую проблему "первого шага".

В связи с этим в качестве базовой выберем общую методологию вывода основных уравнений моделей последующих иерархических уровней в результате физических допущений с огрублениями по пространству, времени и статистического усреднения. Данный подход в свое время с успехом использовался Н. Боголюбовым [11] при выводе необратимых кинетических уравнений исходя из обратимого уравнения Лиувилля и обобщенный впоследствии на квантовомеханический случай [12]. Подход оказался эффективным и при получении моделей различных иерархических уровней, в частности гидродинамических [12], причем в различных областях физики. В последнее время данный классический и традиционный подход для открытых систем наиболее последовательно развивался в работах Ю. Климонтовича [9]. С точки зрения автора, подход особенно эффективен при выводе уравнений моделей последующих иерархических уровней, т.е. после "первого шага".

Таким образом, *описание открытых систем эффективно проводить на основе построения уравнений модели путем введения дополнительных физических предположений с дальнейшим огрублением по пространству, времени и статистическим усреднением на каждом последующем иерархическом уровне описания.* Отличие от работ Ю. Климонтовича состоит в том, что в данной формулировке исключена проблема "первого шага" вследствие изложенного выше.

Следуя [9], введение дополнительных источников диссипации возможно путем огрубления по пространству и времени. В ряде случаев целесообразно введение источников Ланжевена, так как бывает очень сложно описать некоторые воздействия на открытую систему и некоторые процессы в самой системе. Возможно также введение дополнительных источников диссипации через граничные условия.

Проведенное рассмотрение приводит к выводу, что серьезной проблемой теоретического исследования объектов ФОС_н в частности приборных структур микро- и наноэлектроники, является *проблема неполноты описания модели.* Возникает она, начиная с "первого шага", и, к сожалению, – неизбежна для моделирования. Для нас также принципиально важно подчеркнуть, что в рамках той и другой концепций описания открытых систем исходные уравнения первого (иерархического) уровня постулируются.

1.3. Подходы к описанию явлений переноса и синтезу моделей элементов

Выделяются *два общих подхода к описанию явлений переноса в приборных структурах микро- и наноэлектроники, а именно [13–16]: полуклассический и квантовомеханический.*

Первый служит в качестве основы моделей структур, когда электронно-дырочная плазма (ЭДП) является классической системой, а сам он основывается на статистической физике и некоторых квантовомеханических представлениях, в частности, о полупроводниках. Второй общий подход необходимо применять при существенном влиянии квантовомеханических эффектов на процессы переноса, наблюдаемые при соизмеримости длины волны де Бройля носителей заряда λ_B с характеристической длиной прибора или размерами технологических неоднородностей $L_{хар}$, т.е. когда ЭДП является квантовомеханической системой.

Анализ известных моделей полупроводниковых приборов и элементов ИС физического типа в рамках отмеченных двух подходов позволил выделить *три общих метода синтеза* [15, 16], в основе которых лежат: *первого – физические допущения с огрублениями по пространству, времени и в результате статистического усреднения; второго – использование различных модельных зависимостей для параметров моделей; третьего – аппроксимации о характере поведения искомым функций.* Первый подход является наиболее кардинальным и, как уже отмечалось, лежит в основе построения иерархии уравнений ФОС. В работах [3, 4] было показано, что в сочетании с двумя другими подходами он приводит к синтезу практически всех известных моделей элементов кремниевых ИС физического типа, т.е. не формальных.

Впоследствии будет показано, что *отмеченных два общих подхода к описанию явлений переноса и три основных метода синтеза достаточны для того, чтобы построить практически любую модель приборной структуры как микроэлектроники, так и наноэлектроники физического типа.* Кроме того, дальнейшее рассмотрение будет проводиться в соответствии с основными положениями данной главы.

Список литературы к главе 1

1. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
2. Системы автоматизированного проектирования в радиоэлектронике: Справочник / Под ред. И.П. Норенкова. М.: Радио и связь, 1986. 368 с.
3. Абрамов И.И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем": Учеб. пособие. Мн.: БГУ, 1999. 92 с.
4. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
5. Носов Ю.Р., Петросянц К.О., Шилин В.А. Математические модели элементов интегральной электроники. М.: Советское радио, 1976, 304 с.
6. Чахмахсазян Е.А., Мозговой Г.П., Силин В.Д. Математическое моделирование и макро моделирование биполярных элементов электронных схем. М.: Радио и связь, 1985. 144 с.
7. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. М.: Изд. иностр. лит., 1960. 127 с.
8. Пригожин И., Стенгерс И. Время, хаос, квант. К решению парадокса времени. М.: Эдиториал УРСС, 2001. 240 с.
9. Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. Т.3. Физика квантовых открытых систем. М.: Янус – К, 2001. 508 с.
10. Менский М.Б. Квантовые измерения и декогеренция. М.: Физматлит, 2001. 232 с.
11. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М., Л.: Гостехиздат, 1946. 120 с.

12. Гуров К.П. Основания кинетической теории (метод Боголюбова). М.: Наука, 1966. 352 с.

13. Barker J.R., Ferry D.K. On the physics and modeling of small semiconductor devices // Solid-State Electron. 1980. V.23, N 6. P. 519 – 549.

14. Рыжий В.И., Баннов Н.А. Математическое моделирование субмикронных элементов интегральных схем: состояние и проблемы // Микроэлектроника. 1987. Т.16, №6. С.484 – 496.

15. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 5. С. 3 – 9.

16. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн.: БГУ, 1999. 189 с.

ГЛАВА 2

МОДЕЛИ ПОЛУКЛАССИЧЕСКОГО ПОДХОДА

В данной главе выделены и рассмотрены физико-математические основы моделирования физических процессов в разнообразных элементах микроэлектроники в рамках полуклассического подхода.

2.1. Строгие методы

Полуклассический (квазиклассический) подход применим, когда характерные размеры элемента $L_{хар}$ гораздо больше длины волны де Бройля λ_B [1]. В целом, это, как правило, выполняется для приборных структур микроэлектроники. В связи с этим данный подход традиционно и используется для моделирования элементов микроэлектроники. В настоящее время в рамках полуклассического подхода построено огромное количество моделей, описание которых невозможно даже в рамках большой книги. К счастью, это многообразие моделей может быть систематизировано.

Цель данной главы – выделение и рассмотрение физико-математических основ моделирования физических процессов в разнообразных элементах микроэлектроники в рамках полуклассического подхода. При этом будем следовать классификации, предложенной в [2–5], как наиболее полно соответствующей целям монографии.

При создании кинетической теории классических систем основополагающей является теорема Лиувилля для полной вероятностной функции распределения $f^{(N)}$, N одинаковых частиц. После интегрирования по координатам и импульсам $N-1$ частиц из обратимого уравнения Лиувилля при ряде

предположений может быть получена цепочка (или иерархия) уравнений Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона (ББГКИ) для приведенных функций распределения $f^{(l)}$ [6, 7]. Серьезным недостатком этих уравнений является то, что в уравнение для $f^{(l)}$ входит $f^{(l+1)}$. Таким образом, при *строгом* (в рамках полуклассического) *подходе* к описанию электронно-дырочной плазмы (ЭДП) в элементах необходимо решать все уравнения цепочки, что практически нереально, так же как и решение исходного уравнения Лиувилля для многочастичной функции распределения $f^{(N)}$. Заметим, что здесь в *строгом подходе* (подчеркиваем – но не точном) мы по сути дела постулировали в качестве "первого шага" при переходе от реального объекта к его модели справедливость обратимого уравнения Лиувилля.

Вследствие практической невозможности использования такого подхода традиционным стал переход к уравнению для одночастичной функции распределения $f^{(1)}$ (в дальнейшем f). Этот переход от обратимых ББГКИ уравнений, например, к *необратимому кинетическому уравнению Больцмана* (КУБ) производится в результате введения условия полного ослабления начальных корреляций (условия Боголюбова). Для нас важно отметить, что уже здесь (на "втором шаге") при выводе используются физические допущения с огрублением по пространству, времени и в результате статистического усреднения.

Данное упрощенное КУБ выводится и для твердых тел, включая полупроводники [8]. Традиционно оно записывается в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{пол}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}}, \quad (1)$$

где *полевой член*

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = -(\vec{v}\nabla_r f) - \frac{1}{m}(\vec{F}\nabla_v f) \quad (2)$$

описывает скорость изменения функции распределения f в результате движения носителей массы m в \vec{r} - и \vec{v} -пространстве, а член *столкновений*

$$S = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{cm}} = \int \{f(\vec{v}', \vec{r}', t)W(\vec{v}', \vec{v}) - f(\vec{v}, \vec{r}, t)W(\vec{v}, \vec{v}')\} d^3v' \quad (3)$$

описывает скорость изменения функции f в результате столкновений (рассеяния) носителей. Здесь введены следующие обозначения: t – время, \vec{r} – радиус-вектор пространства, \vec{v} – скорость носителей, ∇_r , ∇_v – градиенты по соответствующим направлениям, \vec{F} – сила, действующая на носитель и определяемая внешними полями, $W(\vec{v}', \vec{v})$ – характеризует вероятность перехода из состояния (\vec{r}', \vec{v}') в состояние (\vec{r}, \vec{v}) .

В общем случае при рассмотрении ЭДП в приборных структурах необходимо учитывать то, что она состоит из нескольких сортов подвижных носителей заряда (традиционно – электронов и дырок). КУБ может быть обобщено на этот случай в виде системы кинетических уравнений. При этом происходит существенное усложнение входящих в них интегралов столкновений $\{S_i\}$, которые включают интегралы столкновений электронов с фонами, дефектами решетки разного рода (примесями, дислокациями и т.д.), электронами, а также описывающие процессы типа рекомбинации, ударной ионизации и др. Получаемая система интегро-дифференциальных уравнений должна быть дополнена уравнениями электромагнитного поля Максвелла. Полная система уравнений с соответствующими граничными условиями является *базовой непрерывной кинетической моделью* ЭДП в приборной структуре.

Главные допущения при ее получении: 1) ЭДП – идеальная система; 2) ЭДП – классическая система. Корректность их использования для элементов современных ИС обосновывалась в [9]. Заметим, что некоторые квантовые эффекты могут быть учтены в рамках подхода близкого к выделенному кинетическому описанию.

Полная система уравнений рассматриваемой *строгой* (с указанными оговорками) *кинетической модели* приборной структуры является очень сложной системой интегро-дифференциальных уравнений. К сожалению, реализация следующих из нее дискретных (численных) моделей является чрезвычайно трудоемкой задачей для современных суперЭВМ и в настоящее время не выполнена. Здесь основные проблемы связаны со сложностью задания зонной структуры, вида интегралов столкновений, построения численных моделей и др.

Отметим и еще один строгий метод в рамках полуклассического подхода, основанный на применении при моделировании процессов переноса *метода Монте-Карло* [10–12]. Было доказано, что результаты, полученные с помощью этого метода, полностью согласуются с данными, базирующимися на реализации метода КУБ. Принципиальное отличие заключается в том, что в методе Монте-Карло имитируется движение каждого из носителей заряда, т.е. моделирование осуществляется непосредственно на микроуровне, а не путем расчета микрохарактеристики системы f .

Различают два метода Монте-Карло, а именно: многочастичный и одночастичный. В *многочастичном методе Монте-Карло* имитируется движение большого числа носителей заряда. Оптимальное количество носителей при моделировании нестационарных процессов в полупроводниках лежит от нескольких тысяч до десятков (и даже сотен) тысяч и зависит от конкретной задачи. При моделировании стационарных задач, как правило, применяется *одночастичный метод Монте-Карло*,

когда осуществляется имитация движения одного электрона в пространстве волнового вектора \vec{k} в течение достаточно длительного времени. Это время зависит от многих факторов, в частности, требуемой точности, зонной структуры и учитываемых механизмов рассеяния.

Сложность применения к плазме элементов заключается в необходимости использования в общем случае многочастичного метода Монте-Карло, а следовательно, точность моделирования сильно зависит от числа частиц N^* . К сожалению, высокая адекватность результатов моделирования может достигаться лишь при достаточно точном задании зонной структуры материала и большом количестве носителей. Так, для одной из наиболее адекватных в настоящее время моделей (но не строгой!), основанной на *методе Монте-Карло частиц* (см. далее) и реализованной в программе DAMOCLES фирмы IBM [13], требуется десятки (от 10 до 100!) часов при расчете одной точки вольт-амперной характеристики (ВАХ) n -МОП-транзистора в двумерном случае на вычислительной системе с векторным процессором IBM 3090/600E (одной из лучших в то время). Комментарии, как говорится, излишни.

Таким образом, две строгие модели полуклассического подхода практически нереализуемы и являются результатом, по крайней мере, двух шагов и этапов приближений, если считать уравнение Лиувилля следствием "первого шага" для первой модели, а уравнения Гамильтона – для второй. В статистической физике показана эквивалентность указанных двух исходных формализмов при описании классических систем частиц. Эта эквивалентность по сути дела и является первопричиной отмеченного ранее согласования результатов по методу КУБ и методу Монте-Карло. Поэтому в литературе часто метод Монте-Карло рассматривается всего лишь как один из численных методов решения КУБ. Точнее в данном случае допустимо

* При "строгой" реализации $N \rightarrow \infty$, что, конечно же, нереально.

говорить, что он является "методом неявного решения КУБ" [14].

2.2. Иерархия приближений и исходных уравнений полуклассического подхода

Традиционными при построении моделей элементов микроэлектроники являются следующие физические допущения: 1) диэлектрическая и магнитная проницаемости постоянны и не зависят от координаты и времени в материале одного вида; 2) пренебрегается влиянием магнитного поля на электрическое. Оценка справедливости данных предположений приведена в [15]. С введением данных допущений из уравнений электромагнитного поля Максвелла остаются только два уравнения:

$$\nabla \vec{J}_{\text{плотн}} = 0; \quad (4)$$

$$\nabla \vec{D} = \rho, \quad (5)$$

где

$$\vec{J}_{\text{полн}} = \partial \vec{D} / \partial t + \vec{J}_{\text{проводн}}. \quad (6)$$

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad (7)$$

$$\vec{E} = -\nabla \varphi. \quad (8)$$

Здесь введены следующие обозначения: $\vec{J}_{\text{полн}}$, $\vec{J}_{\text{проводн}}$ – векторы плотности полного тока и тока проводимости; \vec{E} , \vec{D} – векторы напряженности электрического поля и индукции; ρ – плотность полного электрического заряда; φ – электростатический потенциал; ϵ – диэлектрическая проницаемость.

Для доопределения в модели двух величин ρ , $\vec{J}_{\text{проводн}}$ необходимо изначально использовать либо метод КУБ, либо метод Монте-Карло. К сожалению, даже с применением

описанных предположений реализация соответствующих моделей элементов практически невозможна. С целью преодоления отмеченных сложностей при построении моделей приборных структур на основе данных двух методов полуклассического подхода используются дальнейшие упрощения (огрубления по пространству и времени) и преобразования. Они, по сути дела, являются вынужденными вследствие изложенного. В результате может быть выведена иерархия приближений и соответствующих им исходных уравнений (моделей). Рассмотрим их.

Обычным при редукции систем уравнений (моделей), полученных первым методом КУБ является *приближение времени релаксации*, а для второго метода Монте-Карло – *объединение (группировка) носителей заряда в макрочастицы* (методы Монте-Карло частиц [9–12]).

В *приближении времени релаксации* предполагается, что интеграл столкновений (3) может быть представлен в виде [8]

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{cm} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (9)$$

где f_0 – равновесная функция распределения; τ – время релаксации, которое в общем случае зависит от v (или \vec{k}) и \vec{r} . Данное приближение обычно выполняется при небольших отклонениях f от f_0 , т.е. равновесных значений. Кроме того, традиционно предполагается независимость механизмов рассеяния, что позволяет записать для τ соотношение [8]

$$\frac{1}{\tau} = \sum_l \frac{1}{\tau_l}, \quad (10)$$

где τ_l – время релаксации для l -го механизма рассеяния. Зависимость τ от \vec{r} , как правило, не учитывается в явном виде, поэтому τ часто называется временем релаксации импульса.

Считается, что данное приближение может быть достаточно строго обосновано лишь при выполнении двух условий: если столкновения частиц упругие и если время рассеяния зависит только от угла рассеяния. Заметим, что для сложных законов дисперсии, например для Ge и Si дырочного типа проводимости, строгое введение понятия времени релаксации вызывает затруднения. *Прямые методы* на основе непосредственного решения КУБ не получили широкого распространения, за исключением простейших задач по расчету объемных свойств полупроводников, а именно: дрейфовой скорости, подвижности и др.

Для метода Монте-Карло ситуация иная. На начальном этапе развития данный метод, как правило, также использовался для расчета объемных свойств материалов. Качественный прорыв произошел после начала разработки *методов Монте-Карло частиц* для моделирования полупроводниковых приборов. Обзор ранних работ приведен в [10, 12]. В процессе использования данных методов описание движения электронов в реальном пространстве осуществляется с помощью их группировки в некоторые макрочастицы (в дальнейшем просто частицы) [10].

Методам Монте-Карло частиц свойствен ряд следующих наиболее серьезных недостатков: 1) часто они не имеют строгого обоснования; 2) достаточно адекватные результаты моделирования приборных структур, как правило, достигаются при относительно точном задании зонной структуры твердого тела и детальном знании скоростей большого количества механизмов рассеяния. К сожалению, модели для некоторых из них еще весьма далеки от совершенства; 3) в общем случае не известно какое количество частиц N будет достаточно для получения результатов требуемой точности.

В связи с этим для того, чтобы промоделировать электрические характеристики приборных структур с высокой степенью

адекватности, как правило, требуются огромные затраты вычислительных ресурсов ЭВМ (см. ранее). Тем не менее, с использованием методов Монте-Карло частиц получены важные научные результаты по анализу ряда относительно простых приборных структур, в частности диодов, транзисторов и некоторых других [9 – 14, 16, 17]. В настоящее время данные методы интенсивно совершенствуются [14, 17].

По изложенным причинам вместо *кинетического моделирования* с помощью отмеченных прямых методов и методов Монте-Карло частиц более широкое распространение при исследовании и расчете приборных структур микроэлектроники получили описываемые ниже базовые приближения и соответствующие им модели.

Дальнейшее использование приближения времени релаксации позволяет существенным образом упростить столкновительные члены $\{S_i\}$ и получить более простые моментные уравнения, составляющие основу известных макроскопических моделей. Заметим, что цепочка уравнений для макроскопических величин, являющаяся математически точным следствием кинетических уравнений, может быть получена после их домножения на соответствующие величины и интегрирования по зоне Бриллюэна. Сложность использования получаемых моментных уравнений, однако, аналогична сложности применения исходных уравнений. Более того, для новых уравнений характерен отмеченный недостаток ББГКИ уравнений. Поэтому при практическом использовании моментных уравнений осуществляется обрыв цепочки и вводится ряд упрощающих предположений, что и составляет суть того или иного макроскопического приближения.

К счастью, в большом числе случаев описание ЭДП в элементах с помощью функций распределения является излишне детальным, поэтому часто достаточно применять уравнения переноса, в которых присутствуют такие важные

макроскопические величины, как концентрация частиц, плотность тока, тепловой поток, средняя энергия носителей и др.

Так, уравнения цепочки для нулевого (концентрации n_i), первого (плотности момента \bar{p}_i), второго (плотности энергии w_i) моментов функции распределения для i -го сорта носителей заряда имеют вид [18]:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(\bar{v}_i n_i) = \left(\frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_{cm}; \quad (11)$$

$$\frac{\partial \bar{p}_i}{\partial t} + \nabla(\bar{v}_i \bar{p}_i) = en_i \bar{E} - \nabla(n_i k_B T_i) + \left(\frac{\partial \bar{p}_i}{\partial t} \right)_{cm}; \quad (12)$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla(\bar{v}_i w_i) = en_i \bar{v}_i \bar{E} - \nabla(\bar{v}_i n_i k_B T_i) - \nabla \bar{q}_i + \left(\frac{\partial w_i}{\partial t} \right)_{cm}, \quad (13)$$

где k_B – постоянная Больцмана; T_i – эффективная температура i -го сорта носителей; e – элементарный (положительный) заряд; \bar{v}_i – средняя скорость; \bar{q}_i – вектор потока тепла; $\left(\frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_{cm}$,

$\left(\frac{\partial \bar{p}_i}{\partial t} \right)_{cm}$, $\left(\frac{\partial w_i}{\partial t} \right)_{cm}$ – интегралы от столкновительных членов

исходного КУБ по импульсному пространству, умноженных перед интегрированием на 1, \bar{p}_i и ϵ_i (ϵ_i – закон дисперсии) с соответствующим нормировочным коэффициентом. Задание этих интегралов в приближении времени релаксации, как правило, не вызывает затруднений. Уравнение (11) – закон сохранения числа частиц (заряда, если (11) умножить на e), уравнение (12) – закон сохранения момента, уравнение (13) – закон сохранения энергии (все для i -го сорта).

Легко заметить, что три уравнения (11) – (13) содержат семь переменных (шесть моментов), а именно: n_i , \bar{v}_i , \bar{p}_i , \bar{E} , T_i , w_i , q_i . Следовательно, система уравнений является незамкнутой.

Напряженность электрического поля \vec{E} определяется согласно уравнению Пуассона (5) (с учетом (7)). Используя какие-либо дополнительные соображения, необходимо связать моменты более высокого порядка, входящие в (11) – (13), с моментами более низкого порядка. Это позволяет замкнуть систему (11) – (13). Используемые при этом физические предположения и являются сутью того или иного приближения. Именно в этом случае решение получаемой системы уравнений оказывается намного проще чем уравнений исходной базовой непрерывной кинетической модели.

При макроскопическом описании плазмы полупроводниковых приборов выделяют *три базовых приближения*, а именно [3, 19]: *гидродинамическое, квазигидродинамическое и диффузионно-дрейфовое*. Они соответствуют случаям: в гидродинамической исходной модели без изменений используются все три основных уравнения (11) – (13); в квазигидродинамической – (11) и (13); в диффузионно-дрейфовой – (11). Рассмотрим эти приближения.

Для замыкания уравнений (11) – (13) в гидродинамическом приближении применяются следующие основные физические предположения [20]: 1) частота парных соударений ν является наибольшей из всех частот, т.е. $\nu \gg \max \{ \nu_p, \nu_E \}$, ν_p , ν_E – импульсная и энергетическая частоты соударений, причем обычно $\nu_p \gg \nu_E$; вследствие этого функции распределения являются сдвинутыми максвеловскими (или фермиевскими); 2) квадратичный изотропный закон дисперсии $\varepsilon_i = p^2 / m_i$, где m_i – эффективная масса носителей i -го сорта. Ситуация, описываемая п.1), называется случаем *полного* (или импульсного) *контроля*, когда парные взаимодействия носителей контролируют не только перераспределение энергии, но и перераспределение импульса. Данный случай удобно также описать с помощью характеристических длин (масштабов), а именно: $\lambda_{ct} \ll \min \{ \lambda_p, \lambda_E, L_{хар} \}$, где λ_{ct} – характерная длина

парных столкновений, λ_p – длина релаксации импульса, λ_ε – длина энергетической релаксации.

В гидродинамическом приближении уравнения, замыкающие систему (11) – (13), например, имеют следующий вид [18]:

$$\dot{p}_i = m_i n_i \dot{v}_i; \quad (14)$$

$$w_i = \frac{3}{2} n_i k_B T_i + \frac{m_i}{2} n_i v_i^2; \quad (15)$$

$$\vec{q}_i = -K_i \nabla T_i, \quad (16)$$

где K_i – теплопроводность газа носителей в i -ой подзоне. В (16) T_i предполагается не тензорной, а скалярной величиной. Заметим также, что строго говоря, в соответствии с указанным физическим предположением 1) $\vec{q}_i = 0$. Плотность тока \vec{j}_i может быть определена согласно соотношению

$$\vec{j}_i = en_i \dot{v}_i. \quad (17)$$

Задание столкновительных членов осуществляется с использованием понятий времен релаксации импульса τ_p и энергии τ_ε (см. [18] для случая двух долин).

В результате исключений из (11) – (13) с помощью (14) – (17) для каждого сорта носителей остаются три уравнения гидродинамического приближения относительно неизвестных: (n_i, \vec{p}_i, w_i) , (n_i, \dot{v}_i, T_i) , (n_i, \vec{j}_i, w_i) , (n_i, \dot{v}_i, w_i) и других возможных основных переменных. Вид этих уравнений часто приводится в литературе [9, 18, 20, 21] и зависит от замыкающих уравнений типа (14) – (17).

В квазигидродинамическом приближении используется следующее основное физическое допущение [20]: для частот справедливо соотношение $v_\varepsilon \ll v \ll v_p$ (для характеристических масштабов: $\lambda_p < \lambda_{cm} \ll \min \{ \lambda_\varepsilon, L_{хар} \}$);

вследствие этого симметричные части функций распределений являются максвелловскими (или фермиевскими), а антисимметричные части функций распределения – малы.

В данном случае *неполного* (или энергетического) *контроля* парные столкновения будут влиять на распределение энергии между носителями, но никак не повлияют на рассеяние носителя с изменением направления импульса. В этом приближении остаются уравнения (11) и (13). Их удобный вид в случае квадратичного изотропного закона дисперсии и при отсутствии вырождения приведен в [9, 20, 21].

Сравнительный анализ гидродинамического и квазигидродинамического приближений показывает [19, 20], что основные условия применимости первого являются более жесткими по сравнению со вторым. На этом основании делается вывод, что полный контроль в примесных полупроводниках практически не реализуется [20], а ситуация, описываемая в рамках квазигидродинамического приближения, более типична для ЭДП полупроводниковых приборов [9]. Здесь, однако, необходимо сделать несколько важных замечаний: 1) полученный в указанных предположениях *полный набор* уравнений и соотношений фактически не используется при дальнейшем построении модели элемента, а применяются, как правило, лишь основные из них; 2) целый ряд результатов не зависит от степени контроля [20]; 3) основные уравнения гидродинамического приближения включают уравнения квазигидродинамического, а следовательно, более общие в математическом смысле (см. далее); 4) многое зависит от конкретных условий замыкания и согласуемых с экспериментом параметров (в гидродинамическом приближении их, как правило, больше). По указанным причинам гидродинамическое приближение достаточно часто применяется при описании ЭДП полупроводниковых приборов и структур.

В диффузионно-дрейфовом приближении предполагается, что для характерных масштабов справедливо соотношение [3, 9]: $L_{хар} > \{\lambda_p, \lambda_e\}$. В данном случае остаются только закон сохранения числа частиц относительно концентрации (11) и замыкающее уравнение для плотности тока. В случае квадратичного изотропного закона дисперсии и при отсутствии вырождения они принимают следующий вид [22]:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{e} \nabla \bar{j}_i = -R_i; \quad (18)$$

$$\bar{j}_i = en_i \mu_i \bar{E} - e \varphi_T \mu_i \nabla n_i \quad (19)$$

где R_i – превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации для i -го сорта носителей; φ_T – температурный потенциал, равный $k_B T / e$; T – температура кристаллической решетки; μ_i – подвижность i -го сорта носителей.

Описанные базовые приближения и соответствующие им исходные уравнения и порождают основные известные классы моделей приборных структур микроэлектроники полуклассического подхода [2 – 5]. Важно заметить, что здесь в целом имеет место соответствие рассмотренных уравнений иерархии уравнений статистической теории макроскопических открытых систем [23]. Причем мы описывали иерархию уравнений сверху вниз, т.е., как правило, с более к менее высокой степени адекватности описания физических процессов в элементах.

2.3. Классы моделей

Как следует из предыдущего рассмотрения, применение первого метода синтеза [1] приводит, в сущности, к построению классов *исходных моделей*. Это связано с тем, что в каждом конкретном случае возможны отличия в моделях, вызванные следующими

факторами: 1) количество сортов носителей заряда зависит от характера исследуемой плазмы; 2) могут использоваться разные уравнения замыкания; 3) может быть важен учет магнитного поля; 4) граничные условия зависят от анализируемой приборной структуры и др. В целом, процесс синтеза моделей в рамках первого кардинального метода может быть схематично представлен, как показано в табл. 1 [2 – 5]. В ней отражено возможное подобие моделей, получаемых в рамках полуклассического и квантовомеханического подходов [2, 3].

Таблица 1

Процесс синтеза моделей элементов в рамках первого метода

Уровень	Составляющие
Общий подход	1) полуклассический; 2) квантовомеханический
Метод	1) кинетических уравнений; 2) Монте-Карло (имитация движения частиц)
Базовое приближение	1) времени релаксации; 2) группировка носителей в макрочастицы; 3) гидродинамическое; 4) квазигидродинамическое; 5) диффузионно-дрейфовое
Основной класс	1) кинетические модели; 2) методы Монте-Карло частиц; 3) гидродинамические модели; 4) квазигидродинамические модели; 5) диффузионно-дрейфовые модели; 6) комбинированные модели

В данной главе рассмотрим основные классы моделей полуклассического подхода. Методы Монте-Карло частиц часто не совсем точно интерпретируются как численные методы решения кинетического уравнения Больцмана, поэтому рядом авторов относятся к кинетическим моделям [9]. По-видимому, это не верно вследствие изложенного ранее. Кроме того, методы Монте-Карло частиц часто характеризуются достаточно сильно отличающимися допущениями, используемыми при объединении носителей заряда в макрочастицы и другими [10, 12, 14], а как результат – адекватностью моделирования. По этим причинам в рамках кинетического моделирования будем выделять два класса моделей: *кинетические модели*, основанные на прямых методах решения КУБ, и *методы Монте-Карло частиц*. Эти два класса моделей формируют верхние иерархические уровни моделей полуклассического подхода. Кинетические модели, к сожалению, не получили широкого распространения при моделировании элементов. В то же время методы Монте-Карло частиц интенсивно исследуются и развиваются, однако отмеченные недостатки приводят к большей целесообразности для широкого применения для анализа и проектирования приборных структур микроэлектроники описываемых далее классов моделей.

Уже отмечалось, что количество сортов носителей в плазме элемента, т.е. в каждом конкретном случае, может быть различным, например, электроны и дырки, электроны разных долин, "легкие" и "тяжелые" дырки и др. Увеличение их числа обычно приводит к существенному усложнению задачи. Последнее хотя бы связано со следующими физическими факторами. Так, необходимо различать времена между столкновениями носителей одного и того же и разных сортов. В результате число предельных случаев может заметно возрастать, например, в зависимости от соотношения эффективных масс носителей рассматриваемых в задаче типов. В случае существенного различия эффективных масс (например,

электронов и дырок) времена между столкновениями носителей одного сорта обычно относительно малы. Поэтому однозначным является представление о температурах сортов носителей заряда $\{T_i\}$, которые, как правило, не равны между собой и не совпадают с температурой кристаллической решетки T [19]. Следовательно, даже в случае обычных двух сортов носителей заряда, т.е. электронов и дырок, необходимо, строго говоря, рассматривать три подсистемы: 1) электроны; 2) дырки и 3) фононы. Таким образом, в гидродинамическом приближении задача становится сверхсложной – необходимо решать девять основных уравнений типа (11) – (13).

По изложенной причине, как правило, вводятся дополнительные физические допущения, по крайней мере, относительно фононной системы. Так, традиционно полагается равновесность фононной системы с температурой решетки T , постоянной по всему элементу (температурой термостата $T = const$). В данном предположении достаточно общий вид уравнений гидродинамической модели ЭДП приборных структур приведен в работе [24]. Заметим, что исходные уравнения гидродинамической модели (11) – (13) были модернизированы на такие важные случаи, как гетероструктуры, непараболические законы дисперсии и др.

Достаточно общие системы исходных уравнений гидродинамического приближения предложены в работах [3, 25, 26] для случая, когда температура решетки меняется по приборной структуре. В данных исходных уравнениях, однако, третья подсистема (решетка) описывается приближенно с помощью уравнения теплопроводности для температуры решетки. Наиболее существенные отличия в уравнениях статьи [25] и работ [3, 26] заключается в используемом соотношении для плотности мощности P в уравнении теплопроводности. В частности, в [25] плотность мощности выражается через новые плотности энергии и интеграл столкновений, что приводит к

необходимости привлекать дополнительные допущения. Относительно простой вид уравнений получается лишь для одного типа носителей [25]. Более удобный и простой вид выражения для плотности мощности приведен в работах [3, 26].

В результате основой *обобщенной гидродинамической модели* ЭДП приборных структур микроэлектроники может являться следующая система уравнений [3, 26]:

$$-\nabla\epsilon\nabla\varphi = q(p - n + N_d^+ - N_a^-); \quad (20)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q}\nabla\bar{J}_n = -R; \quad (21)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q}\nabla\bar{J}_p = -R; \quad (22)$$

$$\bar{J}_n + n\tau_{pn} \frac{d}{dt} \left(\frac{\bar{J}_n}{n} \right) = -q\mu_n n \nabla \left(\varphi + \tilde{A}\Delta\tilde{V}_g - \frac{k_B T_n}{q} \right) + qD_n \nabla n; \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \bar{J}_p + p\tau_{pp} \frac{d}{dt} \left(\frac{\bar{J}_p}{p} \right) = & -q\mu_p p \nabla \left(\varphi - (1 - \tilde{A})\Delta\tilde{V}_g + \frac{k_B T_p}{q} \right) - \\ & - qD_p \nabla p; \end{aligned} \quad (24)$$

$$\frac{\partial(nW_n)}{\partial t} + \nabla\bar{S}_n = \bar{E}\bar{J}_n - RW_n - n \left(\frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{wn}} \right); \quad (25)$$

$$\frac{\partial(pW_p)}{\partial t} + \nabla\bar{S}_p = \bar{E}\bar{J}_p - RW_p - p \left(\frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{wp}} \right); \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \rho_T c \frac{\partial T}{\partial t} = & \nabla(k\nabla T) + (\bar{J}_n + \bar{J}_p)(-\nabla\varphi) + \\ & + \bar{J}_n(-\nabla(A\Delta V_g)) + \bar{J}_p \nabla((1 - A)\Delta V_g) + R(E_{g0} - q\Delta V_g) \end{aligned} \quad (27)$$

с замыкающими уравнениями [3, 24]

$$\bar{S}_n = -K_n \nabla T_n - (W_n + k_B T_n) \frac{\bar{J}_n}{q}, \quad (28)$$

$$\bar{S}_p = -K_p \nabla T_p + (W_p + k_B T_p) \frac{\bar{J}_p}{q}, \quad (29)$$

$$W_n = \frac{3}{2} k_B T_n + \frac{1}{2} m_n v_n^2, \quad (30)$$

$$W_p = \frac{3}{2} k_B T_p + \frac{1}{2} m_p v_p^2. \quad (31)$$

В (20) – (31) использованы следующие обозначения: n, p – концентрации электронов и дырок; \bar{J}_n, \bar{J}_p – векторы плотности электронного и дырочного токов; R – превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации; N_d^+, N_a^- – концентрации ионизированных доноров и акцепторов; q – величина заряда электрона; μ_n, μ_p – подвижности электронов и дырок; D_n, D_p – коэффициенты диффузии электронов и дырок; T_n, T_p, T – температуры электронов, дырок и решетки; $\tilde{A}, \Delta \tilde{V}_g$ – параметры, описывающие совместное влияние эффектов сильного легирования; ρ_T – плотность тела; c – удельная теплоемкость тела; K – коэффициент теплопроводности; A – коэффициент асимметрии в сужении ширины запрещенной зоны (ШЗЗ); ΔV_g – величина ШЗЗ; E_{g0} – ШЗЗ собственного полупроводника; W_n, W_p – средние энергии электронов и дырок; W_{n0}, W_{p0} – тепловые энергии носителей в равновесии; \bar{S}_n, \bar{S}_p – электронные и дырочные потоки энергии; v_n, v_p – величины средних скоростей электронов и дырок; τ_{pn}, τ_{pp} – времена релаксации момента для электронов и дырок; τ_{wn}, τ_{wp} – времена релаксации энергии для электронов и дырок; $m_n,$

m_p – эффективные массы электронов и дырок; K_n, K_p – коэффициенты теплопроводности электронов и дырок, задаваемые с помощью закона Видемана – Франца [8].

Система уравнений (20) – (27) при $\Delta\tilde{V}_g \rightarrow 0, \Delta V_g \rightarrow 0$ и $T = const$ ($P = [(\bar{J}_n + \bar{J}_p)(-\nabla\phi) + RE_{g0}] \rightarrow 0$, где P – плотность мощности в случае неучета эффектов сильного легирования) переходит в систему гидродинамических уравнений работы [24]. Эти системы уравнений и являются основой ряда возможных исходных моделей класса *гидродинамических моделей*.

Предложенная система уравнений [3, 26] удобна, так как с ее помощью после введения дополнительных допущений получается иерархия исходных моделей [3, 27], включающая и известные достаточно общие модели других более низких уровней, в частности квазигидродинамические и диффузионно-дрейфовые модели.

Достаточно общая система уравнений [28, 29] исходной модели класса *квазигидродинамических моделей* получается при следующих дополнительных к уже отмеченным для гидродинамической модели [24] допущениях [3, 27]: времена релаксации момента $\tau_{pn} \rightarrow 0, \tau_{pp} \rightarrow 0$, что полностью согласуется с основным физическим допущением квазигидродинамического приближения. Модели данного класса в настоящее время применяются для учета часто важных в приборных структурах с субмикронными размерами на ряде полупроводников (например, с относительно малыми эффективными массами типа GaAs) эффектов, а именно: разогрев ЭДП, превышение скорости носителей заряда над скоростью насыщения (всплеск скорости) и др.

Общая система уравнений *диффузионно-дрейфовой (тепловой) модели* [3, 30, 31] получается при следующих дополнительных к квазигидродинамической модели допущениях: равенство всех

температур $T_n = T_p = T$, а $T \neq const$; постоянство потоков энергии $\bar{S}_n = \overline{const}$, $\bar{S}_p = \overline{const}$

$$\left[\bar{E}\bar{J}_n - RW_n - n \left(\frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{wn}} \right) \right] \rightarrow 0,$$

$$\left[\bar{E}\bar{J}_p - RW_p - p \left(\frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{wp}} \right) \right] \rightarrow 0.$$

В результате в нее входят уравнения (20) – (22), (27), а также следующие выражения для плотностей токов:

$$\bar{J}_n = -q\mu_n n \nabla (\varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g - k_B \xi T / q) + qD_n \nabla n; \quad (32)$$

$$\bar{J}_p = -q\mu_p p \nabla (\varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g + k_B \xi T / q) - qD_p \nabla p, \quad (33)$$

причем для коэффициентов диффузии справедливо соотношение Эйнштейна, а $\xi = 0,5$ [3, 30, 31]. Допустимо использовать и другие значения, в частности $\xi = 1$. Справедливости ради отметим, что значение величины данного коэффициента не столь существенно для приборных структур микроэлектроники, так как вклад члена, содержащего ∇T , как правило, пренебрежимо мал.

Если в описанной исходной системе уравнений предположить, что $T = const$ ($P \rightarrow 0$), получаются хорошо известные уравнения [3 – 5], в частности, (20) – (22) с выражениями для плотностей токов:

$$\bar{J}_n = -q\mu_n n \nabla (\varphi + \tilde{A} \Delta \tilde{V}_g) + q\varphi_T \mu_n \nabla n; \quad (34)$$

$$\bar{J}_p = -q\mu_p p \nabla (\varphi - (1 - \tilde{A}) \Delta \tilde{V}_g) - q\varphi_T \mu_p \nabla p, \quad (35)$$

где $\varphi_T = k_B T / q$. Данная система уравнений обычно применяется в *диффузионно-дрейфовых моделях*, в которых производится учет эффектов сильного легирования с помощью эмпирических моделей [3]. В случае неучета эффектов сильного

легирования ($\Delta\tilde{V}_g = 0$) фундаментальная система уравнений (ФСУ) физики полупроводниковых приборов (20) – (22), (34), (35) принимает традиционный вид [3 – 5]. В целом, диффузионно-дрейфовые модели в настоящее время наиболее широко используются при исследовании самых разнообразных приборных структур микроэлектроники.

Исходной моделью того или иного класса будем называть рассмотренные соответствующие основные уравнения с дополнительными соотношениями, включая условия замыкания, граничные и начальные условия.

Несколько специфическое место занимает класс *комбинированных моделей*. Это связано с тем, что его нельзя поставить в самый низ рассматриваемой иерархии моделей. Сущность комбинированных моделей состоит в использовании набора исходных уравнений различных классов моделей, как правило, для отличающихся групп носителей. Разбиение на группы можно вести по разным признакам [9]: по типу (сорт) носителей; по пространственному расположению; по энергиям и др. В связи с этим, понятно, что степень адекватности моделей данного класса не может рассматриваться как наименьшая. В зависимости от грамотности разбиения на группы носителей она может варьироваться от наименьшей, характерной для применяемых уравнений модели самого низкого уровня адекватности моделирования, до наибольшей, соответствующей уравнениям модели верхнего иерархического уровня. Заметим, что при комбинировании моделей могут привлекаться и другие подходы, т.е. не обязательно на основе разбиения по группам носителей.

Кроме описанных основных классов моделей можно ввести и другие (дополнительные) классы моделей, например, псевдогидродинамические [9], дрейфовые [32] и др. Однако мы не будем их выделять, так как уже отмечалось, что в рамках одного основного класса моделей уравнения могут отличаться

вследствие использования дополнительных (не столь кардинальных с физической точки зрения) допущений. Часто такие действия могут интерпретироваться как результат применения третьего метода синтеза моделей (см. далее). Иногда такие модели могут быть отнесены к комбинированным моделям.

К сожалению, полные системы уравнений, составляющие исходные модели, не могут быть решены традиционными методами математической физики. По этим причинам используются и два других метода синтеза моделей [1]. Их привлечение приводит к существенному расширению указанных классов моделей.

Рассмотрим *второй метод синтеза моделей* приборных структур на основе использования различных модельных зависимостей для параметров исходных моделей. В его рамках применяется как полуклассический, так и квантовомеханический подходы к описанию полупроводников. При этом возможны *два пути синтеза моделей* [2 – 5]: 1) *строгий*, состоящий в создании гибридных моделей; 2) *феноменологический*. В первом случае модель более высокого уровня используется для определения некоторых параметров в областях, где нарушается справедливость менее адекватной базовой модели [2–5]. В основе второго пути синтеза моделей лежит привлечение смыслового физического содержания параметра [2 – 5]. Данный путь с успехом использовался при создании классических теорий полупроводниковых приборов в рамках диффузионно-дрейфового приближения и синтезе численных моделей различных классов.

С привлечением *третьего метода синтеза* на основе аппроксимаций о характере поведения искомым функций удастся построить практически реализуемые модели элементов микроэлектроники из рассмотренных моделей, синтезированных в результате применения первого и второго методов. По этой

причине данных три метода синтеза могут часто интерпретироваться и в качестве трех стадий процесса построения моделей [2 – 5].

Анализ известных моделей приборных структур позволяет представить процесс их синтеза в рамках третьего метода, как схематично показано в табл. 2 [2 – 5].

Таблица 2

Процесс синтеза моделей элементов в рамках третьего метода

Уровень	Составляющие
Среда	1) дискретная; 2) непрерывная
Способ построения	1) физический; 2) формальный
Вид модели	1) распределенная; 2) с сосредоточенными параметрами
Разновидность модели	1) электрическая; 2) физико-топологическая; 3) макромодель

Выделяются два принципиально различных типа представления среды: дискретная (дискретные модели) и непрерывная (непрерывные модели). При этом возможно два способа построения моделей: физический и формальный. Физический для нас представляет больший интерес вследствие изложенного ранее и является эффективным инструментом построения моделей. В соответствии с типом среды обычно выделяются и два вида моделей: распределенные и с сосредоточенными параметрами. Первые, как правило, применяются в рамках дискретного представления о среде. Вторые – в рамках непрерывного. Исключением, по-видимому, являются модели,

использующие комбинацию того и другого представления. В рамках указанных видов моделей можно выделить их три возможных разновидности, а именно: электрические, физико-топологические и макромоделли.

Приведем определения электрической и физико-топологической моделей, представляющих для нас наибольший интерес, согласно работам [4, 5].

Определение. Физико-топологической моделью будем называть модель элемента, параметрами которой являются технологические и электрофизические параметры.

В литературе используется вместо "технологические параметры" эквивалентный в данном случае термин – "конструктивно-технологические параметры".

Определение. Электрической моделью на уровне эквивалентных схем будем называть модель элемента, аналоговыми компонентами которой являются диоды, источники тока, напряжения, сопротивления, емкости и индуктивности или их сочетания.

В принципе могут входить и простые элементы, например, транзисторы, однако при моделировании они представляются отмеченными компонентами.

Таким образом, проведенное рассмотрение позволяет показать, что два общих подхода к описанию явлений переноса и выделенных три основных метода синтеза моделей и допускают осуществить систематизацию моделей приборных структур микроэлектроники – объектов физики открытых систем.

2.4. Пределы применимости подходов

В литературе много внимания уделяется оценке справедливости применяемых приближений. Тем не менее, проведенный анализ еще весьма далек от завершения. Пойдем по "пути наименьшего

сопротивления". Рассмотрим сначала уравнения, вызывающие наименьшее количество возражений (ограничений).

В системе уравнений обобщенной гидродинамической модели – это уравнение Пуассона (20), уравнения непрерывности электронов (21) и дырок (22). Детальный анализ выполнимости условия квазистационарности электромагнитного поля, исходя из уравнений Даламбера для скалярного и векторного потенциалов, приводит к выводу, что данное приближение, приводящее к уравнению Пуассона, справедливо для полупроводниковых активных областей вплоть до частот около 100 ГГц [33]. Уравнения непрерывности (21), (22) также носят достаточно общий характер и, по существу, являются следствием первого уравнения Максвелла (4), т.е. закона сохранения заряда, если представить его покомпонентно для электронов и дырок. При этом должно быть применимо понятие "концентрации носителей", так как речь идет о макроскопическом описании процессов. Таким образом, основные ограничения, как правило, возникают далее при конкретизации соотношений для плотностей токов, плотности полного электрического заряда и R . Для этого необходимо детальное знание процессов, происходящих при транспорте носителей заряда, в частности, механизмов рассеяния, включая процессы рекомбинации-генерации, и др.

Достижимо ли это в рамках полуклассического подхода? Для ответа на этот вопрос необходимо, прежде всего, проанализировать ключевое уравнение рассматриваемого подхода – кинетическое уравнение Больцмана (1). Данное уравнение может быть получено из более строгого уравнения Лиувилля – фон Неймана при ряде физических предположений. К основным из них относятся [33, 34]: 1) взаимодействие между носителями предполагается слабым; 2) справедлива зонная теория и понятие эффективной массы; 3) допустимо классическое описание пролета носителей заряда после

столкновений; 4) только точечные соударения рассматриваются; 5) пренебрегается взаимодействием носитель-носитель в интеграле столкновений; 6) вероятность рассеяния не зависит от внешнего поля; 7) газ носителей заряда невырожден. Ясно, что заранее оценить справедливость всего комплекса отмеченных физических допущений для той или иной конкретной приборной структуры и соответствующих управляющих воздействиях не представляется возможным даже для базовой непрерывной кинетической модели. Возможны лишь приближенные весьма грубые оценки.

Поэтому далее рассмотрим только предельные оценки допустимого использования основных подходов. Так, оценка применимости того или иного базового приближения может быть получена на основе указанных соотношений для характерных масштабов. С этой целью необходимо использовать хорошо известные выражения для фундаментальных длин:

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{m v_T}; \quad (36)$$

$$\lambda_p = v_T \tau_p; \quad (37)$$

$$\lambda_\varepsilon = v_T \sqrt{\tau_p \tau_\varepsilon}, \quad (38)$$

где v_T – тепловая скорость; \hbar – постоянная Планка, деленная на 2π .

Используя формулу для длины волны де Бройля (36) можно оценить диапазоны применимости полуклассического и квантовомеханического подходов. Для кремния Si и арсенида галлия GaAs при комнатной температуре $\lambda_B(\text{Si}) \approx 12 \text{ нм}$, а $\lambda_B(\text{GaAs}) \approx 25 \text{ нм}$. Следовательно, предел применимости полуклассического подхода при комнатной температуре можно

оценить следующим образом: $L_{хар} \geq 0,01 \text{ мкм}$ (для Si) и $L_{хар} \geq 0,03 \text{ мкм}$ (для GaAs).

На основе формул (37) и (38) допустимо оценить диапазон справедливости базовых приближений полуклассического подхода. Однако мы не будем это делать, так как многое зависит от конкретных механизмов рассеяния носителей заряда и некоторых других факторов.

Здесь приведем лишь часто встречающиеся оценки пределов применимости диффузионно-дрейфового приближения [15, 32, 35]: 1) до частот 10^{12} Гц; 2) для $L_{хар}$, больших нескольких сотых микрометра; 3) до градиентов концентраций примесей в 10^{24} см^{-4} ; 4) до плотностей токов 10^6 А/см^2 . Данные оценки должны рассматриваться как очень оптимистические. Скорее они могут быть отнесены к наиболее строгим макроскопическим приближениям в рамках полуклассического подхода в свете изложенного ранее (в особенности для $L_{хар}$). Более реальными, по-видимому, являются приведенные в [2, 3] для кремния при комнатной температуре целесообразные диапазоны применимости основных подходов: 1) квантовомеханический – $L_{хар} \leq 0,01 \text{ мкм}$; 2) полуклассический* – $0,01 \leq L_{хар} \leq 0,1 \text{ мкм}$; 3) макроскопический (диффузионно-дрейфовое приближение) – $L_{хар} \geq 0,1 \text{ мкм}$. Для арсенида галлия и полупроводников с более легкими эффективными массами по сравнению с кремнием численные значения необходимо увеличить ориентировочно в 2 – 5 раз.

В заключение отметим, что ситуация еще более усложняется при анализе адекватности той либо иной конкретной модели в рамках описанных приближений и классов. Этот вопрос будет более подробно рассматриваться в следующей главе,

* Имеются в виду модели повышенной по сравнению с диффузионно-дрейфовыми моделями адекватности моделирования.

посвященной проблемам и принципам численного моделирования приборных структур микроэлектроники.

Список литературы к главе 2

1. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- наноэлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34 – 37.
2. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 5 . С. 3 – 9.
3. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн.: БГУ, 1999. 189 с.
4. Абрамов И.И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем": Учеб. пособие. Мн.: БГУ, 1999. 92 с.
5. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
6. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М., Л.: Гостехиздат, 1946. 120 с.
7. Гуров К.П. Основания кинетической теории (метод Боголюбова). М.: Наука, 1966. 352 с.
8. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.
9. Рыжий В.И., Баннов Н.А. Математическое моделирование субмикронных элементов интегральных схем: состояние и проблемы // Микроэлектроника. 1987. Т.16, №6. С.484 – 496.
10. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.

11. Реклайтис А.С., Мицкявичюс Р.В. Метод Монте-Карло в физике полупроводников. М.: Знание, 1988. 32 с.
12. Jacoboni C., Lugli P. The Monte Carlo method for semiconductor device simulation. Wien, New York: Springer-Verlag, 1989. 344 p.
13. Laux S.E., Fischetti M.V., Frank D.J. Monte Carlo analysis of semiconductor devices: The DAMOCLES program // IBM J. Res. Develop. 1990. V. 34, N4. P.466 –494.
14. Kosina H., Nedjalkov M., Selberherr S. Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation // IEEE Trans. 2000. V. ED-47, N10. P.1898 – 1908.
15. Гаврилов О.Т., Тиходеев Ю.С. Основные ограничения макроскопического рассмотрения процессов в полупроводниковых приборах // Электронная техника. Сер. 2. Полупроводниковые приборы. 1973. Вып. 1. С.61 – 71.
16. Борздов В.М., Комаров Ф.Ф. Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Мн.: БГУ, 1999. 235 с.
17. Сидоров А.А., Вьюрков В.В., Орликовский А.А. Применение метода Монте-Карло для моделирования кремниевых полевых нанотранзисторов // Микроэлектроника. 2004. Т. 33, №4. С.243 – 255.
18. Bløtekjær K. Transport equations for electrons in two-valley semiconductors // IEEE Trans. 1970. V. ED-17, N 1. P.38 – 47.
19. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1990. 688 с.
20. Басс Ф.Г., Гуревич Ю.Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975. 400 с.
21. Кокин А.А., Толстихин В.И. О моделировании процессов переноса в монополярных полупроводниковых структурах с

субмикронными размерами // Микроэлектроника. 1984. Т. 13, вып. 1. С. 24 – 40.

22. Van Roosbroeck W. Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors // Bell System Techn. J. 1950. V. 29. P.560 – 607.

23. Климонтович Ю.Л. Турбулентное движение и структура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем. М.: Наука, 1990. 320 с.

24. A new discretization strategy of the semiconductor equations comprising momentum and energy balance / A. Forghieri, R. Guerrieri, P. Ciampolini, A. Gnudi, V. Rudan, G. Baccarani // IEEE Trans. 1988. V. CAD-7, N 2. P. 231 – 241.

25. Wang C.T. A new set of semiconductor equations for computer simulation of submicron devices // Solid-State Electron. 1985. V. 28, N 8. P. 783 – 788.

26. Abramov I.I. A new system of equations for submicron VLSI and ULSI device simulation // The Third International Seminar on Simulation of Devices and Technologies. Obninsk, 1994. P. 21 – 22.

27. Abramov I.I. Hierarchy of models for small semiconductor device simulation // In: Physics, chemistry and application of nanostructures. Minsk, 1995. P. 257 – 259.

28. Cook R.K. Numerical simulation of hot-carrier transport in silicon bipolar transistors // IEEE Trans. 1983. V. ED-30, N 9. P. 1103 – 1110.

29. Бубенников А.Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. М.: Высш. шк., 1989. 320 с.

30. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Многомерное численное моделирование элементов интегральных схем с совместным учетом эффектов сильного легирования, саморазогрева и температуры окружающей среды // Электронное моделирование. 1991. Т. 13, № 4. С. 60 – 64.

31. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Многомерные физические процессы в элементах и фрагментах кремниевых СБИС // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 2. С. 32 – 36.
32. Кремлев В.Я. Физико-топологическое моделирование структур элементов БИС. М.: Высш. шк., 1990. 144 с.
33. Process and device modeling / Ed. by W.L. Engl. Amsterdam: Elsevier Science Publ., 1986. 462 p.
34. Selberherr S. Analysis and simulation of semiconductor devices. Wien, New York: Springer-Verlag, 1984. 294 p.
35. Носов Ю.Р., Петросянц К.О., Шилин В.А. Математические модели элементов интегральной электроники. М.: Советское радио. 1976. 304 с.

ГЛАВА 3

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В РАМКАХ ПОЛУКЛАССИЧЕСКОГО ПОДХОДА

В данной главе выделены и рассмотрены проблемы и принципы численного моделирования в рамках полуклассического подхода приборных структур микроэлектроники.

Можно выделить два качественно различных подхода к построению и реализации моделей отмеченных классов в рамках третьего метода синтеза [1, 2]. Это *метод региональных приближений и методы численного моделирования*. Возможна, конечно же, и их комбинация. Метод региональных приближений традиционно используется при построении известных упрощенных моделей и основывается на принципе суперпозиции [3, 4]. Учитывая обширную литературу по применению этого метода, в данной главе сосредоточим внимание на вопросах численного моделирования приборных структур микроэлектроники.

Анализ показывает, что с численным моделированием элементов связано четыре комплекса проблем, а именно [5]: 1) физические; 2) математические; 3) разработки программного обеспечения; 4) определяемые вычислительной техникой, оборудованием, идентификацией параметров моделей и заданием исходных данных. Рассмотрим эти проблемы и принципы моделирования, следуя в основном [5] с учетом произошедших перемен в анализируемой области.

3.1. Физические проблемы

Так как строгие методы полуклассического подхода практически нереализуемы, то традиционным стал переход к кинетическому

уравнению Больцмана (КУБ) [2]. Это упрощение может считаться "началом отсчета" своеобразной "системы координат" следующей (после неполноты описания) важной проблемы моделирования элементов ИС – *проблемы компромисса "адекватность-реализуемость" модели (AP-проблема)* [5]. С одной стороны, желательна наибольшая степень адекватности и универсальности модели. С другой стороны, хотелось бы иметь модель с приемлемой экономичностью, которая является количественной характеристикой реализуемости модели. Ранее [1] уже отмечалась противоречивость этих требований. Поэтому одной из ключевых проблем численного моделирования приборных структур и является достижение приемлемого для конкретного случая (случаев) компромисса между адекватностью, универсальностью и реализуемостью (экономичностью) модели.

Анализируя рассмотренные классы моделей [2], можно прийти к выводу, что численные (дискретные) модели верхних иерархических уровней обычно характеризуются большей адекватностью и, как правило, меньшей экономичностью, а часто вообще трудно реализуемы. При этом было видно, что даже для исходных моделей верхних иерархических уровней свойствен ряд по существу вынужденных физических предположений. В моделях же нижних иерархических уровней, в частности диффузионно-дрейфовых, используется много допущений. В связи с этим у неискушенного читателя может возникнуть естественный и простой вопрос: как тогда достигаются на практике результаты, характеризующиеся достаточной адекватностью и точностью? Ответить на него не просто.

Для ответа полезно привлечь понятие *"грубости модели"*, введенное А.А. Андроновым. Так, с математической точки зрения, то, что описано в [2], называется редукцией, т.е. сведением системы дифференциальных уравнений, содержащей

большое количество уравнений (неизвестных), к более простой системе уравнений, содержащей меньшее количество уравнений. Редуцированная система уравнений называется базовой, если она удовлетворяет следующим требованиям [6]: 1) система должна описывать основные черты изучаемого явления; 2) система должна содержать минимальное количество переменных и параметров; 3) система должна быть "грубой" по А.А. Андронову, т.е. при малом изменении параметров и небольшом расширении базовой системы уравнений решения должны меняться слабо. Вследствие физической обоснованности введенных предположений системы уравнений исходных моделей рассмотренных классов [2] должны удовлетворять основным требованиям базовой системы уравнений, т.е. характеризоваться определенной структурной устойчивостью или грубостью. Таким образом, *главная цель, которой необходимо добиваться при упрощении сложной системы уравнений и получении базовых моделей, – количество информации необходимо сократить, но не потерять при этом действительно ценную!* Именно это утверждение можно считать одним из основных принципов моделирования элементов.

Имеющийся опыт моделирования приборных структур микроэлектроники показывает, что исходные модели отмеченных классов и многие их следствия [2] действительно являются *базовыми моделями* в указанном выше смысле. С их помощью и были установлены (или подтверждены) основные физические закономерности функционирования самых разнообразных полупроводниковых приборов и структур, которые согласуются с многочисленными экспериментальными данными. Это очень важно!

Понятно, что применение той или иной модели производится в зависимости от цели моделирования и возможностей исследователя. Главной при этом является отмеченная АР-проблема. Она усугубляется тем, что ввиду большого

количества примененных приближений и допущений, иногда не осознаваемых, в общем случае нам неизвестна заранее точность используемой в каждом конкретном случае модели, а следовательно, неясна степень ее адекватности (*проблема оценки адекватности модели*). Заметим, что в [2] были даны лишь общие оценки для подходов. Настройка или "подгонка" параметров моделей на конкретные экспериментальные результаты, к сожалению, также в полной мере не отвечает на данный вопрос. Наиболее грамотный ответ на вопрос о степени адекватности модели может быть получен после ее одновременного сравнения с моделью заведомо более высокой адекватности моделирования и с экспериментальными данными. Хотя и это далеко не идеальный выход из положения.

Итак, оценка адекватности конкретных моделей осложняется следующими причинами [5, 7]: 1) наиболее адекватные кинетические модели и методы Монте-Карло – труднореализуемы; 2) применяется достаточно большое количество приближений и в общем случае неясна их корреляция; 3) нет полной уверенности в учете в модели всех наиболее важных факторов; 4) существуют неопределенности в зависимостях параметров моделей от различных факторов; 5) не простым является процесс идентификации параметров моделей; 6) имеются погрешности в задании исходных данных и др.

Причины 1 и 2 достаточно хорошо понятны из предыдущего рассмотрения.

Проанализируем причины 3 и 4. Действительно, в каждом конкретном случае теоретического исследования приборной структуры нет полной уверенности в учете всех важных факторов в модели. Это проистекает, прежде всего, из приближенного характера даже исходных уравнений для каждого класса моделей. Имеются неопределенности при задании граничных условий (*проблема граничных условий*). Многое также зависит от условий замыкания и других

вспомогательных соотношений (*проблема замыкания*), которые могут быть различны [2]. Хотя эти вопросы достаточно неплохо в настоящее время отработаны для диффузионно-дрейфовых моделей, однако, даже для них не всегда ясно все ли важные нюансы взаимодействия с окружающей средой учтены. Так, даже при использовании достаточно общих физических принципов при построении граничных условий на контактах и границах раздела, на практике, как правило, применяются дополнительные допущения. Например, при рассмотрении границ раздела двух сред в законе Остроградского – Гаусса часто полагается отсутствие поверхностного заряда. Разногласия могут вызвать условия замыкания в диффузионно-дрейфовых (тепловых) и квазигидродинамических (тепловых) моделях для плотности мощности. Для гидродинамических и квазигидродинамических моделей, методов Монте-Карло частиц сложности возникают при задании граничных условий на контактах. В гидродинамических моделях серьезные возражения вызывает условие замыкания для потока тепла (16) в [2]. В связи с чем даже предлагается использовать более строгое уравнение для третьего (и выше) момента функции распределения, несмотря на не менее сложную и в этом случае проблему замыкания [8]. В целом, в литературе дискуссию вызывает определенная несогласованность, связанная с эффективной массой, электронной температурой и потоком тепла в традиционных (только для электронов) гидродинамических моделях в случае непараболических зонных структур. Таким образом, возражения вызывают часто используемые законы Фурье и Видемана – Франца. Серьезный недостаток предлагаемых модификаций, однако, заключается в усложнении моделей, иногда существенном [8], даже для одного типа носителей – электронов. Более сложные соотношения выводятся и для плотностей токов в квазигидродинамическом приближении в условиях сильного электронно-дырочного рассеяния.

Значительные неопределенности могут также вносить зависимости параметров моделей от некоторых факторов (*проблема вспомогательных моделей и электрофизических параметров*). Наиболее удовлетворительна здесь опять же ситуация для диффузионно-дрейфовых моделей приборных структур, в частности на кремнии [3 – 5, 7]. Ситуация менее удовлетворительна для других материалов, а также при описании свойств поверхностей раздела различных сред. Модели кинетических коэффициентов и ряда других электрофизических параметров, прежде всего времен релаксации, гидродинамических и квазигидродинамических моделей разработаны еще хуже. С физической точки зрения это вполне понятно. Так, подвижности в гидродинамической и квазигидродинамической моделях должны быть функциями средней энергии носителей, а точнее функционалами функции распределения, а не локального электрического поля, как в диффузионно-дрейфовых моделях. Кроме того, предполагается, что температура носителей отлична от решеточной. Следовательно, модели ряда коэффициентов должны быть, строго говоря, модифицированы в указанных моделях по сравнению с применяемыми в диффузионно-дрейфовых. В связи с этим для моделей повышенной адекватности часто используются параметры, определенные для однородных полей и материалов с помощью методов Монте-Карло, что вызывает справедливые сомнения в корректности их применения в некоторых случаях (сильные поля и неоднородности и др.) для приборных структур. В работе [9] предложен перспективный подход к возможному решению этой проблемы, однако авторы при этом используют, хотя и подобные уравнения, но уже квантовой гидродинамики (не полуклассический подход). Значительные усилия прикладываются и для уточнения аппроксимаций для зонных структур и таких параметров как скорости рассеяния по различным механизмам для методов Монте-Карло.

Важно обратить внимание на то, что предпочтение в диффузионно-дрейфовых моделях отдается эмпирическим моделям параметров, а не теоретическим. Аналогичный подход, как правило, приводит к неплохим результатам в моделях повышенной адекватности, в частности, в гидродинамических, квазигидродинамических и комбинированных, методах Монте-Карло частиц.

Причины 5 и 6 будут более глубоко понятны из последующего рассмотрения. Здесь лишь заметим, что чем выше точность исходных данных (геометрические размеры, профиль легирования и др.), тем меньше неопределенности в них скажутся на точности моделирования реальных приборных структур. Процесс же идентификации параметров чрезвычайно важен и, в сущности, часто компенсирует как погрешности, вызванные сделанными в моделях допущениями на всех этапах их построения и реализации, так и неточности в исходных данных.

Таким образом, *ранее обычно допустима лишь общая оценка типа: адекватность модели данного класса будет выше, чем другого, более низкого иерархического уровня.* Учитывая отмеченные проблемы и неопределенности, это возможно далеко не в каждом конкретном случае, поэтому и полезны общие оценки, указанные в [2].

В то же время при анализе элементов зачастую не может быть установлено четких границ: для одних характеристических размеров необходимо использовать полуклассический подход, а для других – квантовомеханический. Так, даже в обычных не с субмикронными размерами элементах кремниевых ИС могут существовать локальные области, где важны квантовомеханические эффекты. Это было установлено давно в МОП-структурах в условиях сильной инверсии. В результате могут быть ощутимые погрешности в расчете концентрации подвижных носителей заряда и поверхностного потенциала [10].

По изложенным причинам адекватность модели обычно оценивают при описании внешних электрических характеристик, пренебрегая возможными локальными возмущениями в описании внутренних. Именно данному способу, по-видимому, в большей степени и соответствуют указанные в [2] общие оценки.

Тем не менее, несмотря на отмеченные сложности, были предприняты значительные усилия по оценке адекватности моделей разнообразных приборных структур на различных материалах. Литература по данному вопросу обширна, поэтому здесь приведем только основные оценки и рекомендации.

Рассмотрим сначала результаты для приборных структур на кремнии. Здесь привлекались модели различных классов, а именно: методы Монте-Карло частиц, гидродинамические, квазигидродинамические, диффузионно-дрейфовые и комбинированные. Так, в работах [11 – 14] было показано, что для биполярных транзисторов с толщиной базы $W_b \in [30 \text{ нм}, 150 \text{ нм}]$ результаты расчета внешних (интегральных) характеристик по диффузионно-дрейфовой, квазигидродинамической, комбинированной моделям и методу Монте-Карло обычно отличаются не более, чем на 5 – 10%. В худшем случае при $W_b = 30 \text{ нм}$ отличие по току коллектора составляет около 25% [11]. Аналогичные оценки получены в [14] при расчете времени переноса через базу. Отметим, что в указанных работах исследовались основные внешние электрические характеристики биполярных транзисторов, а именно: ток коллектора, коэффициент усиления β , граничная частота f_T , время переноса через базу. Подобные результаты были получены и для диодов. Следовательно, для кремниевых биполярных структур приведенный в [2] диапазон целесообразного применения диффузионно-дрейфового

приближения ($L_{хар} \geq 0,1$ мкм) корректен в соответствии с принятым способом оценки.

Ситуация более сложна для субмикронных униполярных элементов кремниевых ИС. Это связано с двумя основными причинами [5, 7]: 1) перенос носителей заряда осуществляется в очень узкой приповерхностной области; 2) для структур характерны большие электрические поля. Так как канал МОП-транзистора в условиях сильной инверсии является, по существу, двумерным (2D) электронным газом, то ставится вопрос о необходимости разработки квантовомеханических моделей расчета ряда характеристик МОП-структур. В то же время с использованием моделей только полуклассического подхода из отмеченной иерархии не удалось убедительно подтвердить принципиальную необходимость учета ряда кинетических эффектов при расчете вольт-амперных характеристик (ВАХ) самых разнообразных элементов даже при длине канала $L_K \approx 0,1 \dots 0,3$ мкм.

Убедительные результаты, подтверждающие последнее утверждение, приведены в статье [15]. Так, максимальное отличие результатов, полученных с помощью диффузионно-дрейфовых моделей и моделей более высокого уровня адекватности, по току стока I_c составляет около 27 % при очень малой длине канала в 0,1 мкм. Еще меньшее отличие получено (до 20 %) для n - и p -канальных МОП-транзисторов в работах [16, 17]. Очевидно, что это приемлемая для практики точность. Аналогичные погрешности (до 30 %) получаются при расчете крутизны и граничной частоты f_T [16]. Исключением, по-видимому, являются случаи расчета токов, обусловленных ударной ионизацией. В таких случаях, однако, корректировка диффузионно-дрейфовой модели может быть с успехом осуществлена с использованием более адекватных моделей скорости ударной ионизации и некоторых других параметров

[18]. В связи с этим уместно подчеркнуть, что даже в традиционных диффузионно-дрейфовых моделях эффекты горячих носителей заряда все же частично учитываются путем включения зависимостей подвижности от напряженности электрического поля и добавления скорости ударной ионизации в модель рекомбинации-генерации.

В чем же секрет того, что диффузионно-дрейфовые модели обеспечивают приемлемую точность расчета тока стока для МОП-транзисторов со сверхмалыми длинами канала? Оказывается, что в области отсечки канала вклад эффекта всплеска скорости в ток I_c во многом компенсируется дополнительным падением концентрации подвижных носителей заряда в ней же [19].

Важно подчеркнуть, что диффузионно-дрейфовые модели с успехом использовались при создании и анализе первых реальных МОП-транзисторов с длинами каналов и затворов в диапазоне 70 – 130 нм [20 – 22]. Как отмечают авторы этих статей, без применения известных программ FIELDAY и MINIMOS, в основу которых положены двумерные численные диффузионно-дрейфовые модели, разработка таких МОП-структур была бы крайне затруднительна. Опыт использования диффузионно-дрейфовых моделей положителен и при синтезе новых приборных структур на основе кремния с экстремально малыми длинами затвора. Так, в работе [23] диффузионно-дрейфовая модель с модификацией для учета туннельного тока применялась для исследования элемента с длиной канала $L_k \approx 16$ нм. Это уже выход на указанный в [2] предел. Заметим, что авторами [23] отмечалось, что вклад туннельного тока не столь существенен относительно тока, который получен с помощью только диффузионно-дрейфовой модели, и составляет около 15 %.

Таким образом, *диффузионно-дрейфовые модели допустимо использовать для получения количественной информации о*

внешних электрических характеристиках приборных структур на кремнии с длинами $L_{хар}$ до 0,1 мкм. Полезные качественные и полуколичественные оценки могут быть получены вплоть до $L_{хар}$ в несколько длин волн де Бройля λ_B .

В чем же причины того, что диффузионно-дрейфовые модели продолжают "работать"? Наиболее важными из них являются: 1) возможное подобие моделей полуклассического и квантовомеханического подходов [2]; 2) в настоящее время показано, что с использованием более адекватных моделей для кинетических коэффициентов точность расчета плотности тока с помощью диффузионно-дрейфовых моделей может быть повышена вплоть до уровня кинетического моделирования. В целом, расширение диапазона справедливости диффузионно-дрейфовых моделей часто достигается с помощью более адекватных моделей подвижностей, скорости ударной ионизации, эффектов сильного легирования и др.; 3) детальные исследования показывают [24], что в кремниевых биполярных и униполярных приборных структурах существуют области с ограничением плотности тока, которые неплохо описываются уравнениями для плотности тока диффузионно-дрейфовой модели; 4) принципы, используемые при задании граничных условий в различных моделях полуклассического подхода, – аналогичны, носят достаточно общий характер и, как правило, не нарушают существенным образом адекватность моделей.

Следовательно, исходная диффузионно-дрейфовая модель [2] обладает приемлемой грубостью при описании внешних электрических характеристик приборных структур микроэлектроники на кремнии.

Тем не менее необходимо сделать несколько замечаний. Проведенные исследования показали, что для более адекватного описания *внутренних характеристик* учет эффекта всплеска скорости и других эффектов горячих носителей заряда

желателен уже при $L_{хар} \leq 0,2 - 0,3$ мкм для МОП-транзисторов. Может также понадобиться учет в различных моделях полуклассического подхода разнообразных механизмов рассеяния и даже введение квантовомеханических коррекций. Без них, в частности, невозможен расчет тока затвора, обусловленного не только термоэлектронной эмиссией, но и туннелированием носителей заряда, а также ВАХ затвора для ультратонких диэлектриков. Случаями, требующими дополнительного повышенного внимания, являются также пониженные температуры окружающей среды и сверхбыстрые переходные процессы*.

Таким образом, для моделирования физических процессов в приборных структурах на кремнии целесообразно использование диффузионно-дрейфовых (с возможной корректировкой моделей ряда параметров) и комбинированных моделей. Именно с помощью моделей данных двух классов наиболее удачно компромиссно разрешается AP-проблема. В комбинированных моделях не простыми задачами, однако, являются выделение областей необходимого применения моделей повышенной адекватности и задание соответствующих граничных условий для "сшивки" моделей.

Подобные исследования по оценке адекватности моделей были проведены для приборных структур на GaAs и других полупроводниках. При этом с помощью методов Монте-Карло частиц, гидродинамических, квазигидродинамических, диффузионно-дрейфовых и комбинированных моделей анализировался широкий спектр приборов, а именно: диоды (типа $n^+ - n - n^+$, лавинно-пролетные, с двойной инжекцией и др.), биполярные транзисторы, транзисторы с проникаемой базой, гетероструктурные биполярные транзисторы, полевые транзисторы со структурой металл-полупроводник,

* Более детально эти вопросы рассматриваются в главе 8.

гетероструктурные полевые транзисторы с селективным легированием и др. Исследовалось влияние на характеристики следующих кинетических эффектов и явлений: разогрева и охлаждения носителей заряда, всплеска дрейфовой скорости, ударной ионизации, междолинных переходов, термоэлектронной эмиссии, квазибаллистического и баллистического транспорта. Результаты показывают, что отмеченные кинетические эффекты имеют гораздо более существенное влияние на приборные структуры на GaAs, InP и других материалах с более легкими, чем у кремния, эффективными массами. В частности, эффект всплеска скорости для GaAs важно учитывать для элементов с субмикронными размерами с $L_{хар} \leq 1$ мкм при $T = 300\text{K}$. Полезные количественные оценки при расчете внешних электрических характеристик с помощью диффузионно-дрейфовых моделей могут быть, по-видимому, получены в диапазоне до $L_{хар}$ в 0,5–1 мкм при корректировке моделей ряда параметров с помощью экспериментальных данных или методов Монте-Карло, а также путем разбиения плотности тока электронов на несколько составляющих.

В целом, для приборных структур на GaAs и других полупроводниковых материалах с более легкими эффективными массами нежели у Si целесообразны диапазоны учета указанных кинетических эффектов для $L_{хар}$ больших в 2–5 раз по сравнению с кремнием. Наиболее удачные компромиссные решения AP-проблемы для приборных структур на основе соединений типа $A^{III}B^V$ с активными областями субмикронных размеров достигаются с помощью гидродинамических, квазигидродинамических и комбинированных моделей, в которых используются методы Монте-Карло.

3.2. Математические проблемы

Применяемые математические методы в значительной степени определяют реализуемость распределенных дискретных (численных) моделей. Практика показывает, что использование стандартных численных методов редко приводит к получению успешных результатов. Поэтому *выход заключается в разработке специальных численных методов*, являющихся предметом изучения науки, именуемой вычислительной физикой. В нашем случае речь идет о вычислительной микро- и наноэлектронике.

Так как различные классы моделей порождают *специфические системы уравнений*, то для каждого из них должны быть разработаны свои методы. Проблема усложняется еще тем, что в рамках даже одного класса решаемые системы уравнений иногда значительно различаются [2]. В результате этого и иных причин эффективность и надежность методов может сильно зависеть от конкретной постановки задачи, вида элементов, режимов работы и многих других факторов. Следовательно, *для различных классов моделей должен быть разработан спектр численных методов* и в идеальном случае должны быть установлены условия целесообразного применения каждого из них, что, к сожалению, недостижимо на практике. Заметим, что при разработке методов ряда классов, к счастью, есть и общие эффективные направления и принципы. Рассмотрим их также.

В настоящее время наиболее разработаны численные методы реализации диффузионно-дрейфовых моделей, причем в одно-, двух- и трехмерном случаях. В связи с этим представляется возможным выделить комплекс основных характерных проблем, которые возникают или встретятся при большей разработанности классов моделей более высоких иерархических уровней.

Проблемы начинаются с исследования существования и единственности решения фундаментальной системы уравнений

(ФСУ) [25], составляющей основу диффузионно-дрейфовых моделей [2]. Они связаны с тем, что ФСУ – сильно нелинейная система уравнений, поэтому исследования существования и единственности решения в общем случае при заданных либо токах, либо напряжениях на контактах элемента не представляется возможным [25]. К сожалению, исследования проведены лишь в ряде упрощенных случаев. В то же время такой анализ чрезвычайно важен, так как позволил бы в каждом конкретном случае ответить на вопрос о целесообразности поиска численного решения вообще, а следовательно, и об адекватности описания физического объекта в целом исходной непрерывной моделью.

Другие математические проблемы связаны с процессами [25]: построения дискретных моделей; реализации дискретных моделей; обработки результатов моделирования и оценки адекватности моделирования. Все они осложняются чрезвычайно ограниченными возможностями строгих математических исследований применимости тех или иных математических методов. Так, при анализе методов построения дискретных диффузионно-дрейфовых моделей не представляется возможным детально исследовать такие важнейшие математические свойства получаемых разностных схем, как их устойчивость и сходимость [25, 26]. Подобные проблемы возникают и при анализе сходимости математических методов реализации этого класса моделей [25, 27].

В целом, основные проблемы на этапах построения и реализации дискретной модели возникают при разработке следующих методов и алгоритмов [25]: аппроксимации ФСУ с граничными условиями; выбора сетки пространственной дискретизации; выбора шага по времени; решения системы нелинейных уравнений дискретной модели; выбора начальных приближений; решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Практика показывает, что *наиболее*

значительные успехи в разработке эффективных численных методов и алгоритмов достигаются при интенсивном использовании физических принципов, законов и предположений по возможности на максимально допустимом количестве этапов построения и реализации дискретных моделей.

При аппроксимации ФСУ с граничными условиями традиционно применяются либо метод конечных разностей, либо метод конечных элементов. Было показано [28], что применяя соответствующие аппроксимации, разбиения областей, с помощью обоих методов могут быть получены практически одни и те же уравнения дискретной модели, как в одномерном, так и в многомерном случаях. В настоящее время *считается целесообразным использование так называемых физических подходов к построению дискретных моделей [7, 25, 28].* При конечно-разностной аппроксимации применяются либо метод интегрирования на ячейке (box integration method) [7, 25, 28], либо метод интегрального тождества Марчука [7, 25] в рамках интегро-интерполяционного подхода Тихонова–Самарского в сочетании с использованием физически согласованных приближений на ячейке сетки пространственной дискретизации. Методы данного типа предложены как для уравнений непрерывности (методы Шарфеттера–Гуммеля и других [7, 25, 28]), так и для уравнения Пуассона [7, 25].

Непростым является построение сетки пространственной дискретизации, особенно в методе конечных элементов. В целом, применяются три способа построения сетки [7, 25]: 1) на основе равномерного распределения ошибки усечения; 2) эмпирический; 3) табличное задание. В настоящее время наиболее распространен второй способ. Данная проблема, к счастью, не столь критична для отмеченных физических конечно-разностных формулировок [7, 25].

При аппроксимации по времени предпочтение обычно отдается неявным методам, причем с оценкой локальной погрешности

усечения для автоматического выбора шага интегрирования по времени в процессе счета [25]. Иногда достаточно эффективно используются полунейвные разностные схемы [25, 27].

Для решения получаемой после аппроксимаций системы нелинейных алгебраических уравнений, составляющей дискретную модель, возможно применение нескольких подходов в рамках принципа последовательных приближений (итераций). Обычно для реализации дискретных диффузионно-дрейфовых моделей используются два итерационных подхода [7, 25]: 1) метод Ньютона или его модификации; 2) итерационные методы последовательного типа. Численное решение всех нелинейных алгебраических уравнений модели методами первого типа осуществляется одновременно (*одновременная концепция*). Анализ и выделение типичных составных этапов и особенностей, возникающих при построении и реализации дискретной модели с использованием *последовательной концепции* (методы второго типа), позволил сформулировать *системный подход* [7, 29] к решению систем дифференциальных уравнений в частных производных, составляющих диффузионно-дрейфовые модели. Основная идея введения такого подхода заключалась в том, что в его рамках становится более глубоко понятен смысл разрабатываемых системных методов, а также их отличие друг от друга. Кроме того, легко может быть проведена классификация специализированных методов последовательной концепции [7, 25]. Первым методом данного типа являлся метод Гуммеля. Его принципиальный момент – линейризация уравнения Пуассона с учетом статистики Больцмана (ключевое физическое предположение метода).

В настоящее время разработаны самые разнообразные методы решения уравнений дискретной модели (см. например [7, 25, 27, 28]), характеризующиеся различной универсальностью, эффективностью и надежностью. *Считается, что при несильной*

нелинейности задачи предпочтительнее методы последовательной концепции, а для сильной – одновременной. Однако часто это бывает не так. Многое зависит от выбора начального приближения, моделируемого элемента и ряда других факторов. Анализ показывает, что *наибольшую перспективу для дальнейшего развития представляют комбинированные методы [7, 25].* Их сущность состоит в чередовании известных методов, перестановке или замене их этапов и применении некоторых других принципов. С помощью комбинированных методов часто может быть повышена гибкость, включая улучшение надежности сходимости, традиционных методов одновременной и последовательной концепций, уменьшены требуемые затраты машинного времени.

Выбор начального приближения имеет чрезвычайно важное значение в процессе реализации дискретной модели, прежде всего, в стационарном случае, так как от его качества зависит эффективность расчетов, а в ряде случаев и надежность сходимости итераций. *Общепризнанным является необходимость выбора начального приближения с использованием физических предположений.* Возможны два подхода к решению этой задачи [7, 25]: 1) выбор начального приближения пошаговым, последовательным способом; 2) выбор начального приближения для всей задачи при заданных смещениях. Эффективным при решении задачи выбора начального приближения часто оказывается применение комбинированных методов [7, 25].

Необходимо сделать замечание по поводу критерия завершения внешних итераций. Основная проблема здесь хорошо известна в вычислительной математике. Для полностью достоверной оценки нам нужно знать заранее решение задачи, которое мы ищем!? Наиболее часто в рассматриваемой задаче используются следующие критерии завершения итераций [3, 4, 7, 25]: 1) по минимизации невязки с требуемой точностью; 2) по

уменьшению изменения электростатического потенциала с требуемой точностью; 3) по выполнению свойства консервативности плотности полного тока с требуемой точностью. Каждый из отмеченных критериев имеет свои достоинства и недостатки, поэтому целесообразно применять одновременно несколько из них, например, второй и третий критерии [7, 25].

При решении СЛАУ, возникающих при реализации дискретных моделей, используется широкий ассортимент известных прямых и итерационных методов, а именно: прогонки, инвариантного погружения, последовательной верхней и нижней релаксации, Чебышева (циклический), переменных направлений, Зейделя, различные варианты блочных методов, Булеева, Федоренко, Стоуна, неполного разложения Холецкого с сопряженными градиентами и др. При относительно небольших размерностях СЛАУ (до 1000, т.е. в одно- и двумерном случаях) весьма эффективным может быть использование прямых методов [25, 27]. *При больших размерностях, т.е. в двух- и трехмерном случаях, предпочтение отдается итерационным методам,* которые менее чувствительны к влиянию ошибок округления [7, 25, 27]. Заметим, что в трехмерном случае размерность СЛАУ может достигать 10^5 и более. Поэтому разработка алгоритмов решения СЛАУ повышенной эффективности является актуальной задачей, так как их свойства во многом и определяют общую вычислительную эффективность реализуемой дискретной модели. Использование информации о физике исследуемых элементов полезно при разработке критериев завершения итераций и в данном случае.

Ряд специфических математических проблем встречается в процессе обработки и оценки адекватности результатов моделирования [25].

При обработке результатов моделирования главные проблемы вызваны: необходимостью обработки значительных массивов

информации и вычислением электрических характеристик элементов. В первом случае традиционно более или менее эффективно используются различные методы визуализации. Во втором случае трудности связаны со сложностью вычисления на ЭВМ разности почти одинаковых чисел. Здесь, по существу, обязательна разработка специальных методов расчета токов, например на основе принципа консервативности плотности полного тока [3, 4, 25], и других выходных параметров [3, 4, 30]. В противном случае может значительно падать эффективность методов реализации модели при расчетах в области малых токов и некоторых других случаях. Следовательно, при решении проблем обработки информации должны также использоваться физические принципы, законы и предположения.

Вследствие того, что в настоящее время невозможна прямая экспериментальная проверка результатов моделирования по основным переменным (концентрации подвижных носителей заряда, электростатический потенциал и др.) в элементах микроэлектроники, она должна быть опосредованной и комплексной. В идеальном случае в нее необходимо включить следующую последовательность процедур [25]: исследование существования и единственности решения; теоретическую оценку адекватности дискретной модели исходной непрерывной; экспериментальное исследование дискретной модели путем вариации ее различных численных параметров (количества узлов сетки пространственной дискретизации, шагов по времени, параметров и критериев сходимости итерационных методов и т.д.); сравнение результатов реализации дискретной модели с экспериментальными данными по интегральным параметрам и исследованиями других авторов; сопоставление дискретной модели с моделями других классов. Естественно, такая проверка порождает значительные проблемы и обычно производится, к сожалению, в сильно усеченном виде.

Ряд подобных рассмотрением проблем возникают и при построении и реализации дискретных моделей других классов. Аналогичны и принципы их компромиссного разрешения. Имеющиеся данные подтверждают это утверждение. Поэтому остановимся на наиболее важных моментах. Отметим, что некоторые выделенные ранее принципы, подходы и методы с успехом обобщаются.

Гидродинамические и квазигидродинамические численные модели обычно разрабатываются в одно- и двумерном случаях. Это имеет оправдание. Во-первых, эффекты горячих носителей, для описания которых в основном и используются данные модели, часто возникают в структурах с очень малыми размерами активных областей с доминирующим транспортом в одном или двух измерениях. Во-вторых, разработка этих численных моделей более сложна по сравнению с диффузионно-дрейфовыми моделями. Однако вполне может оказаться, что неучет трехмерных эффектов в некоторых приборных структурах будет оказывать гораздо более существенное влияние на их электрические характеристики по сравнению с эффектами горячих носителей. Более того, трехмерные механизмы возможно могут оказывать влияние и на проявление самих эффектов горячих носителей заряда. Подобные примеры известны для диффузионно-дрейфовых моделей [7].

При построении дискретных гидродинамических и квазигидродинамических моделей применяется метод конечных разностей или метод конечных элементов. Учитывая опыт разработки дискретных диффузионно-дрейфовых моделей, физические подходы использовались при построении численных гидродинамических и квазигидродинамических моделей с самого начала в рамках обоих методов [31, 32]. Рядом авторов подчеркивается более высокая степень сложности построения дискретных гидродинамических моделей по сравнению с численными диффузионно-дрейфовыми моделями, вызванная

следующими факторами [19, 33]: 1) возросшей жесткостью уравнения для момента; 2) резкими изменениями члена ($\bar{E} \bar{J}$) в уравнении баланса энергии (13) в [2]; 3) влиянием температуры. Отметим также просто увеличение количества уравнений. Еще большие проблемы могут возникнуть при усложнениях вида гидродинамической модели [8], так как физические подходы в данных случаях фактически не разработаны. Использование же стандартных методов к построению разностных схем может приводить к численным неустойчивостям [8].

При реализации дискретных гидродинамических и квазигидродинамических моделей применяются методы одновременной и последовательной концепций. В более сложном двумерном случае предпочтение отдается методам последовательной концепции. В работах [7, 34, 35] описан многоступенчатый метод реализации обобщенной гидродинамической модели [2]. Многие известные методы последовательной концепции для более простых моделей могут интерпретироваться как частные случаи данного метода. При выборе начального приближения также используются физические предположения. Для построения и реализации гидродинамических и квазигидродинамических моделей может применяться макрочастичный подход, который, однако, на практике широкого распространения не получил [36].

Таким образом, *методы построения и реализации дискретных гидродинамических и квазигидродинамических моделей разработаны в гораздо меньшей степени по сравнению с соответствующими методами диффузионно-дрейфовых моделей*. Тут еще многое предстоит сделать.

Методы Монте-Карло частиц при моделировании приборных структур, к сожалению, характеризуются крайне низкой эффективностью по сравнению с рассмотренными моделями, а следовательно, алгоритмы их реализации нельзя признать удовлетворительными. Поэтому значительное внимание здесь

уделяется различным ускоряющим процедурам [37]. Отмеченный существенный недостаток, как правило, усугубляется следующими факторами и ситуациями: 1) низкими полями, большими концентрациями примесей в некоторых областях; 2) инъекцией через барьеры, в частности при больших обратных смещениях; 3) рекомбинацией-генерацией; 4) граничными условиями на контактах; 5) учетом квантовых эффектов (вырождение и др.); 6) рассеянием носитель-носитель и др. Кроме того, методы Монте-Карло для случая анализа малых сигналов фактически не разработаны. Следовательно, и здесь предстоит еще многое сделать.

По изложенным причинам в настоящее время интенсивно разрабатываются комбинированные модели, с помощью которых очень часто удается получить наиболее приемлемые компромиссные решения АР-проблемы с позиции эффективности численных методов построения и реализации моделей. Анализ показывает, что комбинированные модели с успехом разрабатываются и применяются уже давно. Отметим лишь следующие подходы, используемые при синтезе этого класса моделей: 1) метод региональных приближений; 2) метод матрицы рассеяния; 3) гибридный подход; 4) методы построения физических разностных схем. Первый и четвертый уже рассматривались.

В гибридном подходе к построению комбинированных численных моделей, например, в качестве базовой модели используется диффузионно-дрейфовая модель, а метод Монте-Карло частиц применяется в отдельных локальных областях. Интересную альтернативу прямым численным методам в области моделирования элементов микроэлектроники может составить метод матрицы рассеяния*, в частности для неявного решения кинетического уравнения Больцмана. Было показано

* Данный метод, как известно, широко используется при анализе устройств СВЧ-электроники.

[38], что результаты, полученные с помощью этого метода, хорошо согласуются с расчетами по методу Монте-Карло частиц, однако при более высокой эффективности.

Таким образом, *наиболее удачные компромиссные решения AP-проблемы для приборных структур микроэлектроники в настоящее время достигаются с помощью классов диффузионно-дрейфовых или комбинированных моделей, численные методы построения и реализации которых в целом характеризуются удовлетворительной эффективностью и надежностью.*

3.3. Проблемы разработки программ

Реальные возможности моделирования в значительной степени определяются именно имеющимся в наличии программным обеспечением (ПО). При анализе данного комплекса проблем будем в основном следовать работам [3 – 5, 25, 39]. Наиболее развито в настоящее время ПО, базирующееся на различных диффузионно-дрейфовых моделях. Его классификация дана в [5, 39]. Рассмотрим ее кратко.

Выделяются два класса ПО численного моделирования приборных структур ИС, а именно: ПО элементов и ПО фрагментов. К первому классу относятся три вида ПО: специализированные программы; комплексы программ с упрощенной моделью; программы общего назначения. Наибольшей универсальностью среди ПО данного класса характеризуются программы общего назначения, которые предназначены для расчета элементов различных видов. К ним могут быть отнесены: АЛЬФА, ПАРИС, FIELDAY, TRANAL, BAMBИ, PISCES, SIMBA, HFIELDS, BIUNAP, KFSM и др. В зарубежной литературе они называются "general purpose programs".

ПО отмеченного класса в общем случае не позволяет моделировать более сложные структуры СБИС и УБИС, представляющие собой разнообразные фрагменты: логические элементы; схемы, состоящие из нескольких элементов, и т.д. Анализ таких приборных структур становится все более целесообразным с повышением степени интеграции ИС. В этом случае необходимо использовать ПО второго класса, включающего следующего вида ПО: программы схемотехнического моделирования; программы двухуровневого моделирования по маршруту "элемент-схема"; программы смешанного моделирования; универсальные программы численного моделирования элементов и фрагментов. Наибольшей универсальностью среди ПО данного класса характеризуются программы последнего вида, к которым могут быть отнесены [25, 39]: PNAИЛ, UNTEMP и TREADE.

Каждый из отмеченных классов и видов ПО имеет свои достоинства и недостатки [5, 39]. Интересно заметить, что все виды ПО указанных классов перечислены в соответствии с порядком их появления во времени. В целом, ПО соответствующего вида занимает свою "экологическую нишу" при практическом решении АР-проблемы. Так, программы, характеризующиеся наименьшей адекватностью моделирования, интенсивно разрабатывались на ранних стадиях развития ПО, основанного на диффузионно-дрейфовых моделях. Это во многом определялось возможностью практической реализации моделей, т.е. вычислительной техникой, математическими методами и т.д. По мере их совершенствования повышалась адекватность моделирования и осуществлялся переход к ПО новых видов.

Отмеченные причины во многом привели к тому, что развитие ПО, реализующего модели более высоких иерархических уровней, т.е. других разновидностей, происходит по подобному "сценарию". Главное внимание пока уделяется разработке ПО

элементов (первого класса). В основном это программы одномерного и двумерного анализа. Популярный путь – это модернизация программ, основанных на дискретных диффузионно-дрейфовых моделях. В двумерном случае известными примерами являются: для гидродинамических и квазигидродинамических моделей – модифицированные программы GALENE, MINIMOS, HFIELDS, а для комбинированной (диффузионно-дрейфовая и метод Монте-Карло частиц) модели – программа PISCES-MC. К сожалению, программы DAMOCLES, APSIS и другие [37], реализующие метод Монте-Карло частиц, предназначены для использования на векторных и многопроцессорных вычислительных системах и характеризуются огромными затратами времени даже этих высокопроизводительных систем. В связи с этим данный инструментарий пока нецелесообразно применять в инженерных приложениях [37].

Таким образом, несмотря на большое разнообразие ПО численного моделирования приборных структур микроэлектроники, каждый из рассмотренных классов, видов и разновидностей ПО, т.е. по отдельности, имеет свои достоинства и недостатки.

Большинство программ численного моделирования – программы двумерного анализа. В то же время даже простейшие элементы СБИС и УБИС характеризуются трехмерной структурой. Результатом могут быть значительные погрешности расчетов по программам двумерного анализа [7]. Кардинальное решение проблемы – разработка программ трехмерного моделирования, однако они, к сожалению, требуют больших вычислительных ресурсов ЭВМ. В связи с изложенным *желательно наличие иерархического ряда программных средств, состоящего из ПО одномерного, двумерного и трехмерного анализа, причем различных классов, видов и разновидностей.* Один из возможных компромиссных вариантов решения рассматриваемой проблемы

предложен и реализован в комплексе программ численного моделирования приборных структур микроэлектроники NASD [7, 40, 41].

Значительные сложности возникают в процессе разработки ПО, которые усугубляются рассмотренными ранее многочисленными проблемами. К основным факторам, определяющим проблемы создания ПО, следует отнести [5, 25]: 1) длительный срок, приводящий к целесообразности использования *принципа последовательной разработки ПО* [25] многомерного численного моделирования, характеризующегося определенной универсальностью; 2) недостаточное количество квалифицированных разработчиков ПО данного типа; 3) вариации численных методов и алгоритмов; 4) сложность тестирования программ, что приводит к необходимости разработки многошаговых процедур тестирования [25]; 5) отсутствие вычислительной техники требуемой повышенной производительности; 6) большие потоки выходной информации; 7) значительные финансовые затраты на разработку ПО. В результате, *качественный уровень (по надежности, точности, эффективности и др.) ПО численного моделирования приборных структур микроэлектроники еще далек от достигнутого для программ схемотехнического моделирования.* При этом инструментарий очень часто является научно-исследовательским и, следовательно, не предназначен для широкого использования. Система моделирования приборов ATLAS компании Silvaco является, по-видимому, одним из наиболее успешных примеров коммерциализации в данной наукоемкой области (см. также главу 8). По ряду из отмеченных причин известный консорциум SEMATECH прикладывает серьезные усилия в области стандартизации, способствующей более успешному распространению и эксплуатации ПО численного моделирования приборных структур микроэлектроники.

3.4. Проблемы, определяемые вычислительной техникой, оборудованием, идентификацией параметров моделей и заданием исходных данных

Проблемы, вызванные недостатком быстродействия ЭВМ, удается смягчить с помощью многопроцессорных вычислительных систем, спецвычислителей и др. Максимальный эффект при этом достигается путем разработки программ, реализующих методы и алгоритмы параллельных вычислений. Здесь лишь отметим следующие известные программы моделирования приборных структур микроэлектроники, в которых реализован такой подход: DAMOCLES, McPOP, версии MINIMOS, CADDETH, PISCES и др. В целом отмеченные подходы представляют несомненную ценность, особенно для реализации моделей повышенной адекватности. Очевидно, что высокоадекватная модель, требующая огромных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ, использоваться широко не может, т.е. часто является фактически бесполезной. Ситуация, конечно же, будет улучшаться по мере дальнейшего повышения количественных и качественных показателей вычислительной техники.

Значительные проблемы могут возникать при идентификации параметров моделей и задании исходных данных. Это связано с тем, что в идеальном случае исходная информация сама должна быть предметом математического моделирования. Так, при задании электрофизической структуры элемента, строго говоря, необходимо моделирование технологического маршрута изготовления ИС, состоящего из десятков и сотен технологических операций. Несмотря на большие усилия и успехи по разработке моделей, по крайней мере базовых технологических операций изготовления кремниевых ИС, здесь еще многое предстоит сделать [42]. Во многом поэтому консорциум SEMATECH инициировал дорогостоящие работы по созданию и поддержке единой базы данных

экспериментальных профилей легирования [42]. При задании параметров моделей приходится считаться и с недостатком устоявшихся моделей для различных материалов для таких важных параметров, как подвижность, время жизни, время релаксации, сужение ширины запрещенной зоны и др.

Что же делать в такой ситуации имеющихся неопределенностей, часто весьма значительных? На помощь приходят два важных свойства моделей – их адекватность и грубость, а также то, что *на практике обычно используются эмпирические модели электрофизических параметров с дополнительной экспериментальной идентификацией параметров этих моделей.* В результате модель элемента ИС может быть согласована с экспериментальными данными. Отмеченные неопределенности, однако, отразятся на численных значениях параметров, т.е. они становятся в некотором смысле эффективными (подгончными). Таким образом, получаем: изменение физического содержания параметра, что может приводить к сложности сопоставления моделей различных классов; понижение универсальности модели. В целом, *процесс идентификации параметров моделей, по существу, направлен на ослабление одной из фундаментальных проблем моделирования – проблемы неполноты описания модели [1].*

Процесс идентификации параметров моделей элементов ИС подробно рассмотрен в работах [3, 4], поэтому здесь отметим наиболее важные для нас моменты. Прежде всего, наличие методики идентификации параметров является важным условием эффективного использования модели на практике. При этом процесс идентификации параметров очень существенно отличается для электрических и физико-топологических моделей приборных структур микроэлектроники. Тем не менее, выделяются всего лишь два качественно различных метода идентификации параметров моделей, применяемых при их

настройке на экспериментальные данные [3, 4]: 1) прямые измерения; 2) на основе оптимизационных процедур.

Для многомерных численных моделей биполярных и МОП-транзисторов ситуация облегчается тем, что согласно современным представлениям некоторые из электрофизических параметров, как правило, слабо зависят от технологии изготовления и конструктивных особенностей элементов. Для диффузионно-дрейфовых моделей к ним относятся [3, 4, 25]: 1) параметры эффектов сильного легирования; 2) подвижности; 3) коэффициенты Оже-рекомбинации. Вопрос сложнее при задании рекомбинационных параметров (времена жизни) и параметров, характеризующих поверхности (скорости поверхностной рекомбинации, плотность состояний на границе раздела Si-SiO₂ и др.), так как они в большей степени зависят от технологии изготовления ИС. Часто здесь достаточно эффективно используется оптимизационный метод идентификации небольшого количества (нескольких) параметров [3, 4].

Необходимо отметить, что методики идентификации параметров моделей повышенной адекватности, по существу, только начинают разрабатываться. Проблемы здесь обостряются недостаточностью наших физических познаний, необходимостью применения сложного дорогостоящего оборудования, как правило, увеличением количества параметров по сравнению с диффузионно-дрейфовыми моделями. Хотя ситуация более или менее удовлетворительна для приборных структур на кремнии, в особенности для диффузионно-дрейфовых моделей, однако и здесь не все так гладко и безмятежно. Достаточно отметить, что уже в течение нескольких десятков лет* постоянно осуществляется модернизация моделей подвижностей для МОП-транзисторов в известной программе MINIMOS. В частности, их адаптация или "эволюция", как

* Сообщение о первой версии MINIMOS появилось в 1980 году.

назвали сами авторы, для моделирования элементов ИС, изготовленных по новым технологиям с уменьшающимися проектными нормами.

По изложенным причинам в системах многоуровневого моделирования по маршруту "технология – элемент – схема" [3, 4, 39], разрабатываемых, как правило, в ведущих корпорациях электронной промышленности мира, очень серьезное внимание уделяется процедурам идентификации параметров моделей. В качестве примера отметим лишь одну из первых систем подобного рода – МЕССА [43].

Таким образом, по мере повышения адекватности моделей потребуется использование все более мощной измерительной техники, необходимой для идентификации параметров, а также разработка соответствующих методик измерения, во многом зависящих от моделей элементов.

Проведенный анализ основных проблем моделирования приборных структур микроэлектроники позволяет сделать вывод о том, что *серьезный успех может достигаться лишь при комплексном подходе к компромиссному разрешению рассмотренных ранее проблем в рамках поставленных целей. При этом особое внимание необходимо уделить подходам, моделям, методам, алгоритмам и программам, характеризующимся повышенной универсальностью. Одним из стратегических направлений должно быть создание интегрированных интеллектуальных систем автоматизации научных исследований и систем автоматизированного проектирования элементов на основе спектра моделей различных классов. Достижения в данных направлениях бесспорно будут способствовать углублению наших познаний чрезвычайно интересного "мира" приборных структур микроэлектроники.*

Список литературы к главе 3

1. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34 – 37.
2. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26 – 36.
3. Абрамов И.И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем": Учеб. пособие. Мн.: БГУ, 1999. 92 с.
4. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва–Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
5. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып.5. С. 3 – 9.
6. Чернавский Д.С. Синергетика и информация: Динамическая теория информации. М. Наука, 2001. 244 с.
7. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн.: БГУ, 1999. 189 с.
8. Four-moment hydrodynamic modelling of a submicrometre semiconductor device in a non-parabolic band structure / L. Guo, M.-C. Cheng, Y. Luo, R.M. Fithen // J. Phys. D: Appl. Phys. 1998. V. 31, N 7. P. 913 – 921.
9. Cai J., Cui H.L. Semiconductor device simulation with the Lei-Ting balance equations // J. Appl. Phys. 1995. V.78, N 11. P. 6802 – 6813.
10. Quantum mechanical determination of the potential and carrier distributions in the inversion layer of metal-oxide-semiconductor

devices / C.T. Hsing, D.P. Kennedy, A.D. Sutherland, K.M. van Vliet // *Phys. Status Solidi (a)*. 1979. V.56, N1. P.129 – 141.

11. Cook R.K. Numerical simulation of hot-carrier transport in silicon bipolar transistors // *IEEE Trans.* 1983. V. ED-30, N9. P. 1103 – 1110.

12. Park Y.-J., Navon D.H., Tang T.-W. Monte Carlo simulation of bipolar transistors // *IEEE Trans.* 1984. V. ED-31, N12. P. 1724 – 1730.

13. Ou H.-H., Tang T.-W. Numerical modeling of hot carriers in submicrometer silicon BJT's // *IEEE Trans.* 1987. V. ED-34, N7. P. 1533 – 1539.

14. Baccarani G., Jacoboni C., Mazzone A.M. Current transport in narrow-base transistors // *Solid-State Electron.* 1977. V.20, N1. P. 5 – 10.

15. Tomizawa M., Yokoyama K., Yoshii A. Nonstationary carrier dynamics in quarter-micron Si MOSFET's // *IEEE Trans.* 1988. V. CAD-7, N2. P. 254 – 258.

16. A general purpose device simulator coupling Poisson and Monte Carlo transport with application to deep submicron MOSFET's / F. Venturi, R.K. Smith, E.C. Sangiorgi, M.R. Pinto, B. Riccò // *IEEE Trans.* 1989. V. CAD-8, N4. P. 360 – 369.

17. Ершов М.Ю., Ершова Ю.В., Рыжий В.И. Сравнение дрейфово-диффузионного и кинетического подходов к моделированию кремниевых р-МОП транзисторов // *Микроэлектроника*. 1993. Т. 22, вып.1. С. 80 – 86.

18. Hwang C.G., Dutton R.W. Improved physical modeling of submicron MOSFET's based on parameter extraction using 2-D simulation // *IEEE Trans.* 1989. V. CAD-8, N4. P. 370 – 379.

19. Kosina H., Langer E., Selberherr S. Device modelling for the 1990s // *Microelectron. J.* 1995. V. 26, N 2, P. 217 – 233.

20. Design and experimental technology for 0.1- μm gate-length low-temperature operation FET's / G.A. Sai-Halasz, M.R. Wordeman, D.P. Kern, E. Ganin, S. Rishton, D.S. Zicherman, H. Schmid, M.R. Polcari, H.Y. Ng, P.J. Restle, T.H.P. Chang, R.H. Dennard // IEEE Electron Dev. Letters. 1987. V. EDL-8, N10. P. 461 – 466.
21. Shahidi G.G., Antoniadis D.A., Smith H. I. Electron velocity overshoot at room and liquid nitrogen temperatures in silicon inversion layers // IEEE Electron Dev. Letters. 1988. V. EDL-9, N2. P. 94 – 96.
22. High transconductance and velocity overshoot in NMOS devices at the 0.1- μm gate - length level / G.A. Sai-Halasz, M.R. Wordeman, D.P. Kern, S. Rishton, E. Ganin // IEEE Electron Dev. Letters. 1988. V. EDL-9, N9. P. 464 – 466.
23. Proposal of pseudo source and drain MOSFET's for evaluating 10-nm gate MOSFET's / H. Kawaura, T. Sakamoto, T. Baba, Y. Ochiai, J. Fujita, S. Matsui, J. Sone // Jpn. J. Appl. Phys. Part 1. 1997. V. 36, N3B. P. 1569 – 1573.
24. Assad F., Banoo K., Lundstrom M. The drift-diffusion equation revisited // Solid-State Electron. 1998. V. 42, N3. P. 283 – 295.
25. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Численное моделирование элементов интегральных схем. Мн.: Выш. шк., 1990. 224 с.
26. Markowich P.A. The stationary semiconductor device equations. Wien, New York: Springer-Verlag, 1986. 193 p.
27. Польский Б.С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. Рига: Зинатне, 1986. 168 с.
28. Engl W.L., Dirks H.K., Meinerzhagen B. Device modeling // Proc. IEEE. 1983. V. 71, N1. P. 10 – 33.
29. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Численный анализ явлений переноса в полупроводниковых приборах и структурах. 1. Общие принципы построения методов решения

фундаментальной системы уравнений // Инженерно-физический журнал. 1983. Т. 44, №2. С. 284 – 293.

30. Бубенников А.Н., Садовников А.Д. Физико-технологическое проектирование биполярных элементов кремниевых БИС. М.: Радио и связь, 1991. 288 с.

31. Tang T.-W. Extension of the Sharfetter–Gummel algorithm to the energy balance equation // IEEE Trans. 1984. V. ED-31, N12. P. 1912 – 1914.

32. A new discretization strategy of the semiconductor equations comprising momentum and energy balance / A. Forghieri, R. Guerrieri, P. Ciampolini, A. Gnudi, V. Rudan, G. Baccarani // IEEE Trans. 1988. V. CAD-7, N 2. P. 231 – 241.

33. Numerical modeling of advanced semiconductor devices / W. Lee, S.E. Laux, M.V. Fishetti, G. Baccarani, A. Gnudi, J.M.C. Stork, J.A. Mandelman, E.F. Grabbé, M.R. Wordeman, F. Odeh // IBM J. Res. Develop. 1992. V. 36, N2. P. 208 – 232.

34. Abramov I.I. Hierarchy of models for small semiconductor device simulation // In: Physics, chemistry and application of nanostructures. Minsk, 1995. P. 257 – 259.

35. Numerical "renaissance" procedure of device and process parameters for integrated circuits / I.I. Abramov, V.A. Dobrushkin, V.A. Tsurko, V.A. Zhuk // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2005. V. 8, N3. P. 296 – 301.

36. Рыжий В.И., Баннов Н.А. Математическое моделирование субмикронных элементов интегральных схем: состояние и проблемы // Микроэлектроника. 1987. Т.16, №6. С.484 – 496.

37. Kosina H., Nedjalkov M., Selberherr S. Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation // IEEE Trans. 2000. V. ED-47, N10. P.1898 – 1908.

38. Das A., Lundstrom M.S. A scattering matrix approach to device simulation // Solid-State Electron. 1990. V. 33, N10. P.1299 – 1307.

39. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Анализ программного обеспечения многомерного численного моделирования элементов и фрагментов кремниевых СБИС и УБИС // Электронная техника. Сер.3. Микроэлектроника. 1992. Вып.1. С. 28 – 32.
40. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Комплекс программ одномерного, двумерного и трехмерного численного моделирования элементов и фрагментов СБИС // В кн.: САПР БИС: Проблемы разработки и применения. Межвузовский сб. научных трудов. М.: изд-во МИЭТ, 1990. С. 185 – 190.
41. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Комплекс программ одномерного, двумерного и трехмерного численного моделирования полупроводниковых приборов и элементов интегральных схем // Электронная техника. Сер.2. Полупроводниковые приборы. 1991. Вып.1. С. 68 – 79.
42. International Technology Roadmap for Semiconductors: 1999 edition. Austin, TX: International SEMATECH, 1999; 2001 edition, 2002 update; 2003 edition, 2004 update; 2005 edition.
43. Process and device modeling / Ed. by W.L. Engl. Amsterdam: Elsevier Science Publ., 1986. 462 p.

ГЛАВА 4

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЕ ФОРМАЛИЗМЫ

В данной главе выделены наиболее перспективные приборные структуры твердотельной наноэлектроники, а также основные квантовомеханические формализмы, которые могут использоваться для их моделирования.

4.1. Приборные структуры наноэлектроники

Прежде чем анализировать основные проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур твердотельной наноэлектроники необходимо выделить те из их огромного на настоящий момент времени многообразия, которые будут в дальнейшем рассматриваться. При этом акцент сделаем на выборе типов приборных структур, представляющих наибольший интерес для построения наноэлектронных интегральных схем (ИС). Такая постановка вопроса связана с тем, что главным объектом разработки и исследования в области наноэлектроники, как и микроэлектроники, должна стать ИС или в более широком смысле – интегрированная информационная система [1].

Сначала рассмотрим как может вообще интерпретироваться ИС, что чрезвычайно важно для ее разработки, анализа и моделирования, а также понимания исследуемого вопроса. Здесь можно выделить следующие возможные основные подходы: 1) ИС представляется как сочетание барьеров и ям, а также некоторого набора элементарных зарядов фиксированных и подвижных; 2) ИС представляется как сочетание разнообразных объектов различной размерности (3D, 2D, 1D и 0D), т.е. включающих и наноструктуры, а именно: квантовые пленки или слои (размерность 2D), квантовые проволоки (1D) и квантовые

точки (0D); 3) ИС представляется как сочетание приборных структур, выполняющих некоторые элементарные функции, например логические, и соединенные между собой.

Первый подход является наиболее детальным и, в сущности, уже давно используется при описании твердых тел. Подход для них мог применяться вследствие периодичности структур исследуемых кристаллических тел. В результате задача их описания сильно упрощается. В ИС ситуация, конечно же, гораздо сложнее, по крайней мере на данном этапе их разработки и производства. Поэтому подход для ИС в целом использовать фактически невозможно на современных уровнях развития теории и вычислительной техники. Несмотря на это, для нанoeлектронных ИС он был бы идеальным подходом.

Второй подход тоже является достаточно детальным, в принципе возможен, так как менее сложный по сравнению с первым. Автору, однако, не известны случаи его реального применения, за исключением простейших приборных структур.

Третий подход традиционно используется при описании современных ИС. В настоящее время нет оснований для сомнений в его возможной результативности при описании нанoeлектронных ИС, хотя очевидно, что ситуация значительно усложнится. Это будет связано с очень сильно возросшей степенью взаимодействия между приборными структурами в схемах с уровнем интеграции ориентировочно выше 10^{10} элементов на кристалле.

Удачная аналогия здесь может быть проведена с мозгом человека [1]. В данном случае мозг (степень интеграции около 10^{10} нейронов) – аналог ИС, а нейрон – элементарная приборная структура. Известно, что между нейронами существуют многочисленные связи, по крайней мере типы и функции некоторых из них в настоящий момент времени не ясны. Однако почти не вызывает сомнения, что обработка информации мозгом ведется ансамблями, т.е. целыми группами нейронов, на основе

статистических принципов (гипотеза "вероятностно-статистической организации мозга") [2,3]. Значит есть определенные основания считать, что и в нанозлектронных ИС сверхвысокой степени интеграции (более 10^{10} элементов на кристалле) рассматриваемый третий подход по-прежнему может быть применен. Таким образом, мы пока научились более или менее удовлетворительно "собирать" ИС из относительно больших блоков (приборных структур). Поэтому главной ближайшей стратегической целью является поиск более "гибких" блоков и создание более "гибких" программ их объединения по сравнению с существующими ИС.

По изложенным причинам далее будут рассматриваться именно нанозлектронные приборные структуры, представляющие в ближайшее время перспективу для построения ИС нанозлектроники, а не наноструктуры. Поясним почему мы разделяем эти два термина, хотя в специальной литературе достаточно часто встречается путаница в их использовании.

Во-первых, наноструктура – это, вообще говоря, не прибор. ~~И~~ здесь необходимо констатировать, что в настоящее время чаще исследуются именно наноструктуры, а не собственно нанозлектронные приборы. Во-вторых, в приборной структуре нанозлектроники принципиально важно взаимодействие, как правило, классических областей и активной области (в данном случае наноструктуры), что может очень сильно повлиять на физику работы прибора. В более общем случае для приборной структуры важны взаимодействия из следующего набора, а именно: разнообразных объектов различной размерности (3D, 2D, 1D, 0D), из которых состоит элемент; взаимодействия с окружающей средой, включая другие приборные структуры ИС. Следовательно, в элементе, как правило, встречаются интерфейсные области, например, области перехода между 3D объектами и 2D объектами, как это имеет место в резонансно-туннельном диоде. Подчеркнем, что 3D области в ИС

нанозлектроники будут, по-видимому, встречаться обязательно хотя бы вследствие необходимости "перехода" к нашему макроскопическому миру. Таким образом, имеет место процесс измерения в традиционном в квантовой механике смысле. Ясно, что отмеченные взаимодействия (измерения) могут очень сильно изменять и усложнять физику работы приборных структур по сравнению с входящими в них активными областями (наноструктурами). В-третьих, будут ли должным образом функционировать многие наноструктуры, если их включить в ИС? Ответ на этот вопрос, очевидно, не прост. Так, показано, что далеко не все даже на настоящий момент времени обнаруженные эффекты в низкоразмерных системах, в частности в наноструктурах, могут найти применение в приборах [4, 5]. Следует, по-видимому, ожидать, что многие наноструктуры и эффекты в них в составе ИС будут оказывать "вредное" или паразитное влияние на функционирование ИС. Понятно, что их придется учитывать при разработке ИС нанозлектроники.

Анализ литературы, прежде всего прогнозов большого количества групп различных специалистов в области электроники США, Японии, России, стран ЕС и других стран, приводит к выводу, что создание ИС новых поколений в ближайшие десятилетия будет происходить на основе кремниевых технологий, включая использование новых материалов, в том числе наноматериалов, путем дальнейшего уменьшения активных областей элементов при одновременном ограничении токов утечки, повышения плотности упаковки приборных структур, увеличения размеров пластины, модернизации схемотехнических и архитектурных подходов, например переход на создание систем-на-пластине, трехмерная интеграция и др. *Принципиально важным при этом будет являться улучшение (расширение возможностей, повышение адекватности, эффективности, надежности и др.) методов и средств автоматизированного проектирования и*

моделирования. Таким образом, развитие будет происходить, судя по всему, эволюционным (плавным) путем.

На этом непростом пути основными, по-видимому, будут являться элементы из четырех типов приборных структур. Приведем следующее высказывание двух известных российских ученых в области микроэлектроники [6]: "Приборы нанозлектроники – это, прежде всего, нанотранзисторы, т.е. транзисторы с классической МДП-структурой, но с длиной канала менее 100 нм, одноэлектронные приборы, туннельно-резонансные диоды и транзисторы". Автор разделяет эту точку зрения по поводу трех отмеченных важнейших типов приборных структур, однако, считает необходимым сюда же добавить приборы на квантовых проволоках (четвертый тип). Несмотря на то, что приборы последнего типа наименее разработаны и исследованы, а их применение в ИС приведет к повышению требований к нанотехнологическим методам, в частности к чистоте материалов, они перспективны для применения в ИС по следующим причинам. Во-первых, они как бы являются закономерным продолжением миниатюризации межсоединений, контактных систем ИС на нанометровые размеры, а следовательно, отлично "вписываются" в планарную технологию изготовления ИС. Во-вторых, здесь хорошо просматривается аналогия с волноводами СВЧ-электроники. Это как бы естественное распространение СВЧ-электроники на нанозлектронику. В-третьих, достижения последних лет по созданию приборных структур на квантовых проволоках, в частности углеродных нанотрубках, просто нельзя не отметить.

Итак, основными типами нанозлектронных приборных структур для данной работы будут являться: 1) нанотранзисторы с МДП-структурой; 2) резонансно-туннельные структуры (диоды и транзисторы); 3) одноэлектронные структуры (транзисторы и

многоостровковые структуры); 4) структуры на основе квантовых проволок.

Первое (ведущее) место нанотранзисторов с МДП-структурой в настоящее время фактически не вызывает сомнений [6 – 9]. Заметим, что физика их функционирования будет существенно отличаться от физики классического МДП-транзистора. На второе место поставлены резонансно-туннельные структуры, так как на их основе уже созданы наноэлектронные ИС, производимые серийно. Правда пока на соединениях типа $A^{III}B^V$ и невысокой степени интеграции [10]. Одноэлектронные структуры могут "возникнуть" в результате дальнейшей естественной миниатюризации традиционной флэш-памяти микроэлектроники. Кроме того, уже сейчас очевидно, что одноэлектронные приборные структуры могут быть в принципе уменьшены до атомных размеров! В связи с изложенным, несмотря на возможные серьезные проблемы, второй – четвертый типы, т.е. "чисто" наноэлектронные приборные структуры", по-видимому, найдут применение в сверхинтегрированных ИС. Сначала, возможно, в ИС гибридной наноэлектроники в функционально-интегрированных с МОП-транзисторами структурах. По-видимому, это наиболее реальное другое (по сравнению с нанотранзисторами с МДП-структурой) направление создания ИС новых поколений (степень интеграции 10^{10} элементов на кристалле и выше). Допустимо также создание (комбинированных) приборных структур, в которых будет наблюдаться комбинация квантовомеханических эффектов, а не один доминирующий (более глубокая функциональная интеграция!).

Здесь целесообразно вспомнить историю развития микроэлектроники. В результате конкурентной жесточайшей "борьбы", продолжающейся десятилетия, из множества

* Иногда их также называют "классическими наноэлектронными приборными структурами".

приборных структур основными фактически остались две: МОП-транзистор и биполярный транзистор. Поэтому еще рано говорить об основной приборной структуре нанoeлектроники. В настоящее время можно лишь утверждать, что в ИС новых поколений следующие квантовые эффекты найдут полезное применение, а именно: туннелирование (резонансное, последовательное, одноэлектронное и др.), размерное квантование, квантовая интерференция. Они попросту будут являться естественным результатом дальнейшей миниатюризации активных элементов. Скажем так, что влияние этих физических эффектов начнет быть существенным и ими уже нельзя будет пренебречь, как в приборных структурах микроэлектроники [11,12]. По изложенным причинам в этой главе и будут рассмотрены основные квантовомеханические формализмы, которые целесообразно использовать при моделировании выделенных четырех типов приборных структур твердотельной нанoeлектроники.

Это не означает, что другие приборные структуры не представляют интерес. Отметим следующие направления в нанoeлектронике, которые могут привести к созданию высокоинтегрированных информационных систем: 1) схемы на сверхпроводниках, включая высокотемпературные; 2) спинтроника; 3) молекулярная нанoeлектроника.

В настоящее время большие надежды возлагаются на молекулярную нанoeлектронику [5,8,9]. Однако она, к сожалению, находится лишь в "зачаточном" состоянии, и тут предстоит разрешить очень много проблем. О том что здесь, в принципе, может быть достигнут значительный успех свидетельствуют такие информационные системы как мозг человека [1]. Сверхсложной проблемой, по-видимому, будет разработка соответствующих технологий. *Промежуточным, возможно вынужденным, решением может стать, например, модернизация или модификация естественных биологических* (в

данном случае технологических) процессов, т.е. необходимо, по-видимому, использовать подход "от имеющегося", а не наоборот. Данный подход, вообще говоря, не относится ни к методу "сверху-вниз", ни к методу "снизу-вверх", используемым и интенсивно развиваемым в настоящее время в нанотехнологии [5]. Здесь, очевидно, также непростой путь, включая преодоление очень серьезных морально-этических проблем. Таким примером может служить клонирование человека. Целесообразно задуматься и о возможности "слияния" технологий, т.е. какого-то объединения процессов типа "сверху-вниз" и "снизу-вверх" [13] или их комбинации.

Посмотрим на проблему с другой стороны. Уже сейчас ясно, что предельные минимальные размеры активных приборных структур в ИС будут определяться размерами атомов и молекул, а возможно, – ядер и электрона. Поэтому поиск и создание новых приборных структур в нанoeлектронике, отличающихся от отмеченных и рассматриваемых далее, необходим. Существенные коррективы в данный процесс может внести чрезвычайно бурное развитие новых методов нанотехнологии, создание новых наноматериалов [5,14]. Несмотря на это, автор надеется, что, по крайней мере, некоторые из отмеченных в книге проблем, принципов и походов будут также важны или встретятся и для возможных новых приборных структур нанoeлектроники.

4.2. Основные формализмы

Вернемся к сформулированному в [1] парадоксу. В его справедливости мы фактически убедились при рассмотрении моделей элементов микроэлектроники [11,12]. Ситуация не изменяется и для приборных структур нанoeлектроники, что также не удивительно. В целом, это связано с тем, что чем меньше размеры структуры, то тем меньше носителей определяют характер функционирования прибора. В то же время

системы с меньшим числом частиц, как правило, менее устойчивы и более подвержены различным влияниям. Результатом является большая чувствительность процессов, протекающих в элементе, к различным воздействиям. Поэтому в физико-математической модели необходимо учитывать многие факторы и детали. Как итог, происходит усложнение модели, иногда существенное. При этом *становится фактически невозможным применение хорошо отработанных методов статистической физики, справедливых для большого количества частиц и которые эффективно использовались ранее в рамках полуклассического подхода [11, 12]. Это и является одной из основных проблем, возникающих при моделировании многих наноэлектронных приборных структур. В результате, как правило, необходимо применять в качестве базового один из следующих формализмов квантовомеханического подхода, а именно [15]: 1) волновых функций; 2) матриц плотности; 3) функций распределения Вигнера; 4) функций Грина; 5) фейнмановских интегралов по траекториям.*

Когда и какой формализм необходимо применять? Ответить на эти два вопроса очень непросто. Попытаемся это сделать в оставшейся части книги.

Вопрос о необходимости использования квантовомеханического подхода вообще нами уже анализировался ранее и связывался с соизмеримостью характеристической длины прибора или размеров технологических неоднородностей $L_{хар}$ с длиной волны де Бройля λ_B [1,11]. Это правильная в целом оценка, однако, сделаем несколько замечаний.

Во-первых, при описании транспорта в очень малых полупроводниковых приборных структурах количество параметров (физических оценочных параметров длины, времени, частоты, скорости и др.), которые являются важными характеристиками процессов, оказывающих влияние на их

поведение, может быть, по крайней мере, более 35 [16]. Причем в [16] приведен в общем-то далеко не полный перечень! Ясно, что использовать их все при оценке практически невозможно. Во-вторых, в мезоскопических образцах, представляющих для нас бесспорный интерес, транспорт традиционно характеризуют следующими основными параметрами: длина волны де Бройля электронов (на поверхности Ферми), длина свободного пробега при упругом рассеянии (или время релаксации импульса), длина фазовой когерентности. В-третьих, хорошо известно, что основными характеристическими параметрами при описании квантового транспорта являются: длина волны де Бройля λ_B и длина фазовой когерентности λ_φ . Таким образом, рассматриваемый вопрос достаточно сложен и, вообще говоря, должен анализироваться в каждом конкретном случае приборной структуры и воздействий на нее. Поэтому сравнение $L_{хар}$ с λ_B , как одной из основных квантовых характеристик микрочастицы, должно рассматриваться лишь как определенный оценочный ориентир.

В настоящее время существует много разнообразных формализмов и методов квантовомеханического описания транспорта в твердых телах. Здесь рассмотрим лишь основные.

4.2.1. Формализм волновых функций

Наиболее полное описание состояния частицы (или системы) в квантовой механике, как известно, базируется на волновых функциях. Основное уравнение данного формализма – уравнение Шредингера, а именно [17,18]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(q,t), \quad (1)$$

где \hbar – постоянная Планка, деленная на 2π ; Ψ – волновая функция; \hat{H} – оператор Гамильтона (гамильтониан); q –

координаты точки пространства конфигураций; i – мнимая единица. Данное уравнение является одним из ключевых в квантовой механике и фактически постулируется. В случае необходимости учета спина оно соответствующим образом модифицируется [17,18].

Как следует из (1), особая и, по существу, главная роль в квантовой механике (среди операторов) отводится гамильтониану, так как, задавая его, формулируются в математическом виде все особенности исследуемой системы. Поэтому составление данного оператора изучаемого объекта (системы) является, пожалуй, ключевой проблемой физико-математической постановки задачи. И это бесспорно так при моделировании сложных объектов, в частности приборных структур наноэлектроники. В целом, " успех решения задачи, в смысле согласования выводов теории с опытом уже предопределяется тем, насколько основательно выбран гамильтониан (все ли важнейшие взаимодействия учтены!) " [18]. К сожалению, это крайне тяжело сделать для приборов наноэлектроники, так как все детали взаимодействий, очевидно, учесть не удастся. Последнее связано со следующими основными причинами: неполнотой экспериментальных данных об исследуемых приборных структурах и достаточно невысоким уровнем наших познаний в рассматриваемой области. Гамильтониан определяется двумя факторами: природой анализируемой системы и природой действующих на эту систему полей. Поэтому при моделировании наноэлектронных приборных структур уравнение (1) должно быть дополнено уравнениями для микрополей, например уравнениями Лоренца, что еще больше усложняет модель. Другой комплекс важнейших проблем в процессе постановки задачи возникает при формулировке граничных условий.

Кроме шредингеровского представления, в котором вся информация о временном развитии системы перенесена на

волновую функцию $\Psi(q,t)$, удовлетворяющую (1), иногда используются гейзенберговское представление и представление взаимодействия [17,18]. Считается, что в большинстве случаев решить непосредственно уравнение Шредингера (1) легче, чем соответствующие матричные уравнения, например в гейзенберговском представлении. Это особенно важно при реализации моделей на вычислительной технике со средними возможностями, в частности для таких сложных объектов как нанoeлектронные приборы. Другие представления бывают часто удобны при поиске приближенного решения задачи. В целом же необходимо заметить, что данных три представления (метода) эквивалентны, хотя соответствующие волновые функции различаются.

Для нас также важно отметить, что аналогом шредингеровского представления операторов и волновых функций в классической механике является метод Гамильтона – Якоби. Подобные аналогии из классической механики имеются для всех других основных квантовомеханических формализмов [17, 18]. Именно это и является первопричиной подобия иерархии моделей квантовомеханического и полуклассического подходов [11].

К сожалению, для формализма волновых функций свойственен один недостаток. Для смешанных ансамблей, что характерно для приборных структур нанoeлектроники, находится набор волновых функций. Иногда это неудобно и может сводить на нет отмеченное преимущество данного формализма, например в шредингеровском представлении, при построении экономичных квантовомеханических моделей. Поэтому более целесообразны в таких случаях для смешанных ансамблей могут быть другие формализмы.

4.2.2. Формализм матриц плотности

Статистический оператор (матрица плотности) $\hat{\rho}$ позволяет единообразно описывать как чистые, так и смешанные ансамбли, поэтому рассмотрение с его помощью традиционно считается наиболее общей формой квантовомеханического описания системы [17]. Важно заметить, что для смешанных ансамблей отнюдь нет необходимости находить состояния составляющих их чистых ансамблей.

Основным уравнением формализма является уравнение Лиувилля – фон Неймана [17,18]:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -[\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (2)$$

где $[\hat{H}, \hat{\rho}]$ – квантовая скобка Пуассона, а матрица плотности задается с помощью соотношения

$$\hat{\rho} = \sum_n |\Psi_n\rangle w_n \langle \Psi_n|, \quad (3)$$

причем $\sum_n w_n = 1$.

Здесь $|\Psi_n\rangle$ – вектор n -состояния, w_n – вероятность этого состояния. Отметим, что уравнение Лиувилля – фон Неймана – исходное и в другой концепции представления открытых систем на микроуровне [1], правда, в оснащенных гильбертовых пространствах. Так же как и ранее, при моделировании элементов наноэлектроники уравнение (2) необходимо дополнить уравнениями для микрополей.

С помощью статистического оператора можно описать движение микрочастицы, а также микро- и макроскопические системы и взаимодействие между ними. Последнее чрезвычайно важно для наноэлектронных приборных структур, включающих, как уже отмечалось, классические области и наноструктуру (наноструктуры). Нетрудно также заметить подобие уравнения

(2) с уравнением Лиувилля классической статистической физики. Более того, квантовое уравнение формально переходит в классическое в пределе $\hbar \rightarrow 0$, при достаточной гладкости потенциала и начальной матрицы плотности. В связи с этим небезосновательна точка зрения [19] о том, что квантовая механика – прямое обобщение классической статистической механики.

Одной из ключевых проблем при анализе открытых квантовых систем в рамках выбранного традиционного подхода [1] является редукция полной задачи для закрытой квантовой системы к описанию изучаемой и входящей в нее открытой системы. Согласно [19] " под открытой квантовой системой понимается система A с ограниченным числом степеней свободы f_A , взаимодействующую с другой системой B , имеющей неограниченное (или очень большое) число степеней свободы f_B ". Заметим, что данное определение не противоречит определению И. Пригожина, приведенному в [1], и с точки зрения автора лучше подходит для анализа приборных структур наноэлектроники.

В соответствии с приведенным определением гамильтониан всей (замкнутой) системы $(A+B)$ может быть представлен в виде [19]:

$$\hat{H} = \hat{H}_A(x) + \hat{H}_B(Q) + \hat{W}_{AB}(x, Q), \quad (4)$$

где $\hat{H}_A(x)$ – гамильтониан изолированной системы A ; $\hat{H}_B(Q)$ – гамильтониан изолированной системы B ; $\hat{W}_{AB}(x, Q)$ – оператор энергии взаимодействия систем A и B ; x – координаты системы A ; Q – координаты системы B .

Если $\hat{\rho}_{AB}(t)$ – статистический оператор всей системы, то необходимо решить уравнение (2) в виде:

$$\partial \hat{\rho}_{AB} / \partial t = -[\hat{H}, \hat{\rho}_{AB}], \quad (5)$$

где \hat{H} задается (4). Для нас же больший интерес представляет поведение исследуемой малой открытой системы A (приборной структуры). Статистический оператор данной системы $\hat{\rho}_A(t)$ выражается с помощью соотношения [19]:

$$\hat{\rho}_A(t) = Tr_B \hat{\rho}_{AB}(t), \quad (6)$$

где Tr_B – след, который берется только по переменным системы B . К сожалению, получить точное уравнение для $\hat{\rho}_A(t)$ практически невозможно [19].

Таким образом, мы приходим к двум важным и неутешительным выводам о том, что *сформулировать строгий гамильтониан, а также построить соответствующее уравнение для матрицы плотности нанозлектронной приборной структуры, как открытой системы, фактически не представляется возможным! Это и является двумя "стартовыми" проблемами моделирования элементов нанозлектронных ИС. Поэтому единственный выход из создавшейся ситуации – вывод приближенных уравнений. Это и является "стратегической линией" при разработке моделей приборов и элементов нанозлектроники. Следовательно, как и для полуклассического подхода [11], после "первого шага" введение дополнительных допущений фактически обязательно и для квантовомеханического подхода.*

При построении уравнения для статистического оператора можно выделить ряд важных случаев (приближений) [19,20]: 1) система A практически не влияет на большую систему B ; 2) систему B можно описать с использованием методов классической статистической физики; 3) малая микроскопическая система A управляет большой макроскопической системой B . Все три случая представляют существенный интерес при рассмотрении приборов и элементов ИС нанозлектроники. В настоящее время для приборных структур обычно исследуется первый случай, хотя и

являющийся серьезным упрощением проблемы, однако для него удастся получить практически важные результаты, в частности рассчитать вольт-амперные характеристики и другие электрические параметры приборов. В результате исходное уравнение (5) может быть сведено к гораздо более простому "управляющему уравнению" (система B управляет A), что чрезвычайно важно при построении модели.

Рассмотренное уравнение для матрицы плотности (5) в шредингеровском представлении. Иногда удобным бывает использование соответствующих уравнений в гейзенберговском представлении и представлении взаимодействия. В гейзенберговском представлении матрица плотности не зависит от времени и поэтому необходимо исследовать эволюцию других операторов. В случае, когда гамильтониан может быть разбит на две части:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}, \quad (7)$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан более простой системы или системы в отсутствии возмущения; \hat{W} – оператор энергии возмущения, удобным бывает представление взаимодействия. Уравнение Лиувилля – фон Неймана в этом представлении упрощается, так как в скобки Пуассона войдет только \hat{W} , что часто более удобно при получении упрощенных уравнений.

Дальнейшее упрощение уравнений может быть осуществлено путем перехода к одночастичным матрицам плотности. Для этого часто эффективно используется метод вторичного квантования [17,18], который применяется при решении задач для ансамблей одинаковых частиц, а также с переменным их количеством. К сожалению, аналогично полуклассическому случаю [11], при переходе к одночастичным матрицам плотности выводится иерархия уравнений, в которой в уравнении для одночастичной матрицы плотности входит двухчастичная матрица плотности и т.д. При получении

упрощенных уравнений приходится также вводить условия ослабления корреляций и другие [20,21] для того, чтобы оборвать цепочку уравнений. В целом схема метода Боголюбова вывода и квантовых кинетических уравнений остается без изменений [20].

Таким образом, при использовании формализма матриц плотности при выводе квантовых кинетических уравнений возникают подобные полуклассическому случаю проблемы [11], поэтому принципы и методы их разрешения схожи. Это значительно упрощает непростую задачу рассмотрения проблем и принципов моделирования приборов наноэлектроники, несмотря на относительно невысокий уровень развития данной сложнейшей области.

4.2.3. Формализм квантовых функций распределения

В квантовых теориях систем, включая открытые, часто еще более удобным является другое описание на основе квантовых функций распределения или функций Вигнера [20,22]. Во многом это связано с определенным соответствием в данном случае с классическим описанием на основе функций распределения [11].

Пусть для системы, состоящей из N частиц, матрица плотности в координатном представлении обозначается $\rho_N(q', q'', t)$, где $q = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$; $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ – координаты соответствующих частиц. Функция Вигнера в данном случае – матрица плотности в смешанном представлении координат и импульсов, а именно [20,22]:

$$f_N(q, p, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3N}} \int \rho_N\left(q + \frac{1}{2}\hbar\gamma, q - \frac{1}{2}\hbar\gamma, t\right) \exp(-i\gamma p) d\gamma, \quad (8)$$

где q, p – $3N$ -мерные векторы, $p = (\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$; $\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N$ – импульсы соответствующих частиц. Следовательно, функция

Вигнера связана с матрицей плотности в координатном представлении. Так как функция Вигнера может принимать отрицательные значения, то не является функцией распределения в традиционном смысле, используемом в классической статистической физике. Тем не менее после интегрирования по координатам или по импульсам получаются положительно определенные функции распределения по импульсам или по координатам, имеющие ясный физический смысл.

Используя непосредственно уравнение для матрицы плотности в координатном представлении в качестве исходного, с помощью (8) можно легко получить уравнение для функции Вигнера [22]:

$$\frac{\partial f_N(q, p, t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar(2\pi)^{6N}} \times \\ \times \int [H(q' - \frac{1}{2}\hbar\gamma, p' + \frac{1}{2}\hbar\tau) - H(q' + \frac{1}{2}\hbar\gamma, p' - \frac{1}{2}\hbar\tau)] \times \quad (9) \\ \times f_N(q', p', t) \exp[i(p' - p)\tau + i(q' - q)\gamma] d\tau d\gamma dq' dp',$$

где $H(p, q)$ – функция Гамильтона. Подчеркнем, что уравнение (9) уже не содержит операторов в отличие от исходного уравнения для матрицы плотности (2), однако, к сожалению, является интегро-дифференциальным. Предельный переход от данного уравнения к классическому осуществляется путем разложения подынтегрального выражения по степеням \hbar . В результате, в первом приближении получается классическое уравнение для многочастичной функции распределения, совпадающее с уравнением Лиувилля [22].

Подобно, как и ранее для матрицы плотности, кардинальное упрощение квантового уравнения (9) может быть осуществлено путем перехода к одночастичным функциям Вигнера и введения предположений для обрыва цепочки уравнений [20,22]. В итоге выводится квантовое кинетическое уравнение, которое в

пределе при $\hbar \rightarrow 0$ переходит в кинетическое уравнение Больцмана.

В связи с изложенным выше функция Вигнера небезосновательно называется формальным аналогом классической функции распределения и рассматривается как обобщение последней на квантовый случай [20]. Тем самым устанавливается еще более тесная связь между квантовой механикой и классической статистической физикой, лежащей в основе полуклассического подхода. В целом, описанный формализм считается одним из наиболее удобных для построения квантовых теорий открытых систем [22], к которым мы отнесли приборные структуры микро- и наноэлектроники [1].

Таким образом, *квантовомеханический подход, основанный на формализме функций Вигнера, может рассматриваться как прямое расширение полуклассического подхода на случаи необходимости учета квантовых эффектов в приборных структурах. Поэтому при описании приборов и элементов микро- и наноэлектроники используется, строго говоря, квантовомеханический подход в сочетании с различными предположениями (огрублениями по пространству, времени и др.). Наиболее кардинальные, общепринятые приближения и приводят к полуклассическому подходу. Следовательно, может быть построена единая иерархия моделей квантовомеханического подхода, включающая и рассмотренные модели полуклассического подхода [11].*

4.2.4. Формализм функций Грина

В упрощенных теориях квантового транспорта при сокращенном описании систем удобным является и еще один формализм – формализм функций Грина [21,23]. И в этом случае матрица плотности (функция Вигнера) в координатном представлении

имеет непосредственную связь с функциями Грина. Важно отметить, что знание данных функций достаточно для решения задач квантового транспорта.

Вывод кинетических уравнений для функций Грина, к сожалению, сложен. Это связано со следующими причинами: 1) функции Грина, используемые на практике, – это обычно одночастичные функции, а следовательно, учесть строго влияние других объектов системы практически невозможно; 2) количество необходимых при рассмотрении задачи различных, хотя и зависимых, функций для неравновесных явлений может быть равным шести, в том числе две традиционные – запаздывающая и опережающая функции Грина; 3) в получаемом упрощенном уравнении (уравнениях) типа Дайсона [23] и других для функции (функций) Грина появляются собственно-энергетические части, которые учитывают взаимодействие единственной частицы с ее окружением многочастичной системы, предысторию частицы и должны быть получены с помощью дополнительных соотношений. Последняя ситуация подобна с возникающей и рассмотренной в рамках полуклассического подхода [11], в частности в кинетическое уравнение Больцмана в интеграл столкновений входят скорости рассеяния, для которых необходимо получить соответствующие соотношения. Данный формализм достаточно часто и успешно применяется при описании квантового транспорта в твердом теле при анализе различных частных случаев. К сожалению, с усложнением задачи при его использовании затраты вычислительных ресурсов становятся очень значительными даже для высокопроизводительных систем.

4.2.5. Фейнмановские интегралы по траекториям (путям)

Кроме традиционной формальной схемы квантовой механики, основанной на уравнении Шредингера, для описания открытых систем иногда используется фейнмановская формулировка квантовой механики [18,24]. В данном случае вместо гамильтонова формализма в качестве исходного применяется лагранжев метод. Здесь основной объект – пропагатор, который позволяет связать волновую функцию $\Psi(q, t)$ с ее начальным значением $\Psi(q_0, t_0)$. Его знания также достаточно для описания квантовой системы. Достоинствами данного формализма считаются его физическая наглядность и более тесная связь с классической физикой.

К сожалению, данный формализм в общем случае является неудобным и достаточно громоздким в математическом плане. По крайней мере в его рамках сложно учитывать влияние зонной структуры [25]. Поэтому небезосновательно считается, что *для практических целей более удобно использовать непосредственно уравнение Шредингера с эффективным комплексным гамильтонианом*, так как математический аппарат рассматриваемого формализма может быть сведен именно к этому случаю [26]. С помощью данного подхода могут быть также получены уравнения для редуцированных матриц плотности открытых систем [26].

В целом, этот формализм является одним из интересных, перспективных подходов получения упрощенных уравнений для описания квантового транспорта в открытых системах, несмотря на относительно слабую степень его разработанности на настоящий момент времени.

Таким образом, рассмотренные формализмы – эквивалентны. В чем же тогда смысл применения того или иного формализма? Можно назвать, по крайней мере, четыре часто встречающихся

причины использования конкретного формализма, а именно: 1) удобнее постановка задачи; 2) проще редуцирование к описанию непосредственно исследуемой системы; 3) легче получить решение задачи; 4) удобнее интерпретация полученных результатов. Например, как уже отмечалось, важное преимущество формализма функций Вигнера – возможность естественного вывода упрощенных квантовых кинетических уравнений, часто используемых на практике при моделировании нанoeлектронных приборных структур.

4.3. Общие замечания

Проведенный анализ показывает, что многие утверждения, касающиеся проблем и принципов моделирования приборных структур микроэлектроники и рассмотренные ранее [11,12], будут полезны и здесь. Так, можно также выделить четыре комплекса проблем: физические; математические; разработки программного обеспечения; определяемые вычислительной техникой, оборудованием, идентификацией параметров моделей и заданием исходных данных. Принципиально важной является AP-проблема [12], связанная с главной проблемой моделирования – неполнотой описания модели [1]. Бесспорно важны и многие рассмотренные в [11,12] проблемы: граничных условий, оценки адекватности модели, электрофизических параметров и др. Следует сразу же отметить, что данные проблемы при моделировании приборных структур нанoeлектроники, как правило, еще сложнее.

Сначала рассмотрим лишь наиболее "острые" проблемы в целом. При постановке задачи возникает сразу несколько серьезных проблем, отмеченных ранее, а именно: запись гамильтониана; получение системы уравнений; формулировка граничных условий. Уже подчеркивалось, что запись точного гамильтониана для приборной структуры, как открытой системы, фактически невозможна, а следовательно, строгая

система уравнений также не может быть получена. Более того, даже если бы это было достижимо, то учесть всю гамму важных факторов при моделировании конкретного элемента практически не представляется возможным. Это связано с тем, что здесь *на поведение прибора могут оказывать существенное влияние разного рода флуктуации*, а именно: в распределении отдельных ионов примеси внутри структуры; отдельных зарядов на поверхности раздела и др. К сожалению, влияние флуктуаций на поведение приборных структур наноэлектроники мало исследовано. Поэтому *зачастую мы в определенном смысле моделируем усредненную (в статистическом смысле!) приборную структуру*. Таким образом, хотя мы вроде бы отказались от классической статистической физики, она к нам "навязчиво приходит" с другой стороны. К этой проблеме в задании исходных данных можно добавить очень существенную в рассматриваемом случае проблему задания электрофизических параметров, которая, к сожалению, также часто игнорируется. Известно, что при моделировании элементов наноэлектроники электрофизические параметры, как правило, задаются соответствующими объемным материалам. Это, мягко говоря, проблематично, так как хорошо известно, что электрические, магнитные и другие свойства наноструктурных материалов, к которым можно отнести изучаемые нами объекты, часто существенно изменяются [5,14]. Для смягчения этой проблемы необходимо детальное моделирование электрофизических свойств структуры элементов наноэлектроники. Идеальным, вообще говоря, было бы совместное моделирование электрофизических и электрических параметров и характеристик приборных структур. Проводимые исследования в этом направлении, однако, явно недостаточны. В итоге можно прийти к не очень утешительному выводу: *при моделировании приборных структур наноэлектроники в настоящее время многие результаты должны рассматриваться лишь как весьма приближенные или качественные, особенно по внутренним*

переменным, хотя бы вследствие отмеченных неопределенностей.

Некоторые основные направления разрешения ключевых проблем уже отмечались. Заметим, что многие принципы и пути разрешения указанных проблем будут, по крайней мере, схожи со случаем моделирования приборных структур микроэлектроники, а в ряде ситуаций просто остаются в силе. К сожалению, модели приборных структур наноэлектроники менее разработаны, поэтому не всегда на настоящий момент времени можно подтвердить сказанное. Уверенность в этом часто вселяет подобие моделей полуклассического и квантовомеханического подходов, т.е. фактически первопричина данного утверждения. Например, оказывается, что наиболее удачно АР-проблема и для приборных структур наноэлектроники часто разрешается с помощью комбинированных моделей. Применение указанных в [1] методов синтеза также приводит ко всему разнообразию известных моделей элементов наноэлектроники физического типа. *Вследствие принципиальной необходимости получения приближенных уравнений и здесь полезно понятие грубости модели [12]. Первые и важнейшие действия при построении таких моделей, как правило, – использование свойств симметрии и размерности изучаемой системы.*

Список литературы к главе 4

1. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34 – 37.
2. Владимирский Б.М., Чораян О.Г. Нейрокибернетика в начале нового века // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2002. № 7-8. С. 4 – 14.

3. Кирой В.Н., Сухов А.Г. Что и как вычисляет мозг – взгляд нейрофизиологов // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2002. № 7-8. С. 82 – 96.
4. Kelly M.J. The poor prospects for one-dimensional devices // Int. J. Electronics. 1993. V.75, N1. P.27 – 40.
5. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований / Под ред. М.К. Роко, Р.С. Уильямса, П. Аливисатоса. М.: Мир, 2002. 292 с.
6. Валиев К., Орликовский А. Новое поколение элементной базы микроэлектроники: Кремниевый нанотранзистор сохраняет свои позиции // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. 2000. № 4. С.46 – 49.
7. International Technology Roadmap for Semiconductors: 1999 edition. Austin, TX: International SEMATECH, 1999; 2001 edition, 2002 update; 2003 edition, 2004 update; 2005 edition.
8. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Ed. by R. Compañó, L. Molenkamp, D.J. Paul. EC IST programme Future and Emerging Technologies, 1999. 81 p.
9. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Ed. by R. Compañó. EC IST programme Future and Emerging Technologies, Second Edition, 2000. 104 p.
10. Resonant-tunneling mixed-signal circuit technology / A. Seabaugh, B. Brar, T. Broekaert, F. Morris, P. van der Wagt, G. Frazier // Solid-State Electron. 1999. V.43. P. 1355 – 1365.
11. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26 – 36.
12. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. III. Численное моделирование в рамках полуклассического

подхода // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 1. С. 36 – 47.

13. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. 134 с.

14. Наноматериалы и нанотехнологии / Ж.И. Алферов, А.Л. Асеев, С.В. Гапонов, П.С. Копьев, В.И. Панов, Э.А. Полторацкий, Н.Н. Сибельдин, Р.А. Сулис // Микросистемная техника. 2003. № 8. С. 3 – 13.

15. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн.: БГУ, 1999. 189 с.

16. Barker J.R., Ferry D.K. On the physics and modeling of small semiconductor devices // Solid-State Electron. 1980. V.23, N 6. P. 519 – 549.

17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Учебное пособие. М.: Наука, 1974. 752 с.

18. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. Учебное пособие. М.: Наука, 1976. 664 с.

19. Блохинцев Д.И. Квантовая механика: Лекции по избранным вопросам. Учебное пособие. М.: Атомиздат, 1981. 96 с.

20. Гуров К.П. Основания кинетической теории (метод Боголюбова). М.: Наука, 1966. 352 с.

21. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 368 с.

22. Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. Т.3. Физика квантовых открытых систем. М.: Янус – К, 2001. 508 с.

23. Займан Дж. Современная квантовая теория. М.: Мир, 1971. 288 с.

24. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968. 383 с.
25. Quantum Transport in Semiconductors / Ed. by D.K. Ferry, C. Jacoboni. New York, London: Plenum Press, 1992. 292 p.
26. Менский М.Б. Квантовые измерения и декогеренция. М.: Физматлит, 2001. 232 с.

ГЛАВА 5

РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ

В данной главе систематизированы и проанализированы модели резонансно-туннельных приборных структур твердотельной наноэлектроники.

Основными приборами на эффекте резонансного туннелирования в многослойных твердотельных структурах [1 – 3] являются диоды и транзисторы [1 – 5]. С использованием резонансно-туннельных диодов (РТД) и транзисторов (РТТ) разработано большое количество разнообразных аналоговых, цифровых и аналогово-цифровых схем [4 – 8]. При этом обращают на себя внимание удачные примеры интеграции РТД и РТТ с такими приборными структурами микроэлектроники, как диоды Шоттки, КМОП-элементы, гетероструктурные биполярные транзисторы, гетероструктурные полевые транзисторы с селективным легированием и др. Более того, возможно создание функционально-интегрированных элементов, включающих РТД, РТТ и элементы микроэлектроники. В данных случаях речь часто идет об элементах гибридной наноэлектроники. В целом схемы, включающие РТД и РТТ, обладают следующими основными достоинствами, например по сравнению с традиционными логическими схемами (КМОП и др.), а именно [6]: 1) относительно меньшей сложностью схем на одну выполняемую функцию; 2) более низкой мощностью; 3) повышенным быстродействием. Отметим, что в настоящее время созданы РТД с частотами функционирования более 2 ТГц. Это самые быстродействующие приборы твердотельной электроники. Рассмотренные причины и привели к выводу [8], что РТД является "наиболее "созревшей" из всех приборных технологий"

нанозлектроники. Необходимо отметить перспективность использования резонансно-туннельных структур и в оптоэлектронике [9]. Принципиально важным является работоспособность ряда приборных структур нанозлектроники данного типа при комнатных температурах.

Проанализируем модели РТД, как наиболее развитые в настоящее время среди моделей не только резонансно-туннельных приборов, но и других, по крайней мере классических приборных структур нанозлектроники. Это, с одной стороны, позволит провести достаточно полную систематизацию моделей, а с другой, – прогнозировать основные направления создания моделей элементов нанозлектроники других типов, а также выделить перспективные принципы их моделирования.

Несмотря на то, что казалось бы относительно простой принцип функционирования РТД [1 – 3], протекающие в реальном приборе физические процессы, как правило, существенно усложняются вследствие следующих факторов: прибор является квантовой открытой системой, так как имеет место обмен энергией и частицами, в частности с источником питания, а следовательно, принципиально важны его взаимодействия с окружением (включая влияние температуры окружающей среды); электроны в приборе могут рассеиваться на фонах, неровностях поверхностей раздела, примесях, дефектах, электронах и др.; значительное влияние могут оказывать различного рода флуктуации (толщин слоев, распределения примеси, состава и др.); важна реальная зонная структура исследуемой системы; значительное влияние могут оказывать заряды на поверхностях раздела и др. Эти факторы существенно усложняют задачу, приводят к дополнительным к резонансному и последовательному туннелированию механизмам транспорта и делают ее фактически неразрешимой в строгом виде даже для

РТД. К сожалению, практически невозможна и строгая постановка задачи моделирования конкретного РТД.

Как же поступить в данном случае? На помощь приходит понятие грубости модели [10]. Использование трех методов синтеза моделей [11, 12] приводит также к созданию моделей двух основных разновидностей [12]: физико-топологических и электрических. При этом в рамках рассмотренных формализмов [13] могут быть, в принципе, построены подобные (полуклассическому подходу [12]) иерархии моделей (см. далее).

Упрощенные модели (см., например обзоры в [14 – 19]), которые в соответствие с определением [12] могут быть названы физико-топологическими, к сожалению, дают малоудовлетворительные результаты. Они, как правило, приводят лишь к грубым качественным оценкам. Так, при расчете таких важных характеристик РТД, как контрастность и крутизна вольт-амперных характеристик (ВАХ), предельная частота генерации погрешность может достигать 100% и намного больше. Для получения удовлетворительных результатов согласования с экспериментальными данными даже по отдельным характеристикам ряд исходных параметров моделей становится чисто подгоночным. Причиной этого является излишне идеализированный характер упрощенных физико-топологических моделей. В них, как правило, учтен лишь основной принцип функционирования РТД. При этом не учитывается большинство из отмеченных факторов. В результате, *в настоящее время нет упрощенных моделей, с помощью которых можно было бы удовлетворительно относительно экспериментальных данных рассчитать ВАХ приборных структур на эффекте резонансного туннелирования в более или менее широком диапазоне прикладываемых напряжений, технологических и электрофизических параметров.* Ситуация здесь подобна с некоторыми упрощенными физико-топологическими моделями элементов

микрoэлектроники. Электрические же модели в основном предназначены для анализа схем, включающих резонансно-туннельные структуры. Поэтому далее рассмотрим вопросы численного моделирования с применением более адекватных распределенных дискретных моделей.

5.1. Модели формализма волновых функций

При использовании этого формализма не решается многочастичная задача, которую, строго говоря, необходимо было бы рассматривать при моделировании резонансно-туннельных приборных структур. Традиционным стало применение одночастичного приближения и метода эффективной массы в усредненном поле частиц в приборе (эффективный учет и многочастичных эффектов), приводящих к более простому уравнению Шредингера. В результате многие микроскопические детали не нужны, а следовательно теряются. Преимуществом является то, что такие численные модели относительно просты, могут быть практически реализованы на современных ЭВМ, однако, к сожалению, часто приводят к малоудовлетворительным результатам. Несмотря на то, что в рамках данных моделей доминирующий эффект резонансного туннелирования, в принципе, описывается верно, для адекватного моделирования ВАХ приборных структур необходимо учесть, по крайней мере, некоторые из отмеченных ранее факторов.

Основным исходным уравнением в стационарном случае в одночастичном приближении при использовании метода эффективной массы является уравнение Шредингера следующего вида [20]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (1)$$

где \hbar – постоянная Планка, деленная на 2π ; \vec{r} – радиус-вектор пространства; m^* – эффективная масса частицы; $V(\vec{r})$ – потенциал (эффективный), характеризующий влияние внешних полей; $\psi(\vec{r})$ – одночастичная волновая функция; E – энергия частицы. Традиционно рассматривается одномерный случай.

В классической упрощенной модели Тсу – Есаки [2] было использовано более десяти физических предположений. Кроме отмеченных, дополнительно применялись следующие допущения: пренебрегалось изменением эффективных масс от слоя к слою; период решетки меньше, чем длина свободного пробега носителей; слои моделируются потенциальными барьерами и ямами постоянной высоты и глубины; перенос заряда преимущественно осуществляется одним типом носителей (электронами); однородное поле в структуре; нет источников и стоков на переходных слоях и др. Интересно заметить, что несмотря на то, что "сценарий развития" моделей в рамках данного формализма фактически происходил по пути попытки уменьшить количество предположений модели Тсу – Есаки, некоторые из них остались и в самых высокоадекватных дискретных моделях рассматриваемого формализма (хорошие обзоры численных моделей приведены в [16, 21]). Причина этого в исключительно высокой степени сложности задачи (большая чувствительность к различным воздействиям и др.) и невозможности учета влияния всех отмеченных ранее факторов в полном объеме.

В соответствии с основным уравнением моделей данного формализма (1) две величины обычно и определяют их адекватность – это потенциал $V(\vec{r})$ и эффективная масса m^* . Главные проблемы поэтому здесь связаны с заданием именно этих двух величин. Много, конечно, зависит и от корректности постановки граничных условий. Так как туннелирование – это фактически частный случай одномерного рассеяния, то

основные сложности все же связаны с заданием $V(\vec{r})$. К сожалению, строгое определение этой величины практически невозможно, хотя бы вследствие ее эффективного характера. В [21] приведен перечень ее составляющих, определяемых сдвигом зон на гетеропереходах, прикладываемым напряжением к прибору, профилем легирования и подвижными зарядами, корреляционными и обменными взаимодействиями. В целом, данный потенциал должен учитывать не только эти, но и другие факторы из отмеченных ранее, что значительно усложняет описание поведения РТД. К сожалению, этого пока никто не сделал!

В начале были попытки задать потенциал $V(\vec{r})$ в (1) с помощью простых аналитических аппроксимаций. В результате задача сильно упрощается и необходимо решать только уравнение Шредингера (1). Традиционно при этом считается, что носители движутся баллистически в различных областях структуры. При введении дальнейших упрощений для построения моделей часто используются следующие хорошо известные и отработанные методы: Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна, матриц переноса, сильной связи, аналогии с расчетом линий передач. Более строгие модели обычно основаны на численном решении уравнения Шредингера с помощью методов конечных разностей или матриц переноса (см., например, [16, 21]). К сожалению, модели в которых применяются простые аналитические аппроксимации потенциала $V(\vec{r})$, как правило, дают неудовлетворительные результаты согласования с экспериментом. Очевидно, что это связано с плохой точностью задания $V(\vec{r})$.

В более строгих моделях для нахождения потенциала дополнительно обычно используется уравнение Пуассона [21]. При этом для концентраций подвижных носителей заряда применяются квантовомеханические соотношения, по крайней мере, в квантовой яме (см., например [21 – 24]). Далее

электростатический потенциал φ используется для нахождения $V(\vec{r})$. Таким образом, необходимо решать систему уравнений Шредингера и Пуассона, т.е. самосогласованную задачу. После этого проходящий ток вычисляется на основе известного строгого квантовомеханического соотношения [21] или с помощью формулы Тсу – Есаки [2].

Так как нет работ, в которых бы учитывалась вся гамма отмеченных ранее факторов, то много не только относительно простых, но и численных моделей плохо согласующихся с экспериментальными данными. Удовлетворительное согласование может быть получено с использованием моделей, в которых учитываются, по крайней мере, следующие факторы: заряд квантовой ямы, последовательные сопротивления пассивных областей, рассеяние в квантовой яме. Это достигается с помощью некоторых численных моделей [21 – 23, 25].

Учет заряда в пассивных областях и квантовой яме важен при расчете ВАХ РТД [21]. Не менее важно представление при моделировании структуры РТД в виде подобластей, в частности, где имеет место тепловое равновесие, где можно использовать полуклассический подход (макроскопические области), где принципиально необходимо применять квантовомеханический подход, так как разбиение обычно сильно влияет на заряд в квантовой яме и плотность проходящего тока. Как проводить это разбиение? В настоящее время не совсем ясно, так как оно зависит от таких факторов как структура, прикладываемые смещения и температура. Интересно заметить, что *разработка таких комбинированных моделей, в которых применяются полуклассический и квантовомеханический подходы, фактически обязательна* не только для экономии вычислительных ресурсов ЭВМ, но и вследствие возможных численных проблем при использовании только квантовомеханического подхода для всего прибора.

Учет неупругого рассеяния обычно также является важным [21]. Один из наиболее экономичных подходов здесь основан на введении комплексной составляющей в эффективный гамильтониан [21, 25, 26]. В ряде случаев важен учет многозонных эффектов [21], второго измерения [27], поверхностного заряда на границах раздела [25, 28]. Более того, возможно "усиление" влияния при одновременном учете некоторых из отмеченных факторов, например, температуры и эффектов рассеяния [29], что еще больше усложняет задачу.

Кратко о другой величине. Метод эффективной массы, как известно, является приближенным и, строго говоря, применим в окрестности экстремумов зон полупроводника. Кроме того, m^* – это тензор, а следовательно, использование изотропных по слоям величин при моделировании РТД, по крайней мере, не совсем корректно. Ситуация еще более усложняется вследствие того, что при расчетах эффективные массы берутся равными значениям для соответствующих объемных материалов. Не вызывает сомнений то, что для низкоразмерных областей эти величины могут отличаться от указанных. Вследствие изложенного *при моделировании РТД эффективные массы целесообразно задавать в качестве подгоночных параметров при согласовании с экспериментом, особенно в упрощенных моделях.*

К сожалению, по описанным причинам в настоящее время в рамках рассматриваемого формализма пока не создано модели РТД для расчета ВАХ, которая могла бы быть применима в широком диапазоне конструктивно-технологических параметров и воздействий и при этом позволяла бы получить хорошее согласование с экспериментом. Несмотря на это, модели данного формализма широко используются ввиду их относительной простоты, вычислительной эффективности и, по крайней мере, возможности правильного предсказания

качественного поведения электрических характеристик приборов. В целом, здесь предстоит еще многое сделать.

Кардинальное направление качественного улучшения моделей формализма волновых функций должно быть, по-видимому, в переходе к решению многочастичной задачи и в отказе от использования метода эффективной массы. Серьезные опасения [30] вызывает и обычное применение формулы Тсу – Есаки для плотности тока одномерного приближения. Желательна и разработка двух- и трехмерных моделей. Необходимо также создание более совершенных комбинированных моделей, описывающих взаимодействие классических и квантовомеханических областей на основе иерархии моделей, обладающих требуемой адекватностью моделирования для соответствующих областей прибора. Возможно более строгое рассмотрение и на основе системы уравнений Шредингера, описывающих все подсистемы (например, электроны, дырки, фононы и т.п.), входящие в исследуемую приборную структуру и оказывающие влияние на ее функционирование. Ясно, что эта система уравнений должна учитывать хотя бы определяющие взаимодействия между подсистемами. В целом, модели базирующиеся на формализме волновых функций, целесообразно по-прежнему развивать для приборных структур на эффекте резонансного туннелирования, несмотря на встречающиеся сложности на данном пути.

5.2. Модели формализма матриц плотности

Данный формализм при моделировании РТД используется не часто (см. например [31,32]). При этом обычно рассматривается одночастичная матрица плотности и применяется приближение эффективной массы, а следовательно, упрощенное кинетическое уравнение, которое, строго говоря, необходимо вывести из уравнения Лиувилля – фон Неймана (2) из [13]. Интересный возможный вариант такого подхода описан в книге [32].

Кинетическое уравнение для одночастичной матрицы плотности $\rho(x, x', t)$ записывается в виде [32]

$$i\hbar \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla_x^2 - \nabla_{x'}^2) + V(x) - V(x') \right\} \rho(x, x', t) + i\hbar \left\{ \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} \right\}_c, \quad (2)$$

где t – время, i – мнимая единица, m^* предполагается независимой от координаты x , а последний член в (2) является общим представлением рассеяния, который записывается в полуклассической манере [12, 32]. Это позволяет легко ввести в уравнение квазиуровни Ферми, что существенно облегчает анализ. При моделировании РТД получаемое из (2) уравнение решается совместно с уравнением Пуассона. Основными дополнительными ограничениями данного подхода являются [32]: не включаются антисимметричные компоненты в решаемое уравнение для матрицы плотности; для задания граничных условий на контактах для матрицы плотности используется равновесная функция распределения Ферми – Дирака. К сожалению, в настоящее время не исследована допустимость этих предположений при моделировании приборных структур нанозлектроники. Справедливости ради отметим, что аналогичные недостатки, как правило, характерны и для формализма функций Вигнера (одночастичный случай). Сложности также возникают при задании тока на границах. Для этого необходимо вывести дополнительное соотношение, что не сложно в одномерном случае. В [32] не приведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными, что не позволяет оценить реальные возможности описанного подхода.

К сожалению, формализм матриц плотности при моделировании резонансно-туннельных приборных структур не получил такого

широкого распространения, как в физике твердого тела. Считается [31], однако, что решить уравнение для матрицы плотности проще, чем для функции распределения Вигнера.

5.3. Модели формализма функций Вигнера

Данный формализм при моделировании РТД используется достаточно часто. Впервые он применялся в работе [33], однако без уравнения Пуассона. В дальнейшем [34, 35] начало использоваться кинетическое уравнение для функции Вигнера совместно с уравнением Пуассона. Несмотря на то что вигнеровское представление квантовой механики эквивалентно традиционному, считается, что для формализма функций Вигнера в рассматриваемых задачах свойственны следующие основные достоинства: хорошая применимость для моделирования переходных процессов и малосигнального анализа; наиболее естественный учет процессов рассеяния.

Анализ переходных процессов чрезвычайно важен именно для нанoeлектронных приборных структур, хотя бы вследствие высокой чувствительности данных структур к разнообразным взаимодействиям (возможны, например, различные внутренние неустойчивости, флуктуации на границах). Так, было показано [36, 37], что для адекватного моделирования области отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП) ВАХ ("плато", гистерезис, область внутренней бистабильности) целесообразно исследование переходных процессов. В области "плато", в частности, возникают осцилляции очень высокой частоты (терагерцового диапазона) при постоянных смещениях на РТД. "Плато" же на ВАХ, по-видимому, получается фактически в результате усреднения во времени. Таким образом, для глубокого исследования этих областей желателен нестационарный анализ. Кроме того, необходимо констатировать, что модели формализма волновых функций в настоящее время для анализа переходных процессов менее

развиты, хотя и требуют меньше вычислительных ресурсов ЭВМ [21, 24].

Учет рассеяния также часто принципиально необходим для наноэлектронных приборов, и формализм функций Вигнера позволяет сделать это достаточно естественно. Это связано с отмеченной ранее определенной аналогией получаемых квантовых кинетических уравнений данного формализма с кинетическим уравнением Больцмана (КУБ) [13]. Вспомним, что в полуклассическом подходе учет рассеяния относительно неплохо отработан [12]. Поэтому возможно использование уже наработанных подходов. По описанной причине формализм функций Вигнера более удобен по сравнению с эквивалентным формализмом матриц плотности.

Рассмотрим кратко дискретные модели формализма функций Вигнера. И здесь *ключевыми являются одночастичное приближение и приближение эффективной массы* [21]. В результате квантовое кинетическое уравнение для одночастичной функции Вигнера может быть получено из уравнения Лиувилля – фон Неймана несколькими путями [34], включая вывод с помощью формализма неравновесных функций Грина. Удобной для анализа является следующая форма записи кинетического уравнения (сравни с (2)) для одночастичной функции Вигнера f [38]

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hat{L}f}{i\hbar} + \hat{C}f \quad (3)$$

где \hat{L} – оператор, описывающий баллистическое движение носителей заряда, а \hat{C} – оператор соударений. В соответствии с видом (3) *одной из главных проблем при разработке моделей данного формализма является поиск операторов \hat{L} и \hat{C} , адекватно описывающих физические процессы, протекающие в наноэлектронной приборной структуре, включая диссипативные.*

Традиционно при моделировании РТД используется следующий более конкретный вид (соответствующий оператор \hat{L}) кинетического уравнения в одномерном случае [21]

$$\frac{\partial f(x, k, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar k}{m^*} \frac{\partial f(x, k, t)}{\partial x} - \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \left\{ 2 \int_0^{\infty} dy \sin[(k-k')y] \left[V(x+\frac{y}{2}) - V(x-\frac{y}{2}) \right] \right\} f(x, k', t) + \left(\frac{\partial f(x, k, t)}{\partial t} \right)_c, \quad (4)$$

где k – волновое число, $V(x)$ – потенциальная энергия, $(\partial f / \partial t)_c$ – столкновительный член. Видно, что данное уравнение подобно КУБ (1) в [12]. Для более полного учета влияния электрического поля необходимо решать (4) совместно с уравнением Пуассона. Хотя кинетическое уравнение вида (4) может быть выведено достаточно строго, получаемые выражения для столкновительного члена не используются. Это связано с чрезвычайной сложностью и громоздкостью данных соотношений. Поэтому традиционным стало фактически полуклассическое включение столкновительного члена в модель [21]. В результате выражение для интеграла столкновений принимает вид (3) в [12]. Хотя в литературе иногда и приводятся несколько возможных аппроксимаций для него [38], при расчетах, как правило, применяется приближение времени релаксации [21].

Остановимся на основных проблемах численного моделирования РТД. Их первопричиной является, конечно же, очень высокая степень сложности физических процессов в приборной структуре, приводящая к необходимости рассмотрения многочастичной задачи, а также учета влияния сильных полей, различного рода неоднородностей, диссипативных процессов.

Одним из наиболее важных и сложных вопросов является постановка *граничных условий*. Это связано с необходимостью учета двух групп диссипативных процессов при моделировании элемента наноэлектроники, а именно: *внутренних*, вызванных взаимодействием электронов с другими видами частиц и между собой (в меньшей степени) собственно в самом элементе; *внешних*, определяемых обменом, взаимодействием носителей заряда с внешней схемой, а в более широком смысле – с окружением (резервуаром). Особая сложность рассмотрения диссипативных процессов для наноэлектронных приборных структур заключается в том, что эти две группы процессов могут быть здесь гораздо более взаимосвязанными по сравнению с элементами микроэлектроники. В результате для корректной постановки граничных условий требуется знание состояния системы на границе, определяемое не только окружением, но и процессами внутри самого прибора. Т.е., строго говоря, необходимо знать "точное" решение полной самосогласованной задачи для всей замкнутой системы "прибор-окружение". Очевидно, что в общем случае этого добиться невозможно. При моделировании собственно элемента возможно несколько подходов [33, 35, 39]: 1) расширить области решения достаточно далеко от источника квантовых эффектов, так чтобы дополнительные области характеризовались классическим поведением, т.е. равновесной функцией распределения; 2) использовать другие уравнения, модели с целью определения функции Вигнера на границе.

Так, если не учитывать характер наноэлектронного прибора, как открытой системы, при постановке граничных условий, то в процессе их моделирования могут возникать неустойчивости [33, 39]. Чтобы этого не происходило, необходимо вводить диссипативность через граничные условия. К сожалению, это достаточно сложная задача, которая, в принципе, должна решаться путем рассмотрения микроскопической модели взаимодействия контактов, т.е. резервуара, дополняющего нашу

открытую систему, в данном случае активную часть приборной структуры, до замкнутой системы (второй подход). Поэтому традиционно используется первый подход, в частности считается, что контакты – идеальные резервуары для носителей заряда, т.е. все частицы в контактах приходят в равновесное состояние, характерное для данных резервуаров. В результате функция распределения Вигнера на контактах, как правило, задается с помощью равновесных функций распределения Ферми – Дирака, Больцмана или смещенных распределений. Такая модель контактов полностью соответствует используемой в рамках полуклассического подхода [12] и у ряда специалистов вызывает опасение в случае моделирования РТД. Этими серьезными опасениями являются возможные нарушения соотношения неопределенностей и ухудшения согласования с экспериментом [33, 39]. Поэтому в работе [33] справедливо отмечается, что используемые граничные условия достаточно грубые, хотя и описывают основные качественные особенности взаимодействия "открытая система – резервуар" в данном случае. Рассмотренный упрощенный (первый) подход является во многом вынужденным, так как получение строгой модели взаимодействия резервуара с открытой системой на основе матрицы плотности (функции Вигнера) практически невозможно [13]. В связи с этим целесообразна разработка лишь более простых моделей в рамках второго подхода. Таким образом, *при постановке граничных условий ситуация весьма далека от завершенной. Перспективным, по-видимому, и здесь будет являться разработка комбинированных моделей, сочетающих элементы первого и второго подходов.*

Две других проблемы связаны с видом оператора \hat{L} в кинетическом уравнении (4). Первая *серьезная проблема заключается в возможной потере, иногда очень существенной, информации о квантовом характере поведения системы.* О том, что решения уравнения для функции Вигнера "могут не соответствовать квантовомеханическим задачам, если на

начальные условия к нему не наложено дополнительное ограничение, выделяющее допустимый класс квантовых распределений", отмечалось в обзоре [40]. Так, оказывается, что уравнение (4) не описывает квантовые закономерности, характерные для гармонического осциллятора [35, 40]. В частности, после подстановки потенциала соответствующей квадратичной зависимости [41] в (4) получается классическое решение, так как (4) переходит в КУБ. В результате не описывается физически правильное поведение одного из самых простых объектов квантовой механики! Следствием этой проблемы является то, что для детального анализа энергетических состояний квантовых ям в РТД приходится дополнительно решать уравнение Шредингера [37]. Следовательно, *фактически необходимо строить комбинированную модель, основанную на двух формализмах.*

Вторая проблема связана с учетом зависимости эффективной массы от координаты в \hat{L} . Оказывается, что в работах, в которых используется уравнение (4), эффективная масса берется постоянной по всему прибору. Ясно, что это не соответствует действительности. В работах [42, 43] были выведены кинетические уравнения для функции Вигнера, позволяющие учитывать зависимость эффективной массы от координаты. К сожалению, модифицированные кинетические уравнения сильно усложняются по сравнению с (4). Были получены результаты с их применением в случае неучета рассеяния [42], а также без учета уравнения Пуассона [43]. Не было проведено и сравнение с экспериментальными данными. И тем не менее в работах [42, 43] показана важность учета зависимости эффективной массы от координаты (как и в формализме волновых функций [21]) при расчете ВАХ РТД путем сравнения с другими, более простыми моделями. В то же время использование упрощенного кинетического уравнения, подобного (4), может приводить к отрицательным значениям тока долины и контрастности ВАХ [43], т.е. физически бессмысленным результатам.

Проблематичным в настоящее время является и задание оператора \hat{S} в кинетических уравнениях, т.е. учет рассеяния. С одной стороны, важная мотивировка использования формализма функций Вигнера – удобство учета рассеяния, а с другой стороны, – применяются полуклассические подходы его учета. При этом параметры (времена релаксации, скорости рассеяния) для каждого из механизмов рассеяния задаются, как правило, постоянными для всего прибора, соответствующими объемным материалам. Так как обычно используется приближение времени релаксации, то суммарное время релаксации при учете нескольких механизмов рассеяния определяется согласно (10) в [12]. При таких подходах эти фактически макроскопические параметры носят явно подгоночный характер при моделировании РТД. В то же время не вызывает сомнения, что для адекватного анализа резонансно-туннельных структур учет рассеяния принципиально необходим вследствие чрезвычайной чувствительности поведения структур к его влиянию [21, 34, 35, 37]. Желательно было бы также брать во внимание и электрон-электронное взаимодействие. В этом случае в кинетическое уравнение необходимо введение двухчастичной функции Вигнера и использование дополнительных приближений и соотношений. В настоящее время, к сожалению, этого никто не сделал для рассматриваемой задачи. Следует также напомнить о том, что полуклассическое "раскрытие" $(\partial f / \partial t)_c$ фактически приводит к единственному источнику квантовомеханических коррекций в решениях, определяемым членом, содержащим потенциал в (4). Опасности этого уже отмечались. По изложенным причинам весьма актуальной является задача разработки более адекватных квантовомеханических подходов к учету рассеяния при моделировании РТД.

Достаточно серьезная проблема – создание численных методов решения рассматриваемой самосогласованной задачи. Главной объективной причиной этого является то, что даже в

стационарном одномерном случае (см. (4)) модель фактически двумерная (по пространству x и волновому числу k , т.е. в фазовом пространстве). Здесь уместно отметить, что для формализма волновых функций, несмотря на осуществляемый перебор по энергиям (на контактах), а точнее k , задача для каждого из значений энергии все же одномерная. В случае необходимости моделирования переходных процессов модель еще более усложняется. Заметим также, что с помощью некоторых численных моделей формализма функций Вигнера стационарный анализ проводится путем расчета установившегося переходного процесса, т.е. через динамику. В итоге, для моделирования РТД в рамках данного формализма требуется применение вычислительных систем высокой производительности: суперЭВМ и др. Поэтому *повышение эффективности используемых численных методов является весьма актуальной задачей.*

Приходится констатировать, что исследования данного рода очень малочисленны. Так, при конечно-разностной аппроксимации применяются, как правило, стандартные методы [44], в частности, используются разностные отношения против потока для члена, содержащего градиент в (4), а для уравнения Пуассона – центрально-разностные отношения второго порядка точности. Вначале при аппроксимации градиента в (4) применялись разностные отношения против потока первого порядка [35, 42]. Однако впоследствии было показано, что такие аппроксимации могут приводить не только к количественным, но и качественным ошибкам даже при нулевых смещениях РТД [45]. Очень значительные погрешности получаются и при расчете ВАХ и моделировании переходных процессов в РТД [45]. Поэтому целесообразно использовать разностные отношения против потока не первого, а второго порядка точности [37, 45, 46]. В работе [39] было показано, что построение дискретных моделей РТД требует особого внимания, так как могут возникать немалые ошибки усечения в

выполнении ряда физически важных соотношений, включая некоторые законы сохранения. Так, возможен осязаемый "ненулевой ток" при нулевых прикладываемых смещениях. Поэтому необходим обязательный контроль шагов сетки дискретизации в фазовом пространстве. Теоретический анализ различных моделей РТД [39], включая модель формализма матриц плотности [31], по ошибкам усечения при выполнении указанных соотношений позволил установить [39], что в зависимости от задачи исследования та или иная дискретная модель может иметь определенные преимущества и недостатки. Это целесообразно учитывать при их использовании.

К сожалению, физические подходы [10] к построению дискретных моделей данного формализма пока не разрабатываются. Можно лишь предположить, что после разработки физических конечно-разностных аппроксимаций рассматриваемой самосогласованной задачи нас могут ожидать подобные отмеченным выше разочарования по поводу полученных ранее результатов. Определенные основания к этому есть – относительно небольшое количество узлов сеток дискретизации, как правило, используемое в упомянутых моделях как по x (до 90), так и по k (до 90), причем традиционно равномерных. Заметим, что такое ограничение по количеству узлов в некоторых моделях может быть следствием возможностей даже достаточно мощных вычислительных систем (см., например [45]). Нормальную точность расчета при таком малом количестве узлов равномерной сетки пространственной дискретизации можно получить, судя по всему, рассматривая только активную область прибора и пренебрегая протяженными пассивными областями [47]. Влияние же последних может быть важным, особенно при согласовании с экспериментом.

При моделировании переходных процессов используются как явные, так и неявные методы интегрирования по времени для

кинетического уравнения [35 – 37, 45, 47], причем *предпочтение отдается неявным разностным схемам.*

Крайне слабо разработаны и исследованы методы итерационного решения нелинейных уравнений дискретной модели, а жаль. Отмечу, пожалуй, единственную серьезную работу [46] в данном направлении. В ней сравнивались по эффективности, точности и надежности четыре итерационных метода, а именно: последовательной и одновременной концепций для анализа стационарных и переходных процессов. В качестве теста осуществлялся расчет ВАХ РТД. Особую сложность при этом представляет моделирование "плато" в области ОДП. Было показано, что каждый из методов при решении данной задачи имеет свои достоинства и недостатки. Поэтому в программах численного моделирования РТД желательно иметь реализацию нескольких итерационных методов, в частности, как для анализа стационарных, так и переходных процессов. Обычная же практика – использование методов для анализа либо стационарных, либо переходных процессов. В [46] показывается, что это опасная практика, так как в некоторых случаях физически корректные результаты могут быть получены только лишь с помощью определенного итерационного метода из четырех исследованных.

Очень важным, как отмечалось в [46], является и выбор критерия сходимости внешних итераций. Так, оказывается, что сходимость для уравнения Пуассона даже с относительно высокой точностью (по невязке) не является достаточной в некоторых случаях. Более удовлетворительно дополнительное использование критерия по изменению приращения электростатического потенциала до относительно малых величин (меньше 10^{-6} В). Однако и применение данных двух критериев бывает недостаточным, например, при анализе стационарных режимов через динамику. В этих случаях необходимо уменьшать изменение плотности тока по длине

прибора до относительно малой величины [46]. Таким образом, данный критерий во многом подобен описанному и рекомендованному ранее [10]. Отметим, что при поиске решения в областях неустойчивостей и устойчивых высокочастотных осцилляций численные значения верхних границ оцениваемых погрешностей должны быть иногда на четыре порядка меньше [46] по сравнению с другими областями ВАХ РТД, т.е. задача сильно усложняется в математическом плане. При этом для расчетов иногда необходимо использовать суперЭВМ. В целом, результаты [46] убедительно доказывают *высокую актуальность разработки и глубокого исследования численных методов реализации дискретных моделей нанозлектронных приборных структур, несмотря на возможные серьезные проблемы на этом пути.*

Следствием описанных проблем является то, что *с применением дискретных моделей формализма функций Вигнера практически нет убедительных примеров согласования результатов расчета ВАХ РТД с экспериментальными данными** [21], т.е. эти модели еще достаточно грубы. По этой причине, по-видимому, не надо бояться введения дополнительных зависимостей согласующих параметров моделей, в частности эффективных масс, времен релаксации, скоростей рассеяния и других, от режима работы приборной структуры нанозлектроники и иных факторов. Напомним, что это уже давно традиционный методический подход для электрических моделей МОП- и биполярных транзисторов кремниевых ИС, например для коэффициентов передачи [48]. Почему подобные методики не могут использоваться и здесь? Автор не видит к этому никаких серьезных оснований. Главный же аргумент в пользу данного подхода – чрезвычайно высокая степень сложности задачи. Поэтому мы фактически еще *находимся в начале очень сложного пути построения адекватных дискретных моделей*

* Сравнение обычно проводится для фактически активной области (длины до 60 нм) РТД работы [47].

нанoeлектронных приборных структур и методик идентификации их параметров.

Рассмотрение данного формализма завершим следующей цитатой из работы [40]: "сама по себе функция Вигнера лишена физического смысла, и наглядность вигнеровского представления в значительной степени является кажущейся".

5.4. Модели формализма функций Грина

Общепризнанным в квантовой механике является то, что для описания систем одинаковых частиц наиболее удобен метод вторичного квантования [41]. Его особая ценность заключается в применимости для систем с несохраняющимся числом частиц. В данном методе в качестве независимых переменных вместо полного набора механических величин того или иного индивидуального состояния частиц берутся числа заполнения частиц в этих состояниях. В результате гамильтониан системы выражается через операторы рождения и уничтожения. Решение же задачи при этом обычно упрощается.

Функции Грина в рассмотрение вводятся как средние величины (с точностью до коэффициента, в который входит мнимая единица) от различных произведений гейзенберговских операторов рождения и уничтожения частиц в методе вторичного квантования. В результате, например, одночастичные функции Грина зависят уже от двух пространственно-временных точек, т.е. количество временных координат, вообще говоря, удваивается по сравнению с одночастичными матрицей плотности и функцией Вигнера! Так как функции Грина связаны достаточно простыми соотношениями с матрицами плотности, функциями Вигнера, то получаемые уравнения движения, к сожалению, обладают тем же серьезным недостатком [13]. В частности, в уравнения движения для одночастичных функций Грина входят

двухчастичные функции Грина и т.д. (иерархия уравнений). В связи с этим для получения из цепочек уравнений упрощенных кинетических уравнений для одночастичных функций Грина введение аппроксимаций для двухчастичных функций является, по существу, также обязательным [49, 50].

Кроме отмеченного недостатка, заключающегося в появлении дополнительных временных координат, для формализма функций Грина характерно, к сожалению, и увеличение количества уравнений движения. Так, для одночастичных функций Грина получаются четыре уравнения Каданова – Бейма [50], точные в термодинамическом пределе. В данные уравнения входят также собственно-энергетические функции, которые могут быть выражены через те же функции Грина и для которых необходимо получить дополнительные соотношения. В этом случае набор уравнений Каданова – Бейма можно считать замкнутым. Определенное ослабление отмеченного недостатка было достигнуто в рамках диаграммной техники Л.В. Келдыша [51]. Так, путем введения трех функций Грина: опережающей, запаздывающей и корреляционной удастся систему четырех очень сложных интегро-дифференциальных уравнений свести к двум независимым уравнениям. Поэтому в литературе данный, наиболее эффективный подход получил название формализма Келдыша – Каданова – Бейма и часто используется в задачах физики твердого тела.

Здесь следует обратить внимание на одно замечание работы [51], касающееся диаграммной техники вообще. Смысл его в том, что получаемые с ее помощью результаты корректны для времен, больших по сравнению с временем релаксации. Возможна же и такая постановка вопроса, когда в момент времени t_0 задана произвольная матрица плотности $\rho(t_0)$ и необходимо проанализировать релаксацию этого состояния к установившемуся. Такая задача, судя по всему, не может быть описана любыми диаграммными техниками, так как в их основе

лежит аппроксимация двух-, трех- и т.д. частичных функций Грина с помощью одночастичных, по крайней мере в виде бесконечного ряда. Следовательно, *при моделировании переходных процессов с помощью одночастичных функций Грина очень осторожно необходимо относиться к результатам, полученным при малых временах, меньших времени релаксации системы. Аналогичное заключение, по-видимому, справедливо и для других рассмотренных ранее формализмов, так как они обычно основываются на одночастичных приближениях.*

Несмотря на отмеченное повышение эффективности формализма функций Грина с помощью диаграммной техники Л.В. Келдыша, использование получасмых уравнений для моделирования наноэлектронных приборов, к сожалению, очень сложно даже в стационарном случае. Интересный приближенный метод, приводящий к неплохим результатам, был развит в работе Датты (S. Datta) с соавторами [52 – 54]. В его основе лежит известный подход Ландауэра – Буттикера (R. Landauer, M. Büttiker). Так, для тока (в точке контакта \vec{r}) на единицу энергии и объема обосновано уравнение

$$I(\vec{r}, E) = \frac{e}{2\pi\hbar} \int d\vec{r}' T(\vec{r}, \vec{r}'; E) [f(\vec{r}, E) - f_{\tau}(\vec{r}', E)], \quad (5)$$

где e – величина заряда электрона, $T(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ – коэффициент прохождения; $f(\vec{r}, E)$ – функция заполнения; $f_{\tau}(\vec{r}', E)$ – эффективная функция заполнения, учитывающая процессы неупругого рассеяния. Для вычисления коэффициента прохождения, функции заполнения и скоростей рассеяния (входят в $f_{\tau}(\vec{r}', E)$) в рамках формализма Келдыша – Каданова – Бейма получена система замкнутых уравнений [55], в которую входит и упрощенное кинетическое уравнение для фурье-образа одночастичной функции Грина. Основными физическими допущениями в данной стационарной одномерной модели РТД являются: справедливы одночастичное приближение и метод

эффективной массы; моделируется электронный транспорт в одной зоне проводимости; предполагается специальный вид потенциалов для нескольких учитываемых механизмов неупругого рассеяния. При численном решении кинетического уравнения для фурье-образа запаздывающей функции Грина используются элементы метода сильной связи (при аппроксимации закона дисперсии на соответствующей сетке), что приводит к уравнениям, характеризуемым разреженной матрицей. Это значительно упрощает численное решение кинетического уравнения.

Хотя метод и позволяет вычислять концентрацию подвижных электронов и плотность тока внутри структуры, для него свойственно нарушение консервативности плотности тока на границе "прибор-контакт" [53]. Кроме того, эффективная масса берется постоянной по всей структуре, а интенсивность неупругого рассеяния подбирается с помощью "некоторой функции" [53]. Модель, к сожалению, требует для реализации очень больших вычислительных ресурсов ЭВМ.

Последний недостаток рассмотренного приближенного метода сильно усугубляется тем, что в РТД традиционно существуют достаточно протяженные пассивные области. Желательно также учесть большее количество механизмов рассеяния. Для ослабления первого недостатка используется достаточно *общий подход*, часто применяемый в рамках формализма волновых функций, *а именно: протяженные пассивные области РТД рассматриваются как продолжение контактов и для них строится более простая модель*. Таким образом, *необходимо разрабатывать комбинированную модель, требующую меньших вычислительных ресурсов ЭВМ*.

Данный эффективный подход в рамках формализма функций Грина был реализован в работах [56, 57]. В частности, прибор был разбит на два "больших резервуара" (эмиттерный и коллекторный) и "короткий прибор". Для "больших

резервуаров" использованы простые соотношения, справедливые при ряде предположений. Фактически эти области трактуются как продолжение контактов. Введение допущений в "коротком приборе" позволило получить кинетические уравнения для одночастичных функций Грина в приближении эффективной массы с учетом влияния этих протяженных контактов. В результате "несамосогласованных аппроксимаций" выведены и упрощенные соотношения для необходимых собственно-энергетических функций для различных механизмов рассеяния только в "коротком приборе", а именно: на полярных оптических фонах, на акустических фонах, на неоднородностях соединений, на шероховатостях границ раздела и на ионизированных примесях. Поэтому отметим достоинство модели, заключающееся в учете широкого спектра механизмов рассеяния в рамках единого формализма. При задании закона дисперсии в дискретной модели возможно применение одно-, двух- и десятизонной моделей с использованием элементов метода сильной связи [57]. В более сложных моделях по отношению к однозонной учитывается непараболичность зон. Для вычисления тока получена обобщенная интегральная формула для туннельного тока непосредственно через функции Грина в случае неучета рассеяния. Она подобна формуле Тсу – Есаки [2].

В рамках формализма функций Грина с применением десятизонной модели был учтен дополнительный эффект в РТД на основе GaAs/AlAs, связанный с нарушением трансляционной симметрии на гетерогранице [58]. Хотя в этой работе проведено и несколько других модификаций по сравнению с моделью [57], включая самосогласование, авторами [58] не учитывались механизмы рассеяния и влияние "температурных эффектов", поэтому не проводилось сравнение результатов расчета ВАХ с экспериментальными данными. Другая модификация модели [57] – использование уравнения для плотности тока диффузионно-дрейфовой модели в "больших резервуарах"

эмиттера и коллектора не привела к подтверждению принципиальной необходимости решения такой более строгой задачи в этих протяженных областях по сравнению с ранее применяемым квазиравновесным предположением в них [59]. Заметим, что это очень важный результат, так как данное предположение обычно используется и в комбинированных моделях РТД, основанных на формализме волновых функций. По-видимому, оно допустимо для данных приборов в макроскопических областях эмиттера и коллектора.

Анализ показывает, что к основным недостаткам моделей формализма функций Грина следует отнести: 1) несогласованность аппроксимаций, применяемых на различных этапах построения модели; 2) громоздкость; 3) требуемые большие вычислительные ресурсы ЭВМ. Первый недостаток наиболее серьезен и характерен не только для моделей нанoeлектронных приборных структур, основанных на формализме функций Грина, но и вообще для рассматриваемого формализма в целом в различных задачах. Он связан с крайней громоздкостью подхода и большим количеством исходных уравнений. Поэтому для существенных, вынужденных упрощений и приходится применять самые разнообразные аппроксимации на различных этапах построения моделей, к сожалению, часто не согласованных между собой, а иногда просто противоречащих друг другу. Результатом являются такие очень серьезные недостатки моделей нанoeлектронных элементов как отсутствие баланса в равновесных условиях (при нулевых смещениях!) [57], возможное нарушение консервативности плотности тока [53, 57]. В общей теории формализма функций Грина рекомендуется такие сложные ситуации обходить с помощью дополнительного использования законов сохранения [50], что, строго говоря, справедливо для замкнутых систем и добавляет в модель новые уравнения и, естественно, еще больше ее усложняет. В отмеченных моделях вместо этого, к сожалению, применяются лишь простые

качественные физические соображения, что весьма опасно именно для нанoeлектронных приборных структур, как открытых систем.

Несмотря на повышение эффективности модели [57] по сравнению с рассмотренной ранее [53, 55], количество уравнений дискретной модели все же просто огромное. Так, в случае учета только упругого рассеяния в однозонной модели типичные числа таковы [57]: $N_L = 50$ (количество слоев), $N_k = 200$ (количество узлов сетки по импульсу), что приводит к полной матрице, характеризующей систему линейных алгебраических уравнений, с 10^8 элементами! Для решения таких огромных систем используется "медленный" итерационный метод, в частности метод Якоби в сочетании с последовательной верхней релаксацией [57]. При учете неупругого рассеяния задача, конечно же, еще более усложняется, по крайней мере в три раза увеличивается количество уравнений [57]. Все это и приводит к значительным затратам вычислительных ресурсов ЭВМ, как по памяти, так и по времени. В итоге, модель сложна в использовании, требует большого количества согласующих параметров, т.е. ее применение, вообще говоря, – искусство. В связи с изложенным *модели данного формализма пока, к сожалению, явно не предназначены для широкого использования.*

Анализ моделей РТД рассматриваемого формализма целесообразно завершить цитатой из книги [49]: *"... метод функций Грина ... в расчетном отношении ... отнюдь не обязательно является самым простым. Иногда он позволяет решить задачу только с помощью довольно "лихих" аппроксимаций"*. Комментарии, как говорится, – излишни.

Таким образом, *возлагаемые, очень большие надежды на кинетические модели РТД, основанные на формализмах функций Вигнера и Грина, пока, к сожалению, не оправдались.* Для них в той или иной мере характерны следующие серьезные

недостатки: 1) громоздкость; 2) большие затраты вычислительных ресурсов ЭВМ (даже для одномерных стационарных моделей); 3) часто неудовлетворительное согласование с экспериментом.

Главным направлением развития кинетических моделей с применением формализмов функций Грина и Вигнера, судя по всему, будет разработка комбинированных моделей, т.е. реализация отмеченного ранее эффективного подхода. Определенные положительные результаты уже получены и для формализма функций Вигнера для модели, в которой решается кинетическое уравнение для функций Вигнера в квантовой (активной) области прибора и используется метод Монте-Карло в макроскопических областях [60, 61]. Хотя в разработанных комбинированных моделях обоих формализмов и имеется ряд недостатков, в частности согласующими параметрами являются ширины барьеров и ям, уровни легирования (!) [62], высота барьера [61], что в общем-то не хорошо. С одной стороны, все же существуют определенные сложности в экспериментальном определении этих исходных данных. С другой стороны, экспериментальные исследования позволили также установить очень высокую чувствительность ВАХ РТД к изменению ширин барьеров, квантовых ям, мольной фракции и уровней легирования (см., например [63]). Кроме того, в комбинированной модели [60,61] могут возникать проблемы и со сходимостью для реальных величин концентраций примесей. И несмотря на недостатки отмеченных комбинированных моделей, подход бесспорно перспективен, ввиду существенной экономии вычислительных ресурсов ЭВМ без существенной потери точности моделирования.

Для реализации моделей РТД различных формализмов иногда применяются методы Монте-Карло [64 – 66]. Это так называемые "квантовые методы Монте-Карло" в отличие от рассмотренных в [12] "классических (полуклассических)

методов Монте-Карло". Так же как и ранее, возможно два варианта, а именно: 1) метод Монте-Карло используется в качестве численного метода решения интегро-дифференциальных уравнений; 2) метод Монте-Карло применяется как метод имитации движения частиц. Здесь есть одна проблема методологического характера, состоящая в неприменимости понятия "траектория" в квантовой механике. Ее можно, однако, обойти, например, с помощью использования "траекторий Бома", вычисляемых на основе волновых функций [64, 65]. Метод Монте-Карло в результате становится более формальным по сравнению с полуклассическим случаем. К сожалению, квантовые методы Монте-Карло требуют при реализации просто огромных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ, что приводит к необходимости введения существенных приближений и применения суперЭВМ. При этом обычно используется теория возмущений и диаграммная техника. Серьезные проблемы возникают и со сходимостью методов [66]. Бóльшая экономичность алгоритмов характерна при учете рассеяния в квантовой яме в рамках формализма волновых функций [29], а также в рамках комбинированной модели [60, 61] в данных случаях, однако, при использовании классических методов Монте-Карло. Как и ранее, все же *имеется значительный резерв повышения эффективности моделей, основанных на квантовых методах Монте-Карло, в частности путем построения комбинированных моделей.* Определенные положительные результаты в этом направлении уже достигнуты [64, 65].

Итак, *главным направлением практического усовершенствования моделей всех (!) формализмов, судя по всему, будет создание комбинированных моделей. Именно такие модели, как правило, и позволяют получить удовлетворительное согласование с экспериментом.* Бесспорно важными для РТД будут являться следующие основные направления повышения адекватности моделей: 1) *отказ от одночастичного и переход к*

многочастичным приближениям (сначала к двух- и трехчастичным); 2) отказ от метода эффективной массы; 3) переход к анализу многомерных и переходных физических процессов; 4) более полный учет влияния контактов, приконтактных и других пассивных областей, границ раздела; 5) более детальное описание процессов рассеяния; 6) более детальный учет реальных электрофизических свойств низкоразмерной системы, входящей в приборную структуру; 7) более детальный учет взаимодействия прибора с окружением. Важным является и повышение экономичности моделей.

К сожалению, даже отдельные из отмеченных направлений повышения адекватности приводят к неизбежному усложнению моделей (не говоря о всех направлениях, учитываемых совместно), а следовательно, к дальнейшему понижению их эффективности. В этой связи уместно привести некоторые данные из работы [21] по сравнению моделей рассмотренных формализмов (см. таблицу). Хотя приведенные сведения и носят скорее качественный характер, они, тем не менее, полезны, так как в целом характеризуют достигнутые успехи в разработке моделей различных формализмов повышенной адекватности. Выбирать читателю. Итак, более реальным является другой подход, особенно при отсутствии высокопроизводительной вычислительной техники, – переход к еще более простым по сравнению с отмеченными основным уравнениям, т.е. дальнейшая эксплуатация свойства грубости модели.

Таблица

Сравнение моделей различных формализмов

Искомая функция	Волновая	Матрица плотности	Вигнера	Грина
Учет рассеяния	да	да	да	да
Трактовка рассеяния	различные аппроксимации	аппроксимация времени релаксации	аппроксимация времени релаксации	собственно-энергетические функции
Переходной анализ	да	да	да	нет
Вычислительные ресурсы ЭВМ	незначительные	средние	средние	значительные

5.5. Модели на основе других уравнений

Привлекательный путь заключается в поиске относительно простых уравнений и в разработке на их основе моделей повышенной эффективности, обладающих в то же время требуемой степенью адекватности моделирования. *Наиболее естественное здесь направление – использование более простых кинетических уравнений по сравнению с рассмотренными. Интерес для моделирования приборов нанoeлектроники могут представить следующие уравнения: основное (управляющее*) кинетическое уравнение Паули; обобщенное основное кинетическое уравнение Ван Хова; обобщенное основное*

* Речь идет о "master equation". В русскоязычной специальной литературе используются два названия, а именно: "основное уравнение" или "управляющее уравнение".

кинетическое уравнение Пригожина – Ресибуа; обобщенное кинетическое уравнение Больцмана и др.

Из отмеченных кинетических уравнений для анализа РТД применялось основное уравнение Паули [67]. В модели [67] осуществляется самосогласованное решение этого уравнения, уравнений Шредингера и Пуассона. Отмечается, что использование основного уравнения Паули допустимо в случае, когда можно пренебречь влиянием недиагональных членов в матрице плотности. Это обычно справедливо для слабых взаимодействий и не очень быстрых адиабатических процессов. Для решения основного уравнения Паули применялся метод Монте-Карло. Модель использовалась для одномерного анализа стационарных процессов в РТД. "Метод Монте-Карло, применяемый здесь, ... вносит элемент неустойчивости и осцилляционного поведения" [67] в решение. Это характерно для данного метода и в других моделях, что, вообще говоря, затрудняет обработку полученных результатов. Несмотря на это, метод Монте-Карло при решении основного уравнения Паули требует все же более или менее реальных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ [67].

Другое важное направление связано с уравнениями квантовой гидродинамики. Данные уравнения можно выводить из уравнения Шредингера, Лиувилля – фон Неймана и кинетических в различных формализмах отличающимися способами. В результате можно получать разные системы уравнений, причем со своими дополнительными соотношениями, а следовательно, и параметрами. С помощью моделей, основанных на таких уравнениях, допустимо, в принципе, учитывать многомерные эффекты. К сожалению, полная система квантовых гидродинамических уравнений для моделирования РТД использовалась нечасто. Иногда применяются уравнения только для нулевого и первого моментов [32, 68].

И.А. Обухов с соавторами [69] поставили еще более интересную задачу, а именно: *получить квантовый аналог фундаментальной системы уравнений [12], т.е. обобщить эту систему.* Для этих целей можно просто использовать некоторые из уравнений квантовой гидродинамики с дополнительными соотношениями. Однако был выбран отличающийся от традиционно применяемого подход [69]. Замечу, что и в этом случае уравнение (2) из [70] для каждого сорта частиц ("самостоятельная фаза для некоторого квантового газа" [70]) имеет традиционный вид уравнения для нулевого момента (см.* (11) из [12]). Подход, однако, позволил получить явные выражения для столкновительных членов через химический потенциал каждого сорта частиц. Именно это является чрезвычайно важным. Поэтому уравнение непрерывности для плотности электронов каждого сорта ("фазы") частиц является, по существу, уравнением, определяющим химический потенциал соответствующего сорта частиц. Здесь необходимо отметить, что в ряде даже высокоадекватных моделей формализмов волновых функций и функций Грина для химического потенциала обычно используются различные аппроксимации. Хотя и показана их допустимость для РТД [59], однако это все же аппроксимации. На данном этапе недостатком модели [69, 70] являются необходимость решать уравнение Шредингера (в связи с этим модель, строго говоря, комбинированная) с детерминированным потенциалом для каждой "фазы" для всего прибора, включая и протяженные макроскопические области, а также задание "некоторого известного потенциала, отвечающего за тот или иной вид случайного взаимодействия" [70]. Бесспорным достоинством модели является хорошее согласование расчетов ВАХ РТД с экспериментальными данными [69, 70]. Подчеркну, что удовлетворительное согласование с экспериментом в настоящее

* Вид уравнений для нулевого момента в квантовом и полуклассическом случаях одинаков.

время достигается только с помощью нескольких комбинированных моделей формализма волновых функций [21, 25, 28], функций Грина и Вигнера [57, 61, 62]. Кроме того, на основе модели [69, 70] построена комбинированная модель, учитывающая двумерные эффекты в РТД, в частности было оценено влияние подложки [69, 70].

Рассмотренная модель [69, 70] интересна и в методологическом плане, так как подтверждает положение (недостающее звено), что и для *нанoeлектронных приборных структур* (на примере РТД) *можно на практике построить подобную иерархию* (по крайней мере основных) *классов моделей, как и для элементов микроэлектроники* [12], а именно: *квантовые кинетические* модели; квантовые методы Монте-Карло; квантовые гидродинамические модели; квантовые квазигидродинамические модели; квантовые диффузионно-дрейфовые модели; комбинированные модели*. Причины этого уже разъяснялись. Заметим, что отличие в названиях классов моделей по сравнению с ранее рассмотренными [12] обычно в добавлении одного слова – "квантовые". *Важным в этих классах моделей является то, что при определенных предположениях (в макроскопических областях) они переходят в соответствующие классы моделей полуклассического подхода* (Нет лишь прямого аналога у моделей формализма волновых функций, хотя и для него существует квазиклассическое приближение.). *Таким образом, в рамках единого формализма можно описывать как квантовые, так и классические области. В итоге, более рационально возможно также строить комбинированные модели, в частности задавать границы областей применимости различных моделей, т.е. для решения главной проблемы данного класса моделей.*

* Несколько неудачно это название для моделей формализма волновых функций. Здесь, однако, следует вспомнить, что уравнение Шредингера описывает и явления переноса. Традиционно также используется и одночастичное приближение, характерное для кинетических моделей.

В заключение необходимо отметить, что для других уравнений, используемых при моделировании РТД, крайне желательно получить оценки допустимых диапазонов их применимости, как это было сделано для моделей полуклассического подхода [12]. Такая оценка в настоящее время сделана только лишь для основного уравнения Паули [67].

Итак, какой из формализмов использовать? Ответить на этот вопрос не просто, так как каждый из рассмотренных формализмов имеет свои достоинства и недостатки. Решать самому читателю. Здесь еще раз обратим внимание на одно достоинство формализма волновых функций – относительно высокая экономичность моделей. По крайней мере, более или менее строгий двух- и трехмерный квантовомеханический анализ переходных процессов в приборных структурах осуществляется только с помощью уравнения Шредингера.

Читателю также следует помнить, что при использовании других формализмов с нелинейными функциями (от волновых функций) возможны потери при описании некоторых важнейших свойств квантовых объектов. В этих случаях применение комбинации формализмов с обязательным привлечением волновых функций фактически является вынужденным!

Список литературы к главе 5

1. Иогансен Л. В. О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через системы барьеров // ЖЭТФ. 1963. Т. 45, вып. 2. С. 207 – 213.
2. Tsu R., Esaki L. Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Lett. 1973. V. 22, N 11. P. 562 – 564.
3. Chang L.L., Esaki L., Tsu R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers // Appl. Phys. Lett. 1974. V. 24, N 12. P. 593 – 595.

4. Resonant tunneling device with multiple negative differential resistance: Digital and signal processing applications with reduced circuit complexity / S. Sen, F. Capasso, A.Y. Cho, D. Sivco // IEEE Trans. 1987. V. ED-34, N 10. P. 2185 – 2191.
5. Quantum functional devices: Resonant-tunneling transistor, circuits with reduced complexity, and multiple-valued logic / F. Capasso, S. Sen, F. Beltram, L.M. Lunardi, A.S. Vengurlekar, P.R. Smith, N.J. Shah, R.J. Malik, A.Y. Cho // IEEE Trans. 1989. V. ED-36, N 10. P. 2065 – 2082.
6. Digital circuit application of resonant tunneling devices / P. Mazumder, S. Kulkarni, M. Bhattacharya, J.P. Sun, G.I. Haddad // Proc. IEEE. 1998. V. 86, N 4. P. 664 – 686.
7. Resonant-tunneling mixed-signal technology / A. Seabaugh, B. Brar, T. Broekaert, F. Morris, P. van der Wagt, G. Frazier // Solid-State Electron. 1999. V. 43. P. 1355 – 1365.
8. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Ed. by R. Compañó. EC IST programme Future and Emerging Technologies, Second Edition, 2000. 104 p.
9. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. 1998. Т. 32, вып. 1. С. 3 – 18.
10. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанозлектроники. III. Численное моделирование в рамках полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 1. С. 36 – 47.
11. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанозлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34 – 37.
12. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанозлектроники.

- II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26 – 36.
13. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанозлектроники.
- IV. Квантовомеханические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24 – 32.
14. Тагер А. С. Размерные квантовые эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их применения в электронике СВЧ. Ч.1. Физические основы // Электронная техника. Сер. Электроника СВЧ. 1987. Вып. 9. С. 21 – 34.
15. Пожела Ю. Физика быстродействующих транзисторов. Вильнюс: Мокслас, 1989. 264 с.
16. Долманов И.Н., Толстихин В.И., Еленский В.Г. Полупроводниковые приборы с резонансным туннелированием электронов // Зарубежная радиоэлектроника. 1990. № 7. С. 66 – 89.
17. Бузанева Е.В., Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь, 1990. 304 с.
18. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы нанозлектроники: Учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. 332 с.
19. Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.
20. Кирсеев П.С. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1975. 584 с.
21. Resonant tunneling diodes: Models and properties / J.P. Sun, G.I. Haddad, P. Mazumder, J.N. Schulman // Proc. IEEE. 1998. V. 86, N 4. P. 641 – 661.
22. Gawlinski E., Dzurak T., Tahir-Kheli R.A. Direct and exchange-correlation carrier interaction effects in a resonant tunnel diode // J. Appl. Phys. 1992. V. 72, N 8. P. 3562 – 3569.

23. Абрамов И.И., Гончаренко И.А. Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Электромагнитные волны и электронные системы. 2002. Т.7, № 3. С. 54 – 60.
24. Pinaud O. Transient simulations of a resonant tunneling diode // J. Appl. Phys. 2002. V. 92, N 4. P. 1987 – 1994.
25. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Коломейцева Н.В. Комбинированная модель резонансно-туннельного диода // ФТП. 2005. Т. 39, вып. 9. С. 1138 – 1145.
26. Sun J. P., Haddad G. I. Self-consistent scattering calculation of resonant tunneling diode characteristics // VLSI Design. 1997. V. 3. P. 1 – 4.
27. Peak width analysis of current-voltage characteristics of triple-barrier resonant tunneling diodes / M. Nagase, M. Suhara, Y. Miyamoto, K. Furuya // Jpn. J. Appl. Phys. 2000. V. 39, part 1, N 6A. P. 3314 – 3318.
28. Abramov I.I., Goncharenko I.A., Kolomejtseva N.V. The influence of classical and quantum-mechanical regions interaction on IV- characteristics of RTD, based on different materials // Proc. SPIE. 2004. V. 5401. P. 482 – 487.
29. Influence of impurity and phonon scattering effects in resonant tunneling structures / Y. Fu, Q. Chen, W. Willander, H. Brugger, U. Meiners // J. Appl. Phys. 1993. V. 74, N 3. P. 1874 – 1878.
30. Boykin T.B., Carnahan R.E., Martin K.P. Inadequacy of the one-dimensional approximation for resonant-tunneling-diode current-voltage calculations // Phys. Rev. B. 1995. V. 51, N 4. P. 2273 – 2281.
31. Frensley W. R. Simulation of resonant-tunneling heterostructure devices // J. Vac. Sci. Technol. B. 1985. V. 3, N 4. P. 1261 – 1266.
32. Quantum Transport in Ultrasmall Devices / Ed. by D.K. Ferry, H.L. Grubin, C. Jacoboni, A.-P. Jauho. New York, London: Plenum Press, 1995. NATO ASI Ser. B, v. 342. 544 p.

33. Frensley W. R. Transient response of a tunneling device obtained from the Wigner function // *Phys. Rev. Letters*. 1986. V. 57, N 22. P. 2853 – 2856.
34. Quantum tunneling properties from a Wigner function study / N.C. Klusdahl, A.M. Kriman, C. Ringhofer, D.K. Ferry // *Solid-State Electron*. 1988. V. 31, N 3/4. P. 743 – 746.
35. Self-consistent study of the resonant-tunneling diode / N.C. Klusdahl, A.M. Kriman, D.K. Ferry, C. Ringhofer // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39, N 11. P.7720 – 7735.
36. Jensen K.L., Buot F.A. Numerical simulation of intrinsic bistability and high-frequency current oscillations in resonant tunneling structures // *Phys. Rev. Letters*. 1991. V. 66, N 8. P. 1078 – 1081.
37. Creation and quenching of interference-induced emitter-quantum wells within double-barrier tunneling structures / P. Zhao, D.L. Woolard, B.L. Gelmont, H.-L. Cui // *J. Appl. Phys*. 2003. V. 94, N 3. P. 1833 – 1849.
38. Frensley W.R. Quantum transport modeling of resonant-tunneling devices // *Solid-State Electron*. 1988. V. 31, N 3/4. P. 739 – 742.
39. Frensley W.R. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium // *Rev. of Modern Physics*. 1990. V. 62. P. 745 – 791.
40. Татарский В.И. Вигнеровское представление квантовой механики // *УФН*. 1983. Т. 139, вып.4. С. 587 – 619.
41. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория: Учебное пособие. М.: Наука, 1974. 752 с.
42. Tsuchiya H., Ogawa M., Miyoshi T. Simulation of quantum transport in quantum devices with spatially varying effective mass // *IEEE Trans*. 1991. V.ED-38, N6, P.1246 – 1252.

43. Shih J.-J., Huang H.-C., Wu G.Y. Effect of mass discontinuity in the Wigner theory of resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50, N4. P. 2399 – 2405.
44. Роч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
45. Buot F.A., Jensen K.L. Lattice Weyl – Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 42, N15. P. 9429 – 9457.
46. Biegel B.A., Plummer J.D. Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54, N11. P. 8070 – 8082.
47. Jensen K.L., Buot F.A. The methodology of simulating particle trajectories through tunneling structures using a Wigner distribution approach // *IEEE Trans.* 1991. V. ED-38, N10, P.2337 – 2347.
48. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва – Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
49. Займан Дж. Современная квантовая теория. М.: Мир, 1971. 288 с.
50. Каданов Л., Бейм Г. Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов. М.: Мир, 1964. 256 с.
51. Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ*. 1964. Т. 47, вып.4. С. 1515 – 1527.
52. Datta S. Steady-state quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40, N8. P. 5830 – 5833.
53. Datta S. A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1990. V. 2, P. 8023 – 8052.

54. Lake R.K., Datta S. Nonequilibrium Green's-function method applied to double-barrier resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B*. 1992. V. 45, N12. P. 6670 – 6685.
55. Quest: User's manual / G. Klimeck, R.K. Lake, M.J. McLennan, S. Datta // Technical report TR-EE 93-17, School of Electrical Engineering, Purdue University, West Lafayette, IN 47907-1285, April, 1993. 118 p.
56. Quantum device simulation with a generalized tunneling formula / G. Klimeck, R. Lake, R.C. Bowen, W.R. Frensley, T.S. Moise // *Appl. Phys. Lett.* 1995. V. 67, N17. P. 2539 – 2541.
57. Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices / R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, D. Jovanovic // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 81, N12. P. 7845 – 7869.
58. Ogawa M., Sugano T., Miyoshi T. Full multiband simulation of quantum electron transport in resonant tunneling devices // *Solid-State Electron*. 2000. V. 44, P. 1939 – 1947.
59. Klimeck G. Quantum and semi-classical transport in NEMO-1D // *J. of Comput. Electron*. 2003. V. 2, P. 177 – 182.
60. Coupling between the Liouville equation and a classical Monte Carlo solver for the simulation of electron transport in resonant tunneling diodes / F. Martin, J. Garcia- Garcia, X. Oriols, J. Suñé // *Solid-State Electron*. 1999. V. 43, P. 315 – 323.
61. Garcia-Garcia J., Martin F. Simulation of multilayered resonant tunneling diodes using coupled Wigner and Boltzmann distribution function approaches // *Appl. Phys. Lett.* 2000. V. 77, N21. P. 3412 – 3414.
62. Resonant-tunneling diodes with emitter prewells / T.S. Boykin, R.C. Bowen, G. Klimeck, K.L.Lear // *Appl. Phys. Lett.* 1999. V. 75, N9. P. 1302 – 1304.

63. Experimental sensitivity analysis of pseudomorphic InGaAs/AlAs resonant-tunneling diodes / T.S. Moise, Y.-C. Cao, A.J. Katz, T.P.E. Broekaert, F.G. Celii // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 78, N10. P. 6305 – 6317.
64. Bohm trajectories for the Monte Carlo simulation of quantum-based devices / X. Oriols, J.J. Garcia- Garcia, F. Martin, J. Suñé, T. González, J. Mateos, D. Pardo // *Appl. Phys. Lett.* 1998. V. 72, N7. P. 806 – 808.
65. Towards the Monte Carlo simulation of resonant tunneling diodes using time-dependent wavepackets and Bohm trajectories / X. Oriols, J.J. Garcia-Garcia, F. Martin, J. Suñé, J. Mateos, T. González, D. Pardo, O. Vanbésien // *Semicond. Sci. Technol.* 1999. V. 14, P. 532 – 542.
66. Jacoboni C., Bordone P. The Wigner-function approach to nonequilibrium electron transport // *Rep. Prog. Phys.* 2004. V. 67, N7. P. 1033 – 1071.
67. Fischetti M.V. Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli master equation // *J. Appl. Phys.* 1998. V. 83, N1. P. 270 – 291.
68. Grubin H.L., Kreskovsky J.P. Quantum moment balance equations and resonant tunneling structures // *Solid-State Electron.* 1989. V. 32, N12. P. 1071 – 1075.
69. Обухов И.А. Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах. Севастополь: Вебер, 2005. 226 с.
70. Обухов И.А. Моделирование статических характеристик резонансно-туннельных приборов // *Микросистемная техника.* 2001. № 2. С. 23 – 28.

ГЛАВА 6

ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СТРУКТУРЫ

С использованием предложенной ранее классификации проанализированы модели разнообразных приборных структур одноэлектроники. Рассмотрены перспективы развития данной области нанoeлектроники.

Эффект одноэлектронного туннелирования был теоретически предсказан в 1985 году К.К. Лихаревым и Д.В. Авериным [1]. Его сущность заключается в возможности в туннельных переходах с малой собственной емкостью дискретного коррелированного туннелирования одиночных электронов сквозь туннельные барьеры. Возможно коррелированное упорядоченное туннелирование и дырок, а также, вообще говоря, небольших ансамблей носителей заряда (квантовые макроскопические эффекты), например куперовских пар в эффекте Джозефсона, и не только! Открытию эффекта одноэлектронного туннелирования предшествовали в конце 60-х – начале 70-х годов прошлого века исследования туннельных контактов типа "металл-оксидный слой-металл" с содержанием в оксидном слое металлических гранул. Оказалось, что при низких температурах в таких структурах на вольт-амперных характеристиках (ВАХ) может наблюдаться подавление тока при малых напряжениях (кулоновская блокада). В результате, структуры, в которых наблюдается эффект одноэлектронного туннелирования и явление кулоновской блокады, обладают существенно нелинейными ВАХ, что позволяет создавать на их основе самые разнообразные электронные приборы и устройства [2].

Непосредственно эффект дискретного одноэлектронного туннелирования впервые экспериментально наблюдался в

структурах, описанных в [3,4]. К настоящему времени разработано большое количество различающихся приборных структур, функционирующих на основе данного эффекта. Как итог, стало сложно ориентироваться в этой очень бурно развивающейся области – одноэлектронике. Поэтому в работах [5 – 7] была предложена классификация таких структур.

6.1. Классификация одноэлектронных приборных структур

Рассмотрим сущность классификации [5 – 7], так как ее ключевые моменты будут важны для дальнейшего изложения материала. В основу классификации положены следующие принципы.

I. Выделив характерные активные области приборов, будем различать указанные ниже *классы одноэлектронных приборных структур*.

1. *Однотуннельные приборы*. Такие структуры содержат только один туннельный переход.

2. *Цепочки туннельных переходов*. К этому классу относятся структуры, содержащие два и более туннельных переходов в активной области, соединенные последовательно. Наиболее изученный прибор данного класса – одноэлектронный транзистор [2,8]. Отметим, что в настоящее время большинство одноэлектронных приборов относится именно к классу цепочек туннельных переходов.

3. *Матрицы туннельных переходов*. Структуры этого класса содержат в активной области последовательное и параллельное соединения туннельных переходов в плоскости, например в гранулированных микроперемычках [9].

4. *Массивы туннельных переходов.* Такие структуры содержат последовательное и параллельное соединения туннельных переходов в различных измерениях.

Многочисленные примеры приборных структур выделенных классов приведены в [5 – 7].

Каждому из отмеченных классов может быть поставлена в соответствие определенная размерность, а именно: однотуннельным приборам – нульмерный элемент (0D); цепочкам туннельных переходов – одномерный массив (1D); матрицам – двумерный (2D); массивам – трехмерный набор элементов (3D). Здесь лишь отметим различие этой "размерности" и "размерности" структур с квантовомеханической точки зрения [10]. Не следует их путать!

II. Каждый из указанных классов приборных структур (соответствующей размерности) может быть представлен определенным видом *принципиальной структурной схемы*. Их вид для каждого из классов приведен в [5 – 7]. Здесь дадим вид только для цепочек туннельных переходов, представляющих для нас наибольший интерес, а точнее – один из возможных вариантов схемы (рис. 1).

III. Условно выделяются *виды* одноэлектронных приборных структур по материалам островка (островков), а именно [5 – 7]: 1) металлические; 2) полупроводниковые; 3) диэлектрические; 4) органические; 5) композиционные.

IV. По технологическим методам изготовления, материалам, формирующим различные области, управляющим электродам и другим принципам можно выделить *разновидности* одноэлектронных приборных структур.

Многочисленные примеры различных видов и разновидностей приборов одноэлектроники также приведены в [5 – 7]. Важно отметить, что *в настоящее время уже созданы одноэлектронные приборные структуры всех основных видов*

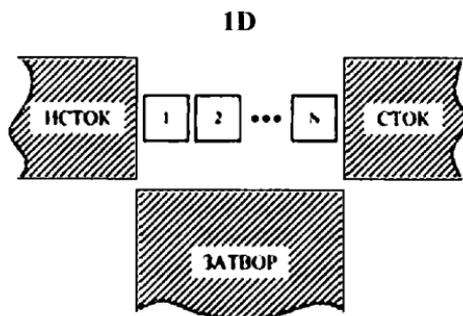


Рис.1 Вид принципиальной структурной схемы
многоостровковой цепочки

(за исключением диэлектрических), функционирующие при комнатной температуре, а также интегральные схемы (ИС), содержащие одноэлектронные элементы. Многое, однако, предстоит сделать по повышению степени интеграции ИС.

6.2. Модели ортодоксальной теории

В принципе, при моделировании одноэлектронных приборных структур могут использоваться отмеченные ранее формализмы [10], применяемые для резонансно-туннельных структур [11]. Развитие моделей рассматриваемого типа приборов нанoeлектроники полностью подтверждает это утверждение. Однако, следует отметить несколько важных особенностей. Во-первых, в приборах одноэлектроники возможно большое количество туннельных переходов. В резонансно-туннельных диодах (РТД) их обычно всего лишь два. Во-вторых, эффект дискретного коррелированного одноэлектронного туннелирования – нестационарный (стохастический) эффект, поэтому, вообще говоря, необходим

анализ переходных процессов. В-третьих, для интенсивно исследуемых одноэлектронных приборных структур уже характерно большее разнообразие, в частности используемых материалов, т.е. видов структур (см. ранее). Отметим, что наиболее ярко эффект одноэлектронного туннелирования проявляется в металлических одноэлектронных структурах, так как размеры островков достаточно большие, поэтому пространственное квантование, т.е. другой, квантовомеханический эффект, обычно можно не учитывать. Необходимо рассматривать лишь дискретность заряда на островках, так как они все же не очень большие. В то же время в полупроводниковых одноэлектронных структурах, включающих квантовые точки (островки), учет пространственного квантования может быть обязателен. В результате возможно сосуществование эффектов одноэлектронного и резонансного туннелирования. Ясно, что отличия в моделях приборов даже отмеченных двух видов могут быть значительны (см. далее). В-четвертых, для ряда одноэлектронных приборных структур необходим многомерный анализ. Следствием отмеченных основных причин (усложнений относительно резонансно-туннельных структур) является то, что *модели приборов одноэлектроники должны быть достаточно (в целом, еще более) грубы.*

Впервые эффект одноэлектронного туннелирования был предсказан в одиночных туннельных переходах с малой емкостью и проводимостью в режиме токового смещения. Его микроскопическая теория была развита в работах [1,12]. Рассмотрим основные моменты предложенной модели.

Д.В. Авериним и К.К. Лихаревым использовался формализм матриц плотности и была выполнена программа, описанная в [10] для данного формализма. Анализировался туннельный переход между металлами 1 и 2, подсоединенный к источнику фиксированного внешнего тока $I(t)$ и в общем случае

шунтированный внешней проводимостью G_S нетуннельного (металлического) характера. Гамильтониан такой системы представляется в виде [1,12]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_T + \hat{H}_I; \quad (1)$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_S + Q^2 / 2C, \quad (2)$$

где \hat{H}_0 - гамильтониан невозмущенной системы; \hat{H}_T , \hat{H}_I - члены, определяемые туннелированием и внешним током; $\hat{H}_{1,2}$, \hat{H}_S - описывают внутренние степени свободы металлов 1 и 2 и шунта; $Q^2 / 2C$ - электростатическая энергия перехода как конденсатора емкостью C , а Q - заряд. Случай нешунтированных туннельных переходов рассмотрен в [13]. В микроскопическом подходе туннельный оператор \hat{H} представляется с помощью туннельного гамильтониана [14].

Замкнутое уравнение для матрицы плотности, описывающее динамику заряда $Q = CV$ (и напряжения V) на переходе при фиксированном внешнем токе $I(t)$, в представлении взаимодействия получено в [1,12] и имеет следующий операторный вид:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \hat{F}_I + \hat{F}_S + \hat{F}_T, \quad (3)$$

где $\hat{\rho}$ - матрица плотности; $\hat{F}_I, \hat{F}_S, \hat{F}_T$ - операторы, характеризующие влияние внешнего тока, шунта и туннелирования. Для матриц (их элементов) данных операторов получены явные выражения [1,12] в первом порядке теории возмущений в предположении их независимости. В уравнении (3)

$$\hat{\rho} = Tr_{1,2,S} \hat{\rho}_\Sigma, \quad (4)$$

где $\hat{\rho}_\Sigma$ - матрица плотности всей системы, а след взят по внутренним состояниям электродов 1,2 и шунта S . К сожалению, использовать (3) достаточно сложно, поэтому необходимы дальнейшие упрощения.

В случае отсутствия джозефсоновского туннелирования, например, для нормальных металлов, и не слишком большой проводимости шунта G_S , а именно:

$$G_S R_Q \leq 1; \quad R_Q = \pi \hbar^2 / 2e^2 \approx 6,7 \text{кОм} \quad (5)$$

матрица плотности быстро становится диагональной, а ее ненулевые элементы фактически определяют плотность вероятности σ . В (5) \hbar – постоянная Планка, деленная на 2π . При определенном ограничении на максимальную скорость изменения σ для плотности вероятности получается менее сложное по сравнению с (3) кинетическое уравнение [1,12]. Его анализ при низких температурах T , если заряд находится в области

$$-e/2 < Q < e/2, \quad (6)$$

где e – величина заряда электрона, приводят к выводу, что туннелирование полностью подавляется (кулоновская блокада туннелирования) [1,12]. Как уже отмечалось, аналогичное явление наблюдалось в туннельных переходах с металлическими гранулами в оксидном слое. Модель таких переходов с учетом дискретности заряда на гранулах на основе кинетического уравнения для функции распределения электронов по гранулам, выведенного исходя из уравнения для матрицы плотности, была построена ранее в [15]. Заметим, что при этом не учитывалось взаимодействие с внешней цепью (не был включен существенный для анализа член \dot{H}_I в (1)), которое в случае одноэлектронного туннелирования принципиально важно (см. далее). Отличный обзор первых работ по одноэлектронике и важнейших для ее становления дан в [16].

При постоянном внешнем токе $I(t) = \text{const}$ выше некоторого порогового значения возможно возникновение одноэлектронных когерентных (монохроматических) колебаний заряда и напряжения с частотой, которая ровно в два раза выше частоты блоховских колебаний. Последние, как было показано [17], могут возникать в джозефсоновских переходах малых размеров при низких температурах и сосуществовать с одноэлектронными [1,12]. Для переходов между нормальными металлами при ряде дополнительных предположений кинетическое уравнение для плотности вероятности может быть решено [1,12]. Это решение и описывает процесс одноэлектронных когерентных колебаний, т.е. эффект одноэлектронного туннелирования. С увеличением температуры (выше определенной величины [1,12,13]) одноэлектронные колебания полностью подавляются.

"Физическая первопричина осцилляций, конечно, кулоновская блокада туннелирования; другими словами, большое кулоновское взаимодействие туннелирующих электронов в режиме токового смещения перехода малой емкости C . Фактически, в таком переходе акт туннелирования приводит к заметному изменению

$$\Delta V = \pm e / C \quad (7)$$

напряжения V на переходе. Если эта величина больше чем среднеквадратичное значение величины маскирующих термических флуктуаций, другие электроны "чувствуют" это изменение, и устанавливается сильная корреляция туннельных событий: после одного туннельного акта другие блокируются до тех пор, пока дополнительный заряд $\pm e$ не заменится некваंटующими схемами шунта и источника тока" [12]. Такая корреляция туннельных событий называется временной [16]. Принципиально в рассматриваемом эффекте такое *своеобразное взаимодействие активной структуры (квантовомеханической (!) области, так как происходит туннелирование) и ее*

* Имется ввиду заряд.

окружения (макроскопических или классических областей). Таким образом, эффект одноэлектронного туннелирования в одиночных переходах малой емкости является ярким примером важности взаимодействия квантовомеханических и макроскопических (классических) областей [10].

Рассмотренная "сильно упрощенная картина одноэлектронных осцилляций" [16] имеет место в пределе низких постоянных токовых смещений и температур, малых проводимостей перехода и нулевой проводимости шунта G_S . В связи с этим было бы желательно построить теорию непосредственно на основе, хотя и упрощенного, но более строгого уравнения для матрицы плотности (3). Наблюдение эффекта одноэлектронного туннелирования описанного типа, т.е. *временная (авто)корреляция последовательных одноэлектронных туннельных событий в одном (месте пространства) и том же переходе*, достаточно сложная проблема [16]. Это связано с несколькими причинами, а именно: 1) отмеченной повышенной степенью идеализированности модели, на основе которой сделаны оценки; 2) достаточно "жесткими" условиями, которые необходимо выполнить для наблюдаемого эффекта; 3) фиксация тока в эксперименте весьма затруднительна. Сильное влияние оказывает и характер окружения.

По этим причинам предпочтение отдается другому классу одноэлектронных приборных структур, в частности цепочкам туннельных переходов. Именно в них впервые и наблюдался экспериментально эффект одноэлектронного туннелирования [3,4,16]. В цепочках туннельных переходов возможен и/или эффект другого типа по сравнению с отмеченным – *временная взаимная ("пространственная") корреляция одноэлектронных туннельных событий в разных (местах пространства) переходах* [16]. Наблюдение данного типа эффекта происходит при фиксации напряжения, что легче реализуется в экспериментах. По изложенным причинам далее остановимся на

проблемах и принципах моделирования в основном *цепочек туннельных переходов*. Так как эффект наиболее ярко проявляется (см. ранее) в *металлических одноэлектронных приборных структурах*, то предпочтение отдадим именно этому виду структур.

С целью описания динамики носителей заряда полученное и отмеченное ранее упрощенное кинетическое уравнение для плотности вероятности одиночного перехода [1,12] было обобщено на случай цепочек туннельных переходов в виде [2,8]:

$$\frac{\partial \sigma\{n\}}{\partial t} = f_0\{n\} + \sum_k \sum_{\pm} \left[\Gamma_k^{\mp}\{n_k^{\pm}\} \sigma\{n_k^{\pm}\} - \Gamma_k^{\pm}\{n\} \sigma\{n\} \right], \quad (8)$$

где f_0 описывает динамику в отсутствие туннелирования и соответствует обычному уравнению Фоккера – Планка, $\{n\} = \{n_1, \dots, n_k, \dots\}$ и обозначает набор чисел электронов, прошедших через соответствующий переход, $\{n_k^{\pm}\}$ – характеризует набор после туннелирования одного электрона через k -й переход, т.е. $\{n_k^{\pm}\} = \{n_1, \dots, n_k \pm 1, \dots\}$, Γ_k^{\pm} – скорости туннелирования, вычисляемые с помощью соотношения [2,8]

$$\Gamma_k^{\pm}\{n\} = \frac{1}{e} I_k^{\pm} [(E\{n\} - E\{n_k^{\pm}\}) / e], \quad (9)$$

$$I_k^{\pm}(V) = I_k(V) \frac{S(\pm)}{S(+)-S(-)}, \quad S(\pm) = \exp(\pm \frac{eV}{2k_B T}),$$

где $I_k(V)$ описывает классическую ВАХ k -го перехода, E – свободная энергия системы, k_B – постоянная Больцмана. При малых прикладываемых напряжениях V характеристика обычно считается линейной [2,8]

$$I_k(V) = V / R_k, \quad (10)$$

где R_k – сопротивление k -го туннельного перехода, для которого должно выполняться условие типа (5), т.е. $R_k \gg R_Q$.

Традиционно свободная энергия системы определяется электростатической энергией и считается зависящей от емкостей C_k туннельных переходов, количества электронов n_k , прошедших через переходы, фоновых зарядов на островках Q_i и прикладываемых напряжений. Заметим, что количество островков не равно количеству переходов. Кинетическое уравнение (8) принято называть *основным* уравнением ("master equation") *одноэлектроники*, а соответствующая теория – *ортодоксальной*.

В описанной модели цепочка туннельных переходов может представляться в виде эквивалентной схемы. Основными исходными параметрами модели являются емкости C_k и сопротивления R_k туннельных переходов, т.е. модель фактически относится к разновидности электрических [18,19]. Обратим все же внимание на принципиальное отличие от традиционных электрических моделей, описывающих детерминированные процессы [19]. Кроме того, в эквивалентных схемах здесь часто используются особые обозначения для туннельных переходов малой емкости (см. например [2,16]). Многое, конечно же, зависит от представления f_0 , $I_k(V)$ и, строго говоря, Q_i . В связи с этим в общем случае на основе уравнения (8) может быть построена более сложная и адекватная комбинированная модель, например путем вычисления сопротивлений R_k с помощью плотностей состояний [20].

Данный по своей сути *полуклассический подход* с успехом применялся для построения ряда моделей для расчета ВАХ относительно простых одноэлектронных цепочек туннельных переходов, в частности одноостровкового транзистора [20,21] и более сложных (до четырех островков) цепочек [21 – 24]. Недостаток использования основного уравнения проявляется в том, что с увеличением количества туннельных переходов резко

* См. замечание в статье [11].

увеличивается число состояний, которые подлежат рассмотрению. Результатом является сильное усложнение вычислений и существенное увеличение затрат времени ЭВМ. Возможно также появление численных неустойчивостей. В то же время многоостровковые цепочки обладают рядом преимуществ по сравнению с одноструктурными и одноостровковыми транзисторами. Для них, в частности, характерны [21,25]: возможность двух отмеченных типов одноэлектронного эффекта при фиксации внешнего напряжения; низкая чувствительность к паразитному эффекту со-туннелирования; большие значения рабочих температур и пороговых напряжений области кулоновской блокады. Поэтому при одинаковых технологических методах изготовления многоостровковые цепочки, как правило, обладают улучшенными параметрами по сравнению с указанными простыми приборными структурами. Менее жесткие требования предъявляются и к самим технологическим методам.

Отметим, что в случае многоостровковых цепочек роль макроскопических областей выполняют и оставшиеся переходы из набора туннельных переходов (квантовомеханические области), кроме активного(ых) перехода(ов), и островки, в которых осуществляется (квази)непрерывный перенос заряда вследствие электрической поляризации [26]. Таким образом, квантовомеханические области (активные подобласти) могут как бы "растворяться" в макроскопических, т.е. становиться "пассивными". Итак, мы хотели отказаться от статистических ансамблей носителей заряда, которые присутствуют в элементах микроэлектроники, так как стремимся к меньшим размерам активных областей приборных структур. Что же мы получили? С одной стороны, поведение электронов в одноэлектронных структурах все же вероятностное. С другой стороны, многоостровковые одноэлектронные структуры за счет увеличения количества туннельных переходов (и островков) обладают улучшенными и более стабильными свойствами. В

итоге, от "многих" носителей в активной области переходим к "многим" активным подобластям, которые становятся активными, как правило, в различные моменты времени! Следовательно, статистические принципы в хранении, обработке и передаче информации и здесь важны. Но по-другому.

По изложенным причинам разработка моделей цепочек туннельных переходов с большим количеством островков – актуальная задача. В принципе, для этих целей может использоваться основное уравнение, например путем введения различного рода дополнительных физических предположений [27]. Альтернативное решение проблемы, однако, заключается в применении метода Монте-Карло [26]. И в этом случае многоостровковая структура представляется эквивалентной схемой. Основные исходные параметры (электрической) модели также емкости C_i и сопротивления R_i туннельных переходов. Возможен также учет важных для электростатического взаимодействия и других компонент системы, в частности матрицы взаимных емкостей, включающей не только C_i , но и паразитные емкости. Отметим, что с помощью данной модели можно моделировать как стационарные состояния (и рассчитывать ВАХ*), так и динамику рассматриваемой цепочки. Модель является в целом достаточно эффективной и позволяет анализировать весьма сложные приборные структуры и схемы одноэлектроники [26 – 28]. В этом ее бесспорное достоинство. К тому же метод Монте-Карло обладает хорошей численной устойчивостью. Кроме того, он достаточно полно отражает реальные микроскопические процессы, протекающие в одноэлектронных приборах и схемах. Недостаток метода заключается в сложности учета редких событий, которые могут приводить к сбоям в работе рассматриваемых устройств. К ним, в частности, относится со-туннелирование [21]. В этом случае

* Имеется ввиду зависимость среднего значения тока от напряжения [20,26].

использование метода Монте-Карло не экономично вследствие существенных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ.

Макроскопический эффект со-туннелирования заключается в возможности туннелирования K носителей заряда ($K > 1$) сразу через $N > 1$ переходов (N может быть, строго говоря, равно и 1 [21]). Он является редким событием в одноэлектронных структурах и наиболее вероятен при низких температурах. Его описание возможно с помощью системы основных уравнений (в покомпонентном виде) [29]

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_j \Gamma_{ji} P_j - \sum_j \Gamma_{ij} P_i, \quad (11)$$

где P_i – вероятность i -го состояния, а Γ_{ij} – скорость перехода между i - и j - состоянием (вероятность соответствующего перехода в единицу времени), причем $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ji}$, а $\Gamma_{ii} = -\sum_{j \neq i} \Gamma_{ij}$.

Строгое решение задачи для редких событий типа со-туннелирования на основе (11) крайне затруднительно, так как даже для одноэлектронных цепочек с количеством островков от 5 – 6 до 20 – 30 (практически важный случай) учет всех возможных состояний и переходов между ними практически невозможен [29]. В [29] и в [30] (для случая постоянного токового смещения) были построены модели, позволяющие учесть редкие события, включая со-туннелирование различных порядков. В их основе лежит приближенное последовательное решение системы уравнений (11) с использованием ряда допущений. Наиболее важными являются применяемые при вычислении скорости туннелирования. Заметим, что исходное выражение (до аппроксимации) для Γ_{ij} даже в случае учета N -го порядка только неупругого со-туннелирования [21,29] сильно усложняется по сравнению с (9) (и подобным ему [21]). Модели, к сожалению, реально применимы для небольшого количества туннельных переходов (до 6 – 8 [29,30]) и должны

рассматриваться как весьма приближенные. Поэтому их целесообразно использовать лишь для соответствующих оценок [29,30].

Существенный недостаток рассмотренных до сих пор моделей одноэлектронных структур заключается в том, что основные подгоночные при согласовании с экспериментом параметры в них – емкости и сопротивления туннельных переходов. Причем зачастую их численные значения не (или весьма условно) соответствуют экспериментальным данным или оцененным другими способами [21 – 24]. Хорошо если R_i и C_i – одинаковые для всех переходов, что обычно и предполагается при расчетах многоостровковых структур (см., например [21,26 – 28]). Очевидно, что значения R_i и C_i , строго говоря, не одинаковы для разных переходов в реальных приборах, хотя бы вследствие естественных технологических девиаций. В этих случаях для моделирования более или менее сложных многоостровковых одноэлектронных структур на практике приходится "подгонять" (настраивать), по крайней мере, матрицу взаимных емкостей, считая сопротивления заданными и фиксированными, причем ряда переходов одинаковыми [29]. Ясно, что даже в таком упрощенном подходе задача становится с увеличением количества переходов по-прежнему невыполнимой. Поэтому в этом случае необходимы, хотя бы какие-то приближенные, предварительные оценки для матрицы взаимных емкостей* [29]. Далее, в принципе, могут "подстраиваться" численные значения лишь небольшого количества емкостей. При этом следует помнить о разумных ограничениях, например на минимальные численные значения емкостей, определяемые технологией. Заметим также, что при моделировании многоостровковых структур приходится пренебрегать, по крайней мере, влиянием некоторых взаимных

* Расчет матрицы взаимных емкостей исходя из геометрии прибора – серьезная проблема, что приводит к необходимости использования существенных предположений и, как следствие, к возможности больших погрешностей [31].

емкостей, так как учесть их все практически невозможно! Кроме того, с помощью описанных электрических моделей крайне сложно исследовать влияние конструктивно-технологических и электрофизических параметров на характеристики одноэлектронных структур, потому что эти параметры не являются непосредственно исходными данными таких моделей. По изложенным причинам *актуальна задача разработки физико-топологических моделей приборных структур одноэлектроники.*

6.3. Физико-топологические модели

При построении таких моделей, к сожалению, приходится преодолевать ряд проблем. Так, в общем случае необходимо решать очень сложную самосогласованную задачу [7]: систему уравнений для микрополей, кинетические уравнения и уравнение Шредингера. При этом задача является, строго говоря, трехмерной (малая емкость и малый островок). Возможны ли упрощения?

Ответ на этот вопрос – утвердительный. В частности, в работах [7,32 – 36] была предложена двумерная физико-топологическая модель металлического одноэлектронного транзистора с одним островком в рамках полуклассического приближения. В дальнейшем предложенный подход был распространен на случаи многоостровковых цепочек [37 – 41] и матриц туннельных переходов [42], а также полупроводниковых одноэлектронных приборных структур*.

Рассмотрим сущность предложенного подхода на примере многоостровковых цепочек. Первым важным моментом является представление приборной структуры в виде, показанном на рис.

1. Отметим, несмотря на то что реальные структуры

* См. И.И. Абрамов, А.Л. Баранов. Нано- и микросистемная техника. 2010 № 3 С. 2 – 6.

традиционно имеют более сложную конфигурацию, наши расчеты доказывают обоснованность такого представления. Подчеркнем, что это принципиально важно, так как использование реальной геометрии структур может существенно усложнить численный анализ, а в некоторых случаях сделать его просто вряд ли возможным. Упрощается также и процесс задания исходных данных.

Вторым важным моментом в подходе является предположение о допустимости применимости основного уравнения для описания туннельных событий в одноэлектронной приборной структуре. На практике используется основное уравнение, записанное непосредственно для токов через отдельные туннельные переходы. Для двухостровковой структуры оно принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}
 e \frac{\partial P(n_1, n_2)}{\partial t} = & I_{n_1-1, n_2 \rightarrow n_1, n_2} P(n_1-1, n_2) + \\
 & + I_{n_1, n_2-1 \rightarrow n_1, n_2} P(n_1, n_2-1) + \\
 & + I_{n_1+1, n_2 \rightarrow n_1, n_2} P(n_1+1, n_2) + \\
 & + I_{n_1, n_2+1 \rightarrow n_1, n_2} P(n_1, n_2+1) - \\
 & - (I_{n_1, n_2 \rightarrow n_1+1, n_2} + I_{n_1, n_2 \rightarrow n_1, n_2+1} + \\
 & + I_{n_1, n_2 \rightarrow n_1-1, n_2} + I_{n_1, n_2 \rightarrow n_1, n_2-1}) P(n_1, n_2),
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

где $P(n_1, n_2)$ – вероятность нахождения избыточных носителей заряда на островах; n_1, n_2 – количество избыточных носителей на первом и втором островах; $I_{n_1-1, n_2 \rightarrow n_1, n_2}$ – сумма токов через туннельные переходы при изменении числа избыточных носителей на единицу (в данном случае на первом острове).

Токи, проходящие через переходы, определяются согласно [21,25,37]:

$$I = \frac{V_{eff}}{R} \left[1 - \exp\left(-\frac{eV_{eff}}{k_B T}\right) \right]^{-1}. \quad (13)$$

$$V_{eff} = \frac{V_i + V_f}{2}. \quad (14)$$

где V_i, V_f – разность потенциалов на туннельном переходе до акта туннелирования и после. Для расчета сопротивления R в (13) используется известное соотношение [7], в которое входят плотности состояний электродов и вероятность переноса носителей через переход, вычисляемая в модели.

Третьим важным моментом в подходе является расчет значений величин V_i и V_f . Отметим, что это, как оказалось, самый сложный вопрос. Так, здесь, строго говоря, необходимо решать систему уравнений Лоренца для микрополей. В случае допустимости неучета магнитного поля исходным остается только уравнение Пуассона, в которое однако входит микроскопическая истинная плотность числа частиц на островке, если не учитывать заряды в диэлектрике. Задача после этого заключается в вычислении усредненной плотности заряда на островке, так как для расчета V_i и V_f необходимо находить решения уравнения Пуассона для макроскопического поля в активной области приборной структуры (рис. 1) до и после туннелирования через соответствующий переход. Заметим, что при этом надо учесть влияние третьего измерения!

Для решения этой непростой задачи используется набор физических предположений [7,36,37], основными из которых являются: 1) дельта-функция микроскопической плотности заряда на островке с номером l заменяется гауссоидой; 2) значение дисперсии σ_l выбирается, привлекая правило трех сигм, на основе характерного размера l -го островка $L_{xap\,l}$; 3) в качестве этого размера берется длина l -го островка в

направлении переноса носителей заряда. Непростой вопрос связан и с учетом фонового заряда, так как он распределен по островку случайным образом. Поэтому в общем случае практически невозможно дать для него истинное микроскопическое описание. К счастью, наши результаты показывают, что в этом нет особого смысла, по крайней мере в рамках используемого полуклассического приближения. Это позволило с учетом очень малого количества дискретных зарядов, составляющих суть фонового заряда на островке, предложить три простые аппроксимации для его учета в двумерной численной модели одноэлектронного одноостровкового транзистора [36], которые естественным образом распространяются и на многоостровковые цепочки и матрицы туннельных переходов [37,42]. Предложенные аппроксимации позволяют вычислять усредненную плотность заряда на островках в зависимости от числа N_{II} носителей заряда, участвующих в туннелировании, и числа N_{0I} , характеризующего фоновый заряд и которое может быть, как известно, нецелым числом, согласуемым с экспериментом. Отметим, что для вычисления усредненной плотности заряда на островках часто требуется всего лишь один (!) согласующий с экспериментальными данными параметр [36,37]. В то же время N_{0I} , хотя и задается в модели, иногда может просто не учитываться явно [7,36]. С точки зрения автора это весьма неплохо, особенно для многоостровковых структур, что подтверждается расчетами [37 – 42].

Сделаем замечание о сложности определения усредненной плотности заряда на островке. Полное количество электронов на металлическом островке обычно составляет около миллиона. Удивление может вызвать даже у К.К. Лихарева, как одноэлектронная структура, несмотря на такое огромное и неизвестное количество носителей, чрезвычайно чувствительна к появлению всего лишь одного дополнительного носителя

заряда или его части (фоновый заряд) и при этом работоспособна?! Это может быть объяснено очень сильным незранированным кулоновским взаимодействием в рассматриваемом случае [25]. Кроме того, электронейтральность островка до появления заряда, судя по всему, выполняется с относительно высокой степенью точности. Именно этими факторами и можно объяснить то, что несмотря на кажущуюся грубость используемых аппроксимаций для усредненной плотности зарядов на островке, предложенный подход позволяет получить хорошее согласование с экспериментальными данными для разнообразных приборных структур одноэлектроники на различных материалах, по крайней мере по стоковым и сток-затворным ВАХ [7,32 – 43]. Кроме того, с помощью моделей определяется и распределение электростатического потенциала в элементе. При моделировании многоостровковых структур с увеличением количества островков более экономичным становится использование модели, базирующейся не на основном уравнении типа (12), а на методе Монте-Карло [39 – 42].

Отметим два главных преимущества моделей описанного подхода по сравнению с электрическими моделями, а именно: 1) они обеспечивают более полную связь электрических характеристик с конструктивно-технологическими и электрофизическими параметрами одноэлектронных приборных структур при одновременно хорошей адекватности моделирования. Это позволяет использовать модели данного подхода для определения необходимых размеров, подбора материалов и прогноза электрических характеристик приборов одноэлектроники, а также для более глубокого исследования физических процессов в них с целью выявления ряда

* Для остальных носителей заряда, кроме указанных и описываемых N_{il} и N_{0l} , это предположение явно использовалось нами при выводе аппроксимаций для усредненной плотности заряда на островке с номером l [7,32,33,36].

закономерностей [7,34 – 43]. Возможно и восстановление некоторых геометрических размеров структур, которые трудно идентифицировать экспериментально [39]; 2) количество согласуемых с экспериментом параметров в них невелико (всего лишь несколько) и обычно не возрастает с ростом числа островков. Это бесспорно тоже важно.

Основным недостатком является, как правило, меньшая экономичность моделей по сравнению с электрическими вследствие необходимости многократно решать уравнение Пуассона, несмотря на относительно высокую эффективность разработанных алгоритмов его решения [7]. И тем не менее, моделирование достаточно сложных одноэлектронных многоостровковых структур, по крайней мере до 25 островков, возможно с применением метода Монте-Карло на персональной ЭВМ типа Pentium III при одновременно хорошей точности расчета ВАХ.

В целом, электрические модели описанной ""ортодоксальной" теории позволяют получить количественное согласование фактически со всеми экспериментальными данными для систем с металлическими проводниками ... и дают, во всяком случае, качественное согласование большинства результатов для большинства полупроводниковых структур" [25]. С помощью физико-топологических моделей разработанного подхода [7,32 – 43] достигаются, по крайней мере, не хуже в этом же плане результаты для металлических и полупроводниковых одноэлектронных приборных структур, чем для электрических моделей.

Таким образом, *полученные результаты доказывают высокую эффективность использования полуклассического подхода для построения как электрических, так и физико-топологических моделей приборов одноэлектроники.*

6.4. Другие модели, включая модифицированные

Анализ литературы показывает, что основными направлениями модификации моделей ортодоксальной теории являются следующие: 1) вывод соотношений для скоростей туннелирования (перехода) повышенной адекватности; 2) учет разнообразных паразитных эффектов; 3) включение в рассмотрение пространственного квантования.

С самого начала развития теории было показано очень важное в общем случае (не обязательно при справедливости соотношений типа (5)) влияние на скорость туннелирования окружения, включая внешние цепи, другие электромагнитные, радиационные воздействия и т.п. Поэтому разработке ее моделей было уделено самое серьезное внимание. Хороший обзор ранних работ в данном направлении приведен в книге [21]. Сложность заключается, строго говоря, в необходимости квантовомеханического рассмотрения влияния окружения. В связи с этим при выводе выражений для скорости туннелирования используется набор физических предположений. Туннельный гамильтониан обычно трактуется как малое возмущение и применяется квантовомеханическое "золотое правило", что позволяет получить в ряде практически важных случаев достаточно простые формулы. В более общих случаях необходимо использовать численные методы [21]. К счастью, с увеличением количества туннельных переходов влияние окружения существенно ослабляется. Происходит как бы развязка "активного" туннельного перехода с окружением с помощью других "пассивных" туннельных переходов. Это свойство, в частности, очень интенсивно применялось для дальнейшего экспериментального подтверждения различных типов эффекта одноэлектронного туннелирования и при разработке новых приборов в ряде ранних исследований. В результате, использование простых приближенных соотношений для скорости туннелирования (типа (9), (10)) и обеспечивает

отмеченное ранее неплохое качество полученных результатов сравнения с экспериментальными данными, т.е. в целом оправдано.

Заметим, что возможны более строгие микроскопические подходы для описания скорости туннелирования [21,44 – 46]. Общая физика здесь ясна. Так, электромагнитное воздействие модифицирует спектр элементарных возбуждений кристаллической решетки металлов, слоев изоляторов, через которые туннелируют электроны. В итоге могут ощутимо изменяться основные характеристические параметры длины, энергии и времени малых областей одноэлектронной приборной структуры. Поэтому, в действительности, проблема достаточно серьезная. В настоящее время, однако, используются различные упрощения при решении задачи, причем их много именно относительно электромагнитного воздействия (см., например, [21]).

Важный комплекс явлений, которые целесообразно учитывать, – паразитные эффекты. В одноэлектронных приборных структурах к ним, в частности, можно отнести: связанные с термическими флуктуациями (термически активированное туннелирование и др.); со-туннелирование; определяемые переменной по площади толщиной барьеров; туннелирование с участием фотонов; пропущенные туннельные события; резонансное туннелирование с участием локализованных состояний; прыжковый перенос с участием ловушек; вызванные фоновыми зарядами, примесями и их движением; саморазогрев и др. Эти эффекты могут оказывать влияние на работу приборов. Ряд из них особенно важен в области кулоновской блокады, так как в соответствии с ортодоксальной теорией ток в ней не должен проходить, что противоречит известным экспериментальным данным, хотя он и чрезвычайно мал.

Одним из наиболее существенных в области кулоновской блокады с уменьшением температуры становится квантовый

макроскопический эффект со-туннелирования. Он может оказывать весьма сильное негативное влияние на работу самых разнообразных приборов и устройств одноэлектроники [21,25,47]. Впервые в рассматриваемых приборных структурах он был теоретически предсказан в работах [48,49] и подтвержден экспериментально в [50]. Отличный обзор ранних работ в этом направлении дан в книге [21]. Различаются два возможных процесса со-туннелирования: упругий и неупругий. Скорость первого когерентного типа со-туннелирования, как правило, ниже, чем второго. Скорость этих процессов может быть также найдена с использованием "золотого правила" с применением теории возмущений в методе туннельного гамильтониана, но уже для переходов более высокого порядка. Относительно простые выражения получаются для скоростей и токов структуры с двумя туннельными переходами с использованием ряда физических предположений как для $T = 0K$, так и для $T \neq 0K$ [21]. Выражения для скорости N -го порядка неупругого со-туннелирования для цепочек туннельных переходов гораздо более сложны и могут быть приближенно вычислены в ряде простых случаев при очень малых прикладываемых смещениях. Оценки показывают, что скорость неупругого со-туннелирования быстро падает с ростом N [21]. Вклад процесса упругого со-туннелирования может быть важен при очень малых напряжениях и температурах, когда влияние неупругого со-туннелирования уменьшается. Дополнительная сложность учета упругого процесса заключается в том, что его скорость зависит от геометрии переходов [21].

Более строгие оценки для токов многоостровковых цепочек, как уже отмечалось, могут быть получены путем решения системы основных уравнений (11). Заметим, что в настоящее время имеются определенные отличия теории с результатами эксперимента, которые не совсем ясны [21]. С точки зрения автора основные причины, по-видимому, две, а именно: 1) не учитываются другие паразитные эффекты; 2) сделанные

приближения при расчете влияния со-туннелирования. К счастью, с увеличением количества островков роль со-туннелирования существенно ослабляется. В любом случае, однако, *разработка адекватных и экономичных методов расчета влияния со-туннелирования на электрические характеристики является актуальной задачей моделирования приборов одноэлектроники.*

В ряде работ [51 – 54] было оценено влияние и некоторых других паразитных эффектов на флуктуации ВАХ. Как правило, они рассматриваются по отдельности, т.е. нет, к сожалению, оценок их взаимного влияния. К этим эффектам можно отнести обусловленные следующими причинами: рассеянием носителей заряда на случайном потенциале примесей, расположенных в приконтактной области; переменной толщиной туннельных барьеров; резонансным туннелированием через локализованные в слое изолятора электронные состояния; флуктуациями плотности состояний в электродах; квантовыми интерференционными эффектами рассеяния носителей в обоих электродах. При этих оценках используются упрощенные модели формализмов волновых функций и функций Грина. Поэтому весьма сложно оценить в каждом конкретном случае важность данных эффектов. *Необходимы более строгие модели одноэлектронных приборных структур, учитывающие и эти паразитные эффекты.*

Определенные корректировки ортодоксальной теории нужны при учете саморазогрева, который в соответствии с проведенными оценками может быть важен в одноэлектронных структурах при очень низких температурах [55 – 57]. Хотя рассеиваемая мощность в приборе чрезвычайно мала, саморазогрев все же бывает ощутимым вследствие очень малых размеров структуры. В этом случае необходимо модифицировать выражения для скорости туннелирования, а основное уравнение должно быть дополнено уравнениями

теплового баланса. В результате решается более сложная самосогласованная задача. Серьезные и объективные затруднения, однако, возникают с описанием мощности выделяемого тепла вследствие недостаточности в рассматриваемом случае экспериментальной информации. Учет эффекта саморазогрева наряду с шумами, как показывают оценки [57], может быть важным при оптимизации размеров островков одноэлектронных приборов.

Решения основного уравнения могут непосредственно использоваться и для определения различных характеристик тепловых и дробовых шумов (см., например, [58]), вызванных случайностью туннельных событий. При этом удобнее перейти к другому (частотному) представлению основного уравнения [59]. Расчет этих характеристик, например, чрезвычайно важен для оптимизации чувствительности одноэлектронных транзисторов [59]. Он может осуществляться и с помощью метода Монте-Карло, который, однако, требует гораздо больших затрат вычислительных ресурсов ЭВМ для достижения аналогичной точности [59]. И несмотря на это, данный метод – пока единственное средство для вычисления шумовых характеристик сложных одноэлектронных приборных структур, в частности с большим количеством островков.

Наряду с отмеченными (классическими) шумами источником других шумов могут быть некоторые из рассмотренных ранее паразитных эффектов. Оригинальная модель, позволяющая учитывать не только классические, но и квантовые шумы была предложена в [60]. В ней осуществлено обобщение основного уравнения путем добавки в него ланжевеновской случайной составляющей. Отметим, что *разработка экономичных методов расчета шумовых характеристик одноэлектронных приборных структур является актуальной задачей, так как они позволяют получить важнейшую дополнительную информацию о*

процессах, происходящих в данном типе нанозлектронных приборов.

С уменьшением размеров структур все более важным становится учет пространственного квантования. В работах [61,62] было получено кинетическое уравнение, которое позволяет описывать динамику туннелирования в цепочке с двумя туннельными переходами с учетом дискретности энергетического спектра островка. При не очень малых ширинах туннельных переходов (более 1 – 2 нм) и при не очень больших скоростях туннелирования справедливо достаточно простое кинетическое уравнение, подобное основному, но с другой энергетической зависимостью скорости туннелирования с/на определенный квантовый уровень. В результате, однако, решение обобщенного основного уравнения становится более сложным. Оценки показывают [61,62], что в большинстве случаев для металлических островков (для экспериментально достижимых численных значений параметров) вполне достаточно использовать основное уравнение ортодоксальной теории, т.е. не учитывать дискретность спектра электродов. Это и подтверждает отмеченное ранее удовлетворительное качество согласования расчетов с экспериментом.

В то же время последние экспериментальные исследования показывают, что при малых размерах островков (единиц нанометров) металлических приборных структур, предназначенных для функционирования при комнатных температурах, влияние пространственного квантования, по-видимому, может быть все же важным. Более того, в этих случаях на ВАХ могут дополнительно наблюдаться области отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП) (см., например [63]). Анализ, однако, доказывает, что здесь возможно влияние большого набора других механизмов и факторов (не только пространственного квантования), в частности случайных фоновых зарядов и перекрестных взаимных емкостей (см.,

например [64]). Отметим, что последние вследствие сложности обычно не включаются в рассмотрение при использовании электрических моделей ортодоксальной теории (см. ранее). Это еще раз подчеркивает актуальность разработки физико-топологических моделей одноэлектронных приборных структур, более детально и естественным образом учитывающих конструктивно-технологические факторы. Здесь лишь заметим, что предложенные модели [7, 32 – 43] допускают модификацию на случай учета пространственного квантования [65], сотуннелирования [66] и ряда других эффектов.

Таким образом, *разработка моделей, учитывающих совместное влияние различных паразитных эффектов, является одной из наиболее актуальных задач моделирования приборных структур одноэлектроники.*

Остановимся на специфике моделирования *полупроводниковых одноэлектронных приборных структур*. Кроме кулоновской блокады в таких структурах на основе квантовых ям и точек могут наблюдаться и осцилляции проводимости, вызванные, как уже отмечалось, резонансным прохождением носителей заряда. В этом плане полупроводниковые структуры в большей мере квантовые приборы по сравнению с металлическими. По крайней мере, для приборов на квантовых ямах и точках часто важно пространственное квантование. В итоге, учет дискретности спектра в них может приводить к появлению области ОДП на ВАХ приборов [67]. В полупроводниковых структурах возможна и интересная комбинация одноэлектронного, резонансно-туннельного и других (!) эффектов (например, Кондо, высокочастотные эффекты, прыжковая проводимость, термоэлектронная эмиссия), включая переходы между ними [21,67 – 72]. Кроме того, в случае значительного различия в размерах квантовых точек становится доминирующей стохастическая природа транспорта вследствие рассогласования в расположении уровней пространственного

квантования в каждой из них, что приводит к термически активированному прыжковому механизму переноса или нерезонансному неупругому туннелированию [73]. Важными в полупроводниковых одноэлектронных структурах могут быть и два типа (упругое и неупругое) со-туннелирования [67]. Возникают также осцилляции тепловой мощности [67]. Таким образом, строго говоря, это зачастую гибридные приборные структуры нанoeлектроники, в которых нельзя выделить один доминирующий эффект, а остальные – паразитные (в отличие от металлических структур). Все это вносит дополнительные сложности при их моделировании по сравнению с металлическими одноэлектронными структурами. Важно отметить, что большинство элементов интегральных схем будущих поколений (гибридной нанoeлектроники и нанoeлектроники), по-видимому, все же будет функционировать на гамме разнообразных эффектов, т.е. будут, строго говоря, гибридными! Причем многое может зависеть от внешних факторов (прикладываемых смещений, температуры, магнитного поля и др.). Активные области полупроводниковых одноэлектронных приборов могут формироваться различным образом [5 – 7,21,67], например, в инверсионном слое или гетероструктуре, квантовых проволоках. Мягко говоря, это также не способствует упрощению моделей.

Модели полупроводниковых одноэлектронных структур, включающих одну квантовую яму или точку, были построены в работах [21,68 –71]. В случае, когда квантовая точка формируется, например, в 2D электронном газе, задача моделирования одноэлектронной структуры становится достаточно сложной не только потому, что возможно сосуществование эффектов одноэлектронного, резонансного туннелирования и других, но и вследствие изменения формы и размера квантовой точки в зависимости от прикладываемых к структуре смещений. В результате использование модифицированных основных уравнений может быть

недостаточно, и необходимо решать достаточно сложные самосогласованные задачи по потенциалу и заряду.

Самосогласованная задача в ряде случаев должна решаться и при расчете энергетических уровней, например при учете влияния магнитного поля. При этом может понадобиться учитывать обменные и корреляционные эффекты [67]. Заметим, что пространственное квантование, вообще говоря, зависит от зарядовых эффектов не обязательно в присутствии магнитного поля.

В связи с изложенным необходимы достаточно сложные самосогласованные трехмерные модели, по крайней мере для одноэлектронных структур на основе квантовых точек. В настоящее время они разработаны только лишь для простейших наноструктур, включающих, как правило, одну или две квантовые точки, причем для расчета проводимости, если он осуществляется, используется формула Ландауэра [74]. В таких моделях обычно применяется формализм волновых функций. Полезной при этом является и теория функционала плотности. И в то же время, несмотря на возникающие существенные сложности разработки, такие модели важны. Так, самосогласованная модель позволила выявить в деталях сильное влияние на такой параметр, характеризующий транспортные явления, как время туннелирования, размера и формы квантовых точек [75].

Иногда хорошие положительные результаты дают и более простые по сравнению с отмеченными выше модели. Так, оценки распределения заряда по структуре полупроводниковых одноэлектронных приборов могут быть получены и с помощью различных приближений с применением уравнения Пуассона в пренебрежении проходящими токами и в предположении справедливости статистики Больцмана [76] (возможно использование и статистики Ферми – Дирака). На их основе вычисляются скорректированные значения свободной энергии

системы. В дальнейшем применяется основное уравнение. Для указанной оценки могут использоваться, вообще говоря, и уравнения диффузионно-дрейфовой модели [18].

В рамках формализма волновых функций с помощью метода гамильтониана переноса Бардина (Bardeen transfer Hamiltonian) в сочетании с аппроксимациями для потенциала могут быть получены оценки по ВАХ одноэлектронных структур с кремниевой квантовой точкой [77].

Полезным в некоторых случаях может оказаться и применение формализма функций Грина (см., например, [71]). С помощью этих функций можно учесть влияние плотности состояний, флуктуаций химического потенциала в электродах [78].

Кинетическое уравнение, аналогичное основному уравнению, для приведенной матрицы плотности, описывающее влияние процессов последовательного туннелирования вместе с сотуннелированием и резонансного туннелирования для одноэлектронного транзистора с квантовой точкой, может быть получено с помощью диаграммной техники [79].

В ряде случаев ортодоксальная теория распространяется и на цепочки туннельных переходов (сверхрешетки с малым поперечным сечением) [80], а также структуры с асимметричными туннельными переходами [81]. Возможно ее использование и для оценок влияния механизма ошибок (сбоев) в одноэлектронных приборных структурах [82]. Для детального анализа необходимо более полно учитывать влияние геометрических параметров, что, как уже отмечалось ранее, сложно осуществить в рамках ортодоксальной теории. Определенные модификации могут потребоваться и при описании приборных структур с многими выводами (каналами), шумовых характеристик [83], а также учета влияния окружения [84] при использовании подхода на базе основного уравнения. В то же время при анализе элемента памяти при моделировании входящей в него нанокристаллической

одноэлектронной структуры с большим числом 10×10 квантовых точек использовался метод Монте-Карло с обычными предположениями ортодоксальной теории [85]. При этом пространственное квантование в квантовых точках не учитывается, а основная модификация связана с расчетом сопротивления туннельных переходов [85].

Проведенный анализ показывает, что *актуальной задачей является разработка многомерных самосогласованных моделей, в которых учитываются многочастичные эффекты в квантовых точках или ямах при переносе через полупроводниковые одноэлектронные приборные структуры. Большая работа предстоит и по улучшению количественного согласования моделей с экспериментальными данными по электрическим характеристикам приборов.*

Принципиально важно подчеркнуть, что наноструктуры с одной ("искусственные атомы"; англ. "artificial atoms") или многими ("искусственные молекулы"; англ. "artificial molecules") квантовыми точками представляют, несмотря на отмеченные сложности моделирования, существенный практический интерес. Так, продемонстрирована работоспособность различных кремниевых МДП – элементов, включающих такие наноструктуры и которые могут функционировать при комнатной температуре. При этом предлагаемые технологические процессы часто хорошо совместимы с уже отработанными технологическими процессами производства МОП и КНИ СБИС и УБИС*. Прогресс в этом направлении продолжается [86].

Основные преимущества полупроводниковых одноэлектронных приборных структур по сравнению с металлическими заключается в следующем [82]: 1) для них характерна меньшая емкость, например, для кремниевых приборов обычно приблизительно в десять (и больше) раз; в результате

* См. также главу 8.

увеличивается максимальное быстродействие приборных структур; 2) возможно параллельное объединение большого количества структур. Главная при этом сложность [82] – длительный дрейф фонового заряда. Другая серьезная проблема – плохая воспроизводимость энергетических спектров квантовых точек, которые для функционирования приборов при комнатной температуре должны иметь размер около 1 нм [25]. По крайней мере, традиционно считается, что для этого размеры квантовых точек должны быть менее 10 нм.

Заметим, что серьезные вопросы возникают по определению емкости таких малых нанобъемов [87]. В первую очередь это связано с тем, что емкость, строго говоря, – макроскопическое понятие. Коррективы могут быть необходимыми и для диэлектрической проницаемости в наноразмерной области [87]. В связи с изложенным *более детальный учет электрофизических характеристик непосредственно наноструктур, а не объемных материалов, как обычно делается, является актуальным при моделировании полупроводниковых одноэлектронных приборных структур, включающих квантовые точки и ямы.*

"Принципиальный недостаток фактически для всех технологических методов, связанных с квантовыми точками, определяется тем, что точки не могут размещаться точно, их размер и форма не могут точно контролироваться, а также с тем, что их электростатическое окружение не может формироваться с достаточной равномерностью ... это приводит к флуктуациям порогового напряжения и максимального тока, а следовательно, идентичные приборы, требуемые в промышленности, не могут быть изготовлены" [77]. Другая важная "точка зрения состоит в том, что квантовые ямы более пригодны для включения в ИС, чем квантовые точки, так как контакты для квантовых ям – планарные, в то время как для квантовых точек необходимы квантовые проволоки" [87].

И тем не менее, автор не столь пессимистически настроен относительно будущего квантовых точек в полупроводниковых одноэлектронных приборных структурах. По крайней мере, исследования элементов, включающих нанокристаллический кремний, вселяют в этом плане определенную надежду. Достаточно отметить лишь пионерские экспериментальные разработки специалистов фирмы "Хитачи" ИС памяти на 64 бит и 128 Мбит, сообщения о которых были впервые сделаны на международных конференциях 1996 – 1998 годов и включающих такие элементы (см. обзор [88]). Поэтому актуальны и важны исследования физики процессов, протекающих в рассмотренных структурах на основе моделей повышенной адекватности.

К *диэлектрическим одноэлектронным цепочкам* туннельных переходов, по-видимому, можно отнести структуры, включающие точки аморфного углерода "с относительно плохой проводимостью" [89]. Важное их преимущество – "подавление тока утечки через прибор" [89]. Этот ток является, в частности, главной проблемой перспективных одноэлектронных элементов на основе нанокристаллического кремния.

Остановимся кратко на *металлических матрицах туннельных переходов*, т.е. в соответствии с приведенной выше классификацией на 2D приборных структурах одноэлектроники. Заметим, что исследования матриц, к сожалению, немногочисленны ввиду еще более высокой степени сложности их моделирования по сравнению с цепочками. 2D структуры обладают важными преимуществами по сравнению с рассмотренными одноэлектронными 1D структурами, в частности, проще, как правило, технология изготовления, намного больше выходной ток. В 2D приборных структурах возможны и новые коллективные эффекты.

Первоначально экспериментально исследовались 2D туннельные переходы, как правило, на основе алюминия (иногда

использовался ниобий) с большим количеством переходов (60×100 [90]) в нормальном состоянии при низких температурах (сверхпроводимость устранялась с помощью магнитного поля). При этом при согласовании теоретических расчетов (даже для простейших 1D структур) с экспериментом в качестве подгоночных параметров использовались емкости, причем отличие с оцененными из геометрии структур достигало 2,5 раза (в том числе и для 2D структур [90]). Паразитные емкости при этом не учитывались.

Хотя теоретический анализ 2D структур в принципе возможен на базе основного уравнения, вследствие большого количества туннельных переходов обычно их моделирование осуществляется с использованием метода Монте-Карло. При этом традиционно одинаковыми считаются собственные емкости островков, а также емкости и сопротивления для всех переходов [21,91 – 93]. Взаимные емкости между не соседними островками обычно не учитываются [21,92,93]. В то же время важное влияние на пороговое напряжение 1D и 2D структур могут оказывать, например, случайные фоновые заряды на островках [94]. Более полные по сравнению с [94] исследования влияния случайных фоновых зарядов на островках, потребовавшие применения суперЭВМ, были проведены в рамках ортодоксальной теории в работе [95].

В электрических моделях 1D и 2D одноэлектронных приборных структур могут вводиться грубые модельные зависимости для оценок сопротивления и емкости туннельного перехода от некоторых параметров материалов и геометрических размеров структур [96,97]. Однако отличия вычисленных таким образом оценок от идентифицированных путем согласования с экспериментальными данными по электрическим характеристикам могут быть значительными и достигать порядок по величине и более [97]. В то же время разброс (неодинаковость) величин сопротивлений (в большей степени) и

емкостей (в меньшей степени) туннельных переходов в 2D структурах может оказывать существенное влияние на их электрические характеристики, в особенности с ростом температуры [96]. При моделировании не учитывались со-туннелирование и термоэлектронная эмиссия [96].

В связи с изложенным выше для детального исследования влияния конструктивно-технологических и электрофизических параметров на электрические характеристики 2D одноэлектронных приборных структур необходимы физико-топологические модели, разработка которых проводится [42] на основе описанного ранее предложенного подхода.

Весьма неплохие результаты при вычислении проводимости металлического одноэлектронного транзистора на основе матрицы туннельных переходов 2×2 были получены в работе [98] с использованием интегралов по путям в сочетании с квантовым методом Монте-Карло при сравнении с экспериментальными данными. Проблемы возникали лишь при низких температурах и малых проводимостях вследствие медленной сходимости метода. В работе [99] было предложено использовать диаграммную технику для получения модифицированных (относительно основного) уравнений с целью учета со-туннелирования в матрицах металлических туннельных переходов. Этот интересный подход, к сожалению, практически неприменим для матриц с количеством островков более 7 [99] вследствие необходимости рассмотрения огромного количества состояний.

В целом, исследования и разработка моделей повышенной адекватности одноэлектронных металлических матриц туннельных переходов является актуальной задачей.

С применением ортодоксальной теории возможен анализ ряда других элементов и разнообразных схем, включая нейронные, одноэлектроники (см., например, [21,25,47,100]). Таким образом, несмотря на важность разработки физико-топологических

моделей, ортодоксальная теория, основанная на электрических моделях, является реальным инструментом для моделирования, анализа и проектирования самых разнообразных и достаточно сложных приборов и схем одноэлектроники.

Завершая рассмотрение моделей, необходимо сделать несколько замечаний о моделях других формализмов. Здесь, вообще говоря, можно использовать те же формализмы, что и описанные для резонансно-туннельных структур [11]. Современное развитие моделей приборов одноэлектроники подтверждает это утверждение. Другие формализмы нашли, в частности, применение при описании паразитных эффектов в относительно простых моделях. Более строгие модели различных формализмов начали развиваться недавно, в особенности при описании шумов (см. ранее). Очевидно, что тут необходимо время.

Как уже отмечалось, в реальном приборе присутствуют и другие механизмы транспорта, поэтому *разработка моделей повышенной адекватности на основе общих формализмов [10], т.е. не в рамках ортодоксальной теории, целесообразна.*

Говоря о важности моделирования и автоматизированного проектирования, приведем следующее высказывание Д.В. Аверина и К.К. Лихарева [21]: "... машинный анализ и проектирование, возможно, станут самой крупной проблемой прикладной одноэлектроники".

6.5. Перспективы одноэлектроники

Уместно кратко остановиться на других важных для практики проблемах рассматриваемой области, а именно [21,25,47,100]:

1) фоновых зарядах; 2) низкой температуре функционирования; 3) невысоком быстродействии; 4) шумах. Что касается температуры функционирования, то вопрос рассматривался ранее. Здесь выход, во всяком случае, виден – уменьшение

размеров островков, хотя это и не просто, и увеличение их количества. Невысокое быстродействие не так важно в схемах памяти. Ярким примером является человеческий мозг с относительно не большим быстродействием функционирования нейронов.

Достаточно серьезной проблемой является фоновый заряд. В литературе рассматривается ряд методов и способов ее смягчения или разрешения [25,47,100]: при малых островках вследствие внутренних электростатических сил может происходить "самоочищение" островков; при "замораживании" распределения примесей при малых температурах; при использовании различных компенсирующих процедур; путем введения дополнительных затворов; использование менее чувствительных к влиянию фоновых зарядов многоостровковых структур. Интересный вариант решения проблемы – использование динамических режимов работы одноэлектронных приборных структур, когда фаза сигнала не важна [25,47,100]. Необходимо также заметить, что нулевой фоновый заряд не всегда оптимален. Многое может зависеть от параметров схемы и рабочей температуры.

Отмеченные методы и способы, конечно же, важны, однако, заметим следующее. Установленные принципы функционирования человеческого мозга показывают, что в нем информация полностью не уничтожается. Запись новой информации, как правило, происходит на фоне старой. Поэтому, судя по всему, разработка высокоинтегрированных одноэлектронных систем также должна осуществляться с учетом возможности неконтролируемого фонового заряда. Определенные успехи в этом направлении уже достигнуты [25,47,100]. Среди указанных методов и способов автору наиболее интересным кажется использование динамических режимов работы одноэлектронных приборных структур, когда фаза сигнала не важна.

По изложенным причинам и вследствие гипотезы "вероятностно-статистической организации мозга" [101], по-видимому, в будущих информационных сверхинтегрированных системах одноэлектроники (и наноэлектроники в целом) целесообразно отходить от традиционных принципов детерминизма организации архитектур ИС микроэлектроники и переходить к новым статистическим и статистически-детерминированным принципам. Именно с этих позиций необходимо и подбирать активные элементы для таких новых наноэлектронных систем.

В то же время шумы, скорее всего, будут являться одной из наиболее серьезных проблем. В настоящее время становится достаточно очевидным, что разработка принципов построения все более сложных информационных систем в области одноэлектроники (и наноэлектроники) должна проводиться с учетом влияния шумов, как важнейшего, а не второстепенного фактора. Главные причины, вызывающие основные виды шумов в одноэлектронных приборных структурах, уже указывались. Кроме того, к ним можно отнести постоянно упоминаемые ранее и связанные с чрезвычайно высокой чувствительностью наноэлектронных приборов к влиянию других воздействий.

В связи с этим трудно не согласиться с аргументацией А.Н. Короткова [47] о том, что для повышения надежности работы элементов, например памяти, необходимо использовать для запоминания информации несколько (более одного) электронов, контролировать наличие которых легче. Так, "утечка" одного электрона вследствие паразитных эффектов в этом случае не приведет к полной потере информации. Оптимальное количество запоминаемых электронов на ячейку памяти по мнению А.Н. Короткова от 5 до 20 (аналогичные цифры приводятся и другими авторами: 5;10), но даже в этом случае электроны должны контролироваться по одному. Автор

близок к этой точке зрения, однако, конкретные цифры, очевидно, будут зависеть от множества факторов, которые на настоящий момент времени, возможно, даже трудно предсказать.

Уместно также обратить внимание на очень большое "количество" теории и, как следствие, оценок в одноэлектронике, начиная от достаточно грубых пессимистических [102] до более оптимистических [7,103] и менее грубых [25,47,100], но все же оценок! Согласитесь, что между 1 нм и 3 – 5 нм есть разница. В особенности когда речь идет о размерах островков приборов, которые должны функционировать при комнатной температуре. Думаю, что нас могут ожидать сюрпризы, и не обязательно неприятные. Вполне допустимо, что гамма неучтенных эффектов, о которых упоминалось (и других), в некоторых случаях может привести к улучшению свойств одноэлектронных приборных структур (компенсация отрицательных эффектов). Почему бы и нет! Подобным примером может служить влияние ширины канала на пороговое напряжение МОП-транзисторов с узким каналом (эффекты, связанные с малыми размерами) [19]. В связи с изложенным, нельзя смотреть пессимистически на возможность создания сверхинтегрированных информационных систем типа человеческого мозга (органика), но на твердом теле. Будем оптимистами! Тем более, что последние экспериментальные результаты [104] вселяют определенную уверенность в этом.

В заключение приведем следующее высказывание 1996 года, отличающееся своей логичностью, а именно [105]: "... потребляемая мощность кристалла должна сохраняться на уровне нескольких ватт. Так как он определяется общим числом активных электронов в кристалле, то увеличение степени интеграции достигается путем уменьшения числа активных электронов на транзистор. В следующем веке мы можем

ожидать десять тысяч миллионов транзисторов на кристалле*, но если это будет достигнуто, то число активных электронов на транзистор должно быть сокращено до менее 10, если избыточное нагревание исключается. Однако когда число электронов уменьшается до этого уровня, флуктуации в числе электронов становятся относительно большими и функциональные свойства будут ухудшены. В результате необходимо контролировать отдельные электроны точно в отличие от сегодняшней практики работы с усредненным поведением электронов. Один из наиболее обещающих методов контролирования отдельных электронов – одноэлектронные зарядовые эффекты в наноструктурах, которые должны привести к одноэлектронным приборам". Таким образом, очевидное и главное преимущество одноэлектронных приборных структур – существенное снижение энергопотребления, а это очень серьезно!

Список литературы к главе 6

1. Аверин Д.В., Лихарев К.К. Когерентные колебания в туннельных переходах малых размеров // ЖЭТФ. 1986. Т. 90, вып. 2. С. 733 – 743.
2. Лихарев К.К. О возможности создания аналоговых и цифровых интегральных схем на основе эффекта дискретного одноэлектронного туннелирования // Микроэлектроника. 1987. Т. 16, вып. 3. С. 195 – 209.
3. Кузьмин Л.С., Лихарев К.К. Непосредственное экспериментальное наблюдение дискретного коррелированного одноэлектронного туннелирования // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45, вып. 8. С. 389 – 390.

* 10⁹ достигнуто в 2006 году.

4. Fulton T.A., Dolan G.J. Observation of single-electron charging effects in small tunnel junctions // *Phys. Rev. Letters*. 1987. V. 59, N 1. P. 109 – 112
5. Абрамов И.И., Новик Е.Г. Классификация одноэлектронных структур // *Изв. Белорусской инженерной академии*. 1998. № 2(6)/2. С. 4 – 8.
6. Абрамов И.И., Новик Е.Г. Классификация приборных структур одноэлектроники // *ФТП*. 1999. Т. 33, вып. 11. С. 1388 – 1394.
7. Абрамов И.И., Новик Е.Г. Численное моделирование металлических одноэлектронных транзисторов. Минск: Бестпринт, 2000. 164 с.
8. Likharev K.K. Single-electron transistors: electrostatic analog of the dc SQUIDs // *IEEE Trans*. 1987. V. MAG-23, N 2. P. 1142 – 1145.
9. Miura N., Yoshikawa N., Sugahara M. Coulomb blockade and electrical field effects in nanoscale granular microbridges // *Appl. Phys. Lett*. 1995. V. 67, N 26. P. 3969 – 3971.
10. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанозлектроники. IV. Квантовомеханические формализмы // *Нано- и микросистемная техника*. 2007. № 2. С. 24 – 32.
11. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанозлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры // *Нано- и микросистемная техника*. 2007. № 3. С. 57 – 70.
12. Averin D.V., Likharev K.K. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions // *J. of Low Temp. Phys*. 1986. V. 62, N 3/4. P. 345 – 373.

13. Аверин Д.В. Влияние температуры на одноэлектронные и блоховские колебания в туннельных переходах // ФНТ. 1987. Т. 13, № 4. С. 364 – 373.
14. Cohen M.H., Falicov L.M., Phillips J.C. Superconductive tunneling // Phys. Rev. Lett. 1962. V. 8, N 8. P. 316 – 318.
15. Кулик И.О., Шехтер Р.И. Кинетические явления и эффекты дискретности заряда в гранулированных средах // ЖЭТФ. 1975. Т. 68, вып. 2. С. 623 – 640.
16. Likharev K.K. Correlated discrete transfer of single electrons in ultrasmall tunnel junctions // IBM J. Res. Develop. 1988. V. 32, N 1. P. 144 – 158.
17. Аверин Д.В., Зорин А.Б., Лихарев К.К. Блоховские осцилляции в джозефсоновских переходах малых размеров // ЖЭТФ. 1985. Т. 88, вып. 2. С. 692 – 703.
18. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26 – 36.
19. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва – Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
20. Amman M., Mullen K., Ben-Jacob E. The charge-effect transistor // J. Appl. Phys. 1989. V.65, N 1. P. 339 – 346.
21. Single charge tunneling: Coulomb blockade phenomena in nanostructures / Ed. by H. Grabert, M.H. Devoret. New York, London: Plenum Press, 1992. NATO ASI Ser B, V. 294. 336 p.
22. Miller T.G., Reifenberger R. Three-tunnel-capacitor model for single-electron tunneling in layered thin film // Phys. Rev. B. 1994. V. 50, N 5. P. 3342 – 3349.
23. Low temperature scanning tunneling microscopy studies of granular metal films / E. Bar-Sadeh, Y. Goldstein, M. Wolovelsky,

D. Porath, C. Zhang, H. Deng, B. Abeles, O. Millo // *J. Vac. Sci. Technol. B*. 1995. V. 13, N 3. P. 1084 – 1088.

24. Coulomb staircase in STM current through granular films / H. Imamura, J. Chiba, S. Mitani, K. Takanashi, S. Takahashi, S. Maekawa, H. Fujimori // *Phys. Rev. B*. 2000. V. 61, N 1. P. 46 – 49.

25. Likharev K.K. Single-electron devices and their applications // *Proc. IEEE*. 1999. V. 87, N4. P. 606 – 632.

26. Одноэлектронные солитоны в одномерных туннельных структурах / Н.С. Бахвалов, Г.С. Казача, К.К. Лихарев, С.И. Сердюкова // *ЖЭТФ*. 1989. Т. 95, вып. 3. С. 1010 – 1021.

27. Korotkov A.N. Analytical calculation of single-electron oscillations in one-dimensional arrays of tunnel junctions // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50, N 23. P. 17674 – 17677.

28. Chen R.H., Likharev K.K. Multiple-junction single-electron transistors for digital applications // *Appl. Phys. Lett.* 1998. V. 72, N 1. P. 61 – 63.

29. A numerical study of the dynamics and statistics of single electron systems / L.R.C. Fonseca, A.N. Korotkov, K.K. Likharev, A.A. Odintsov // *J. Appl. Phys.* 1995. V.78, N 5. P. 3238 – 3251.

30. Fonseca L.R.C., Korotkov A.N., Likharev K.K. A numerical study of the accuracy of single-electron current standards // *J. Appl. Phys.* 1996. V.79, N 12. P. 9155 – 9165.

31. Single-electron traps: A quantitative comparison of theory and experiment / K.A. Matsuoka, K.K. Likharev, P. Dresselhaus, L. Ji, S.Han, J.Lukens // *J. Appl. Phys.* 1997. V.81, N 5. P. 2269 – 2281.

32. Абрамов И.И., Новик Е.Г. Модель одноэлектронного транзистора, основанная на численном решении уравнения Пуассона // *Письма в ЖТФ*. 2000. Т. 26, вып. 16. С. 63 – 67.

33. Абрамов И.И., Новик Е.Г. Двумерная численная модель одноэлектронного транзистора // *Микроэлектроника*. 2000. Т. 29, вып. 3. С. 197 – 201.

34. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Новик Е.Г. Численное моделирование одноэлектронных транзисторов // Изв. вузов. Электроника. 2000. № 2. С. 87 – 94.
35. Абрамов И.И., Новик Е.Г. Характеристики металлических одноэлектронных транзисторов на различных материалах // ФТП. 2000. Т. 34, вып. 8. С. 1014 – 1019.
36. Абрамов И.И., Новик Е.Г. Учет фонового заряда на "островке" при моделировании одноэлектронных транзисторов // ФТП. 2001. Т.35, вып. 4. С. 489 – 491.
37. Абрамов И.И., Игнатенко С.А., Новик Е.Г. Влияние параметров конструкции и материалов на вольт-амперные характеристики двухостровковых одноэлектронных цепочек // ФТП. 2002. Т.36, вып. 10. С. 1272 – 1277.
38. Абрамов И.И., Игнатенко С.А., Новик Е.Г. Моделирование двухостровковых одноэлектронных структур // Микросистемная техника. 2002. № 5. С. 30 – 33.
39. Абрамов И.И., Игнатенко С.А., Новик Е.Г. Модель многоостровковых одноэлектронных цепочек на основе метода Монте-Карло // ФТП. 2003. Т.37, вып. 5. С. 583 – 587.
40. Абрамов И.И., Игнатенко С.А., Новик Е.Г. Характеристики многоостровковых одноэлектронных цепочек в зависимости от различных факторов // ФТП. 2003. Т.37, вып. 10. С. 1231 – 1234.
41. Abramov I.I., Ignatenko S.A. Analysis of the metal single-electron arrays based on different materials // Proc. of SPIE. 2004. V. 5401. P. 432 – 441.
42. Абрамов И.И., Игнатенко С.А. Физико-топологическая модель одноэлектронных матриц туннельных переходов // Материалы 13-й Международной Крымской конференции "СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии", 2003 г. Севастополь. С. 530 – 531.

43. Абрамов И.И., Игнатенко С.А., Новик Е.Г. Моделирование сток-затворных характеристик одноэлектронных транзисторов // Микросистемная техника. 2003. № 5. С. 18 – 20.
44. Назаров Ю.В. О кулоновской блокаде туннелирования в одиночных контактах // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 49, вып. 2. С. 105 – 107.
45. Назаров Ю.В. Об аномалиях вольт-амперной характеристики туннельных контактов // ЖЭТФ. 1989. Т. 95, вып. 3. С. 975 – 984.
46. Nazarov Yu.V. Electron tunneling in a variable electrodynamic environment // Solid State Commun. 1990. V. 75, N 8. P. 669 – 672.
47. Korotkov A.N. Single-electron logic and memory devices // Int. J. Electronics. 1999. V. 86, N5. P. 511 – 547.
48. Averin D.V., Odintsov A.A. Macroscopic quantum tunneling of the electric charge in small tunnel junctions // Phys. Lett. A. 1989. V. 140, N 5. P. 251 – 257.
49. Аверин Д.В., Одинцов А.А. Квантовый распад состояний кулоновской блокады в туннельных переходах с малой емкостью в их системах // ЖЭТФ. 1989. Т. 96, вып. 4. С. 1349 – 1361.
50. Geerligs L.J., Averin D.V., Mooij J.E. Observation of macroscopic quantum tunneling through the Coulomb energy barrier // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65, N 24. P. 3037 – 3040.
51. Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е. Мезоскопические флуктуации вольт-амперной характеристики // ЖЭТФ. 1986. Т. 91, вып. 5. С. 1815 – 1819.
52. Ларкин А.И., Матвеев К.А. Вольт-амперная характеристика мезоскопических полупроводниковых контактов // ЖЭТФ. 1987. Т. 93, вып. 3. С. 1030 – 1038.
53. Альтшулер Б.Л., Спивак Б.З. Влияние магнитного поля на динамику примесей в металлических системах // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 49, вып. 12. С. 671 – 674.

54. Назаров Ю.В. Воспроизводимые флуктуации вольт-амперной характеристики туннельного контакта // ЖЭТФ. 1990. Т. 98, вып. 1. С. 306 – 315.
55. Kautz R.L., Zimmerli G., Martinis J.M. Self-heating in the Coulomb-blockade electrometer // J. Appl. Phys. 1993. V. 73, N 5. P. 2386 – 2396.
56. Korotkov A.N., Samuelson M.R., Vasenko S.A. Effect of overheating in a single-electron transistor // J. Appl. Phys. 1994. V. 76, N 6. P. 3623 – 3631.
57. Optimization of island size in single electron tunneling devices: Experiment and theory / S.M. Verbrugh, M.L. Benhamadi, E.H. Visscher, J.E. Mooij // J. Appl. Phys. 1995. V. 78, N 4. P. 2830 – 2836.
58. Zero-frequency current noise for the double-tunnel-junction Coulomb blockade / S. Hershfield, J.H. Davies, P. Hyldegaard, C.J. Stanton, J.W. Wilkins // Phys. Rev. B. 1993. V. 47, N 4. P. 1967 – 1979.
59. Korotkov A.N. Intrinsic noise of the single-electron transistor // Phys. Rev. B. 1994. V. 49, N 15. P. 10381 – 10392.
60. Korotkov A.N. Langevin approach for the shot noise calculation in single-electron tunneling // Europhys. Lett. 1998. V. 43, N 3. P. 343 – 348.
61. Аверин Д.В., Коротков А.Н. Влияние дискретности энергетического спектра на коррелированное одноэлектронное туннелирование через мезоскопически малую металлическую гранулу // ЖЭТФ. 1990. Т. 97, вып. 5. С. 1661 – 1673.
62. Averin D.V., Korotkov A.N. Correlated single-electron tunneling via mesoscopic metal particles: Effects of the energy quantization // J. of Low Temp. Phys. 1990. V. 80, N3/4. P. 173 – 185.
63. Effects of discrete energy levels on single-electron tunneling in coupled metal particles / B. Wang, K. Wang, W. Lu, H. Wang, Z. Li,

J. Yang, J.G. Hou // *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 82, N 21. P. 3767 – 3769.

64. Hung Nguyen V., Lien Nguyen V., Nam Nguyen H. Coulomb blockade and negative differential conductance in metallic double-dot devices // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 96, N 6. P. 3302 – 3306.

65. Абрамов И.И., Игнатенко С.А., Павленок С.Н. Влияние поперечных размеров на характеристики одноэлектронного транзистора // *Материалы 14-й Международной Крымской конференции "СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии"*. 2004 г. Севастополь. С.518 – 519.

66. Абрамов И.И., Игнатенко С.А., Павленок С.Н. Учет эффекта со-туннелирования в физико-топологической модели одноэлектронного транзистора // *Изв. Белорусской инженерной академии*. 2004. № 2(18)/2. С. 87 – 89.

67. Meirav U., Foxman E.B. Single-electron phenomena in semiconductors // *Semicond. Sci. Technol.* 1995. V. 10. P. 255 – 284.

68. Glazman L.I., Shekhter R.I. Coulomb oscillations of the conductance in a laterally confined heterostructure // *J. Phys.: Condens. Mater.* 1989. V. 1. P. 5811 – 5815.

69. Averin D.V., Korotkov A.N., Likharev K.K. Theory of single-electron charging of quantum wells and dots // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 44, N 12. P. 6199 – 6211.

70. Beenakker C.W.J. Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 44, N 4. P. 1646 – 1656.

71. Aleiner I.L., Brouwer P.W., Glazman L.I. Quantum effects in Coulomb blockade // *Phys. Reports.* 2002. V. 358, N 5-6. P. 309 – 440.

72. Coherence and Coulomb blockade in single-electron devices: A unified treatment of interaction effects / S. Florens, P.San José, F.

Guinea, A. Georges // Phys. Rev. B. 2003. V. 68, N 24. P. 245311-1 – 12.

73. Room temperature Coulomb blockade and low temperature hopping transport in a multiple-dot-channel metal-oxide-semiconductor field-effect-transistor / T. Hiramoto, H. Ishikuro, T. Fujii, G. Hashiguchi, T. Ikoma // Jpn. J. Appl. Phys. 1997. V. 36, part 1, N 6B. P. 4139 – 4142.

74. Jovanovic D., Leburton J.-P. Self-consistent analysis of single-electron charging effects in quantum-dot nanostructures // Phys. Rev. B. 1994. V. 49, N 11. P. 7474 – 7483.

75. Three-dimensional self-consistent simulation of the charging time response in silicon nanocrystal flash memories / J.S. de Sousa, A.V. Thean, J.P. Leburton, V.N. Freire // J. Appl. Phys. 2002. V. 92, N10. P. 6182 – 6187.

76. Fukui H., Fujishima M., Hoh K. Single-electron transistor in silicon-on-insulator with Schottky-contact tunnel barriers // Jpn. J. Appl. Phys. 1997. V. 36, part 1, N6B. P. 4147 – 4150.

77. Theory of a room-temperature silicon quantum dot device as a sensitive electrometer / J.K. Vincent, V. Narayan, H. Pettersson, M. Willander, K. Jeppson, L. Bengtsson // J. of Appl. Phys. 2004. V. 95, N1. P. 323 – 326.

78. Richardson W.H. Possibility of a single electron tunneling diode and a controllable saturated tunneling current // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71, N8. P.1113 – 1115.

79. Кёниг Ю., Шёллер Х., Шён Г. Резонансное туннелирование через одноэлектронный транзистор // УФН. 1998. Т. 168, № 2. С. 170 – 175.

80. Korotkov A.N., Averin D.V., Likharev K.K. Combined Bloch and single-electron-tunneling oscillations in one-dimensional arrays of small tunnel junctions // Phys. Rev. B. 1994. V. 43, N3. P. 1915 – 1918.

81. Single electron device with asymmetric tunnel barriers / Y. Matsumoto, T. Hanajiri, T. Toyabe, T. Sugano // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1996. V. 35, part 1, N2B. P. 1126 – 1131.
82. Error mechanisms and rates in tunable-barrier single-electron turnstiles and charge-coupled devices / N.M. Zimmerman, E. Hourdakis, Y. Ono, A. Fujiwara, Y. Takahashi // *J. of Appl. Phys.* 2004. V. 96, N9. P. 5254 – 5266.
83. Bagrets D.A., Nazarov Yu.V. Full counting statistics of charge transfer in Coulomb blockade systems // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 67, N8. P. 085316-1 – 16.
84. Oh J.H., Ahn D., Hwang S.W. Time-dependent currents of a single-electron transistor in dissipative environments // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68, N20. P. 205403-1 – 9.
85. Sim. J.S., Lee J.D., Park B.-G. The simulation of single-charging effects in the programming characteristics of nanocrystal memories // *Nanotechnology.* 2004. V. 15. P. 5603 – 5611.
86. International Technology Roadmap for Semiconductors: 1999 edition. Austin, TX: International SEMATECH, 1999; 2001 edition, 2002 update; 2003 edition, 2004 update; 2005 edition.
87. Tsu R. Challenges in nanoelectronics // *Nanotechnology.* 2001. V.12. P. 625 – 628.
88. Single-electron memory for giga-to-tera bit storage / K. Yano, T. Ishii, T. Sano, T. Mine, F. Murai, T. Hashimoto, T. Kobayashi, T. Kure, K. Seki // *Proc. IEEE.* 1999. V. 87, N4. P. 633 – 651.
89. Single-electron tunneling through amorphous carbon dots array / N. Miura, T. Numaguchi, A. Yamada, M. Konagai, J.-i. Shirakashi // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1997. V. 36, part 2, N12A. P. L1619 – L1621.
90. Influence of dissipation on the Coulomb blockade in small tunnel junctions / L.J. Geerligs, V.F. Anderregg, C.A. van der Jeugd, J. Romijn, J.E. Mooij // *Europhys. Lett.* 1989. V. 10, N1. P. 79 – 85.

91. Geigenmüller U., Schön G. Single-electron effects in arrays of normal tunnel junctions // *Europhys. Lett.* 1989. V. 10, N8. P. 765 – 770.
92. Single-electron solitons in 2-D arrays of ultrasmall tunnel junctions / N.S. Bakhvalov, G.S. Kazacha, K.K. Likharev, S.I. Serdyukova // *Physica B.* 1990. V. 165, 166. P. 963 – 964.
93. Statistics and dynamics of single-electron solitons in two-dimensional arrays of ultrasmall tunnel junctions // N.S. Bakhvalov, G.S. Kazacha, K.K. Likharev, S.I. Serdyukova // *Physica B.* 1991. V. 173. P. 319 – 328.
94. Middleton A.A., Wingreen N.S. Collective transport in arrays of small metallic dots // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 71, N19. P. 3198 – 3201.
95. Kaplan D.M., Sverdlov V.A., Likharev K.K. Coulomb gap, Coulomb blockade, and dynamic activation energy in frustrated single-electron arrays // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68, N4. P. 045321-1 – 6.
96. Leroy Y., Cordan A.S., Goltzené A. Variance analysis of the Coulomb blockade parameters in nanometer-size disordered arrays // *J. of Appl. Phys.* 2001. V. 90, N2. P. 953 – 957.
97. Electron transport in metallic dot arrays: Effect of a broad dispersion in the tunnel junction dimensions / A.S. Cordan, A. Goltzené, Y. Hervé, M. Mejias, C. Vieu, H. Launois // *J. of Appl. Phys.* 1998. V. 84, N7. P. 3756 – 3763.
98. Conductance of the single-electron transistor: A comparison of experimental data with Monte Carlo calculations / C. Wallisser, B. Limbach, P. vom Stein, R. Schäfer, C. Theis, G. Göppert, H. Grabert // *Phys Rev.* 2002. V. 66, N12. P. 125314-1 – 8.
99. Kubala B., Johansson G., König J. Transport in metallic multi-island Coulomb blockade systems: A systematic perturbative

expansion in the junction transparency // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73, N16. P. 165316-1 – 14.

100. Likharev K. Electronics below 10 nm // *Nano and giga challenges in microelectronics*, ed. by J. Greer, A. Korokin, and J. Labanowski. Amsterdam: Elsevier, 2003. P. 27 – 68.

101. Владимирский Б.М., Чораян О.Г. Нейрокибернетика в начале нового века // *Нейрокомпьютеры: разработка, применение*. 2002. № 7-8. С. 4 – 14.

102. Lutwyche M.I., Wada Y. Estimate of the ultimate performance of the single-electron transistor // *J. Appl. Phys.* 1994. V. 75, N7. P. 3654 – 3661.

103. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Новик Е.Г. О рабочей температуре одноэлектронных транзисторов // *Письма в ЖТФ*. 1998. Т.24, вып. 8. С. 16 – 19.

104. Manipulation and detection of single electrons for future information processing / Y. Ono, A. Fujiwara, K. Nishiguchi, H. Inokawa, Y. Takahashi // *J. of Appl. Phys.* 2005. V. 97, N3. P. 031101-1 – 19.

105. Ahmed H., Nakazato K. Single-electron devices // *Microelectr. Engin.* 1996. V. 32. P. 297 – 315.

ГЛАВА 7

СТРУКТУРЫ НА КВАНТОВЫХ ПРОВОЛОКАХ

В данной главе проанализированы модели квантовых проволок и приборных структур на их основе. Оценены перспективы развития рассматриваемой области нанoeлектроники.

Приборные структуры на квантовых проволоках в своем большинстве относятся к более широкому типу *приборов на эффектах квантовой интерференции*. Наряду с длиной волны де Бройля λ_B наиболее важным параметром для данного типа приборов является длина фазовой когерентности λ_φ [1]. В случае, когда размеры структуры соизмеримы с λ_φ , волновые функции носителей заряда, например электронов, могут интерферировать, распространяясь по различным путям, в местах схождения этих путей, вызывая тем самым различного рода флуктуации, а именно: проводимости (кондактанса), других кинетических коэффициентов, тока и напряжения (нарушение закона Ома), что используется в практических приложениях. Здесь прослеживается аналогия с разнообразными интерференционными оптическими приборами и приборами СВЧ-электроники. Поэтому в настоящее время предложено много приборных структур твердотельной электроники, включая нанoeлектронику, на эффектах квантовой интерференции, являющихся фактически твердотельными аналогами указанных выше типов приборов (см. даже первые обзоры [2 – 7]).

В 1959 году Ааронов и Бом [8] теоретически показали, что в двухсвязанной системе (типа "кольца", "рамки"), когда

* Возможны приборы, включающие квантовые проволоки, в которых важны не обязательно эффекты квантовой интерференции, а например одноэлектронное туннелирование, но это уже, как правило, комбинированные (гибридные) приборы.

электронный пучок (волновой пакет) расщепляется на два альтернативных пучка (волновых пакета), их интерференция наблюдается в месте схождения пучков (волновых пакетов). Управление этой интерференцией в месте схождения допустимо с помощью векторного потенциала электромагнитного поля, в частности, как с приложением магнитного (магнитный эффект Ааронова – Бома), так и электрического (электростатический эффект Ааронова – Бома) полей. Так как длина фазовой когерентности λ_ϕ возрастает с уменьшением температуры, то первые экспериментальные подтверждения эффекта были проведены при низких температурах вследствие более простой технологической реализации исследуемых образцов [2,3]. В этом случае легче достигается баллистический (бесстолкновительный) режим переноса в половинках кольца (рамки), составляющих альтернативные пути движения разделенных пучков (волновых пакетов), так как процессы столкновения могут приводить к сбою фазы электронных волн, т.е. потере фазовой когерентности. Важно заметить, что Ю.В. Шарвином с сыном было экспериментально показано [9], что фазовая когерентность может не разрушаться вследствие процессов упругого рассеяния, что подтверждает упрощенную теорию работы [10]. В то же время разупорядочение (хаотизация) фазы вследствие неупругого рассеяния и различные тепловые эффекты могут приводить к разрушению требуемой когерентности пучков. Таким образом, исследования доказали *принципиальную важность при рассмотрении интерференционных эффектов процессов рассеяния, в частности разделения влияния упругих и неупругих процессов и учета их воздействия.*

Первые реализации колец и рамок Ааронова – Бома на тонких металлических проволоках с подведенными к ним контактами [2,3] фактически являлись первыми приборными структурами на эффектах квантовой интерференции твердотельной

электроники. В дальнейшем появилось огромное количество предложений таких приборов, как правило, на основе разнообразных реализаций волноводов (носителей заряда) в твердом теле (см. даже первые обзоры [4 – 7,11,12]). Здесь мы будем использовать характерный, вообще говоря, для СВЧ-электроники термин – "волновод", используемый традиционно в рассматриваемой области в зарубежной литературе (английский термин – "waveguide"). Это сделано для того, чтобы не было путаницы с более специфическим термином "квантовые проволоки"^{**}, для которых принципиально важно пространственное квантование (дополнительный к квантовой интерференции в приборной структуре квантовомеханический эффект) в поперечном сечении проволоки (волновода). Поэтому такие структуры, по существу, являются гибридными.

Приборные структуры на квантовой интерференции включают волноводы, построенные на 3D, 2D, 1D объектах, и самой разнообразной формы, а именно: кольца; рамки; зигзаги; уголки; пересечения типа "крест", Y-образные, T-образные; иные сочетания волноводов (параллельные, хаотические и др.); расширения; микросужения; точечные контакты и др. Материалы, используемые при создании приборов, могут быть также различными: металлы, полупроводники, диэлектрики. Весьма интересно и перспективно применение с этой целью нанотрубок (углеродных, кремниевых и др.), молекул, атомных цепочек. *Форма и размеры волноводов могут управляться также* достаточно разными способами, например с помощью затворов, влияющих на 2D электронный газ или квантовую яму. Бесспорно важным является и влияние температуры окружающей среды. Интересно заметить, что резонансно-

^{*} Иногда к ним также добавляются резонаторы, интерферометры, точечные контакты.

^{**} В литературе иногда встречаются вместо "проволока" следующие слова: "провод", "нить", "шнур". Более удачным в рассматриваемом случае было бы строгое и, к сожалению, более громоздкое словосочетание: "волноводы на квантовых проволоках".

туннельные структуры, рассмотренные ранее [13], могут интерпретироваться в качестве интерференционных приборов, так как в режиме резонансного, а не последовательного туннелирования, принципиально важна интерференция многократно отраженных волн в квантовой яме (ямах), правда в поперечном направлении. Естественно рассмотреть все это огромное многообразие структур практически невозможно. Поэтому здесь остановимся на наиболее важных вопросах физики и моделирования рассматриваемого типа приборов и в особенности (согласно анализу [1]) на квантовых проволоках. Кроме того, один из наиболее существенных недостатков интерференционных приборов – многомодовость обычных волноводов [4]. В результате получается большой разброс длин волн носителей заряда, а следовательно, это может приводить к ослаблению ("размазыванию") интерференционных эффектов. Один из наиболее эффективных путей устранения такого ослабления – использование именно квантовых проволок в качестве волноводов. Бесспорно важным является и то, что в настоящее время теоретически показано, что *на основе квантовых проволок может быть в принципе создан "полный набор элементов функционально аналогичных обычным элементам микроэлектроники"* [14].

7.1. Результаты теории неупорядоченных систем

Появлению квантовых проволок предшествовали интенсивные исследования в области мезоскопической физики, в частности по интерференционным эффектам в неупорядоченных системах. Было установлено, что ряд явлений, правил и свойств, в частности, поправки к проводимости в режиме слабой локализации, флуктуации кондактанса в проводниках, эффекты Ааронова – Бома, неаддитивность последовательных сопротивлений и параллельных проводимостей и некоторые

* Для случаев, когда наблюдаются случайные фазы для различных мод [4].

другие могут быть объяснены квантовой интерференцией. Хорошие обзоры по данным вопросам приведены в статьях [15,16], монографиях [17,18] и учебном пособии [19]. Поэтому здесь лишь кратко остановимся на ключевых результатах, так как они все же важны для дальнейшего изложения и понимания материала.

Так, принципиально важным для объяснения поведения мезоскопических систем является использование квантовомеханических законов и положений (в этом плане они схожи с микроскопическими системами), что связано с проявлением влияния: дискретности спектра носителей заряда, а также эффектов их квантовой интерференции, что начинает существенно сказываться на самых различных характеристиках данных систем. Именно эти два фактора и "роднят" теории неупорядоченных систем и квантовых проволок.

Одним из наиболее существенных первых результатов в направлении исследования неупорядоченных систем была теория локализации Андерсона [20] и ее последующее развитие [15 – 18]. Оказывается, что при достаточно сильном беспорядке происходит локализация состояний. В целом, энергетический спектр неупорядоченной конденсированной системы более разнообразный, чем в упорядоченной. В результате было показано, что, например, одномерные и двумерные металлические системы не являются в поведенческом смысле истинными металлами. Более того, в трехмерных системах возможен переход металл-диэлектрик (переход Андерсона).

Дальнейшим существенным шагом была разработка скейлинговой теории локализации [18] в зависимости от

* Здесь под размерностью часто подразумевают количество пространственных координат в соответствующей модели системы (более детально вопрос рассмотрен в [18]). Не следует ее отождествлять с размерностью в обычном квантовомеханическом смысле [1]. Поэтому в литературе в рассматриваемом случае добавляется приставка, например, "квази 1D система". Этим также подчеркивается, что реальные системы не являются чисто одномерными [21].

размерности образца d . При этом выделяют режимы слабой, когда квантовые поправки к проводимости малы, и сильной локализации. В целом, в настоящее время считается, что при достаточно сильном беспорядке все или почти все состояния локализованные [18]. При промежуточной степени беспорядка (для $d > 2$) могут возникать как локализованные, так и делокализованные состояния в запрещенной зоне [18].

В результате этого существенно может изменяться картина кинетических явлений. В режиме локализации состояний возможны следующие процессы термоактивированной проводимости [18]: 1) активация на край подвижности; 2) активация в соседнее локализованное состояние; 3) прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка. Наряду с прыжковой (надбарьерной) проводимостью возможно также последовательное (нерезонансное) и резонансное туннелирование [17]. Принципиально важным для описания транспортных свойств становится учет различных взаимодействий, а именно: электрон-фононных, электрон-электронного и др. Интересно заметить, что фононы могут как разрушать локализацию, так и усиливать ее [17].

Вычисляемыми параметрами для неупорядоченных систем являются: плотность состояний, проводимость (кондактанс), другие кинетические коэффициенты, диэлектрическая проницаемость, средний коэффициент прохождения, радиус локализации волновой функции и др. Модели, как правило, строятся в одночастичном приближении в рамках формализмов волновых функций или функций Грина в сочетании с различного рода приближениями. С целью описания беспорядка вводятся разнообразные зависимости потенциала в неупорядоченной системе [15 – 17]. Существенную роль при этом могут оказывать корреляционные эффекты.

Наиболее полной считается в настоящее время теория проводимости для одномерных неупорядоченных систем [15 –

17]. При построении моделей используются: одночастичное приближение, метод матрицы рассеяния, метод матриц переноса, метод корреляционных функций ток-ток (метод Кубо), метод сильной связи, функции Грина (диаграммные техники), метод Монте-Карло, метод ренормгруппы и др. При этом могут применяться различные приближения теории возмущений.

Особенно важным для развития мезоскопической физики при изучении транспортных свойств являлось создание двух формализмов для описания проводимости (кондактанса) на основе формулы линейного отклика Кубо [22] (формализм Кубо, формализм Кубо – Гринвуда, 1957 – 1958 гг.)^{*} и формулы Ландауэра [23,24] (формализм Ландауэра, формализм Ландауэра – Буттикера)^{*}. Разработка этих формализмов происходила практически параллельно (одновременно) с началом развития мезоскопической физики, в частности, теорией локализации Андерсона, эффектами Ааронова – Боме. В целом, они могут приводить к эквивалентным результатам (см. далее).

В формализме линейного отклика Кубо (R. Kubo) получено несколько формул для проводимости и ее составляющих через корреляционную функцию [22]. В квантовомеханическом случае исходным при их выводе является уравнение Лиувилля – фон Неймана для матрицы плотности. Далее используется линейное приближение и получаются выражения для тензора электропроводности, т.е. функции линейного отклика ток-внешнее электрическое поле через корреляционную функцию ток-ток. Были также выведены формулы для симметричной и антисимметричной частей статической электропроводности. В случае плоскополяризованного излучения получено выражение для электропроводности соответствующее известной теореме Найквиста [22]. Заметим, что выведенная Кубо формула (формулы) представляет, как пишет сам автор, "наиболее общую

^{*} В литературе встречаются именно такие названия формализмов.

форму соотношения Эйнштейна, связывающего электропроводность или подвижность с коэффициентом диффузии" [22].

В целом с помощью формализма Кубо получено ряд важных результатов при изучении кинетических свойств неупорядоченных систем в различных случаях (см., например, [17,18]). При вычислении корреляционных функций с помощью теории возмущений можно использовать известные методы теории многих тел, в частности методы расщепления уравнений для функций Грина, диаграммные техники и др. Преимущество этих методов – возможность учета коллективных эффектов. Однако расчет проводимости с помощью теории возмущений в формализме Кубо довольно сложен, так как в некоторых случаях необходимо частичное суммирование бесконечного ряда [25].

Рассмотрение движения невзаимодействующих электронов проводимости металла в допущении о беспорядочности распределения центров рассеяния в кристалле приводит к удобной формуле Гринвуда (D.A. Greenwood) для электропроводности [22], которая достаточно часто используется в рамках описываемого формализма в качестве исходной (см., например, [17,18]).

Остановимся на одном недостатке, характерном для формул, получаемых в рамках рассматриваемого формализма. Так, формула Кубо, строго говоря, применима для бесконечных систем с непрерывным спектром [18]. В то же время важное влияние на интерференционные явления, наряду с процессами неупругого рассеяния часто оказывает окружение* (резервуар), которое может приводить к разрушению когерентности волн носителей заряда, т.е. также к дефазировке. Для конечных систем с дискретным спектром для учета слабого взаимодействия с резервуаром необходимо вводить уширение уровней, что приводит к необходимости модификаций в

* К нему могут быть отнесены и контакты.

формулах [18]. Таким образом, в формализме Кубо – Гринвуда дополнительно вводится параметр, характеризующий уширение уровней спектра системы вследствие взаимодействия с резервуаром, т.е. взаимодействие учитывается в определенной степени неявно. Часто это бывает неудобно.

Отмеченного недостатка лишен формализм Ландауэра (R. Landauer) [23,24,26], дополненный Буттикером (M. Büttiker) [27 – 29] и коллегами (см., например, [18]) (формализм Ландауэра – Буттикера).

Формализм Ландауэра первоначально был предложен для случая вычисления кондактанса систем с одним каналом с двумя подходящими контактами (одноканальная двухтерминальная формулировка). Однако, так как рассматриваться может мезоскопическая система, то кондактанс такой системы часто обладает необычными свойствами по сравнению с обычными резисторами.

В 1957 году Ландауэр рассмотрел в одномерном случае потенциальный (рассеивающий*) барьер, подсоединенный идеальными одномерными проводниками с двумя резервуарами (контактами), характеризуемыми фиксированными значениями химических потенциалов μ_1 и μ_2 , причем $\mu_1 - \mu_2 = qV$, где q – заряд электрона, а V – прикладываемое напряжение. Если T – коэффициент прохождения, а R – коэффициент отражения барьера, то кондактанс барьера (с учетом спина) дается формулой [23,24]

$$G = \frac{q^2}{\pi\hbar} \cdot \frac{T}{R}, \quad (1)$$

где \hbar – постоянная Планка, деленная на 2π . В то же время кондактанс системы (барьер, проводники и контакты), т.е. измеряемый между двумя контактами, отличается и равен

* Иногда в зарубежной литературе рассматриваемый формализм образно называется "рассеивающий подход" ("scattering approach").

$$G_c = \frac{q^2}{\pi h} T. \quad (2)$$

Замечу, что формулы (1) и (2) вызвали многочисленные дискуссии в литературе ("какая из них правильная?"), пока не было достигнуто понимание того, что "они описывают *разные* физические величины" [18]. Следовательно, формула Кубо может дать значение кондактанса G и, строго говоря, для нас не подходит. Эти результаты фактически подтвердили принципиальную важность рассмотрения системы в целом, а не отдельных ее составляющих. Важно также отметить, что *под "барьером" может пониматься любой объект*, например, рассеивающий центр, отрезок линейной цепочки и т.п., *что и делает удобным применение формализма Ландауэра к мезоскопическим (одномерным) системам с двумя контактами.*

Дальнейшими важными шагами в развитии формализма Ландауэра являлись его обобщения на многоканальный и многотерминальный случаи, которые необходимы для рассмотрения систем на квантовых проволоках с многими контактами, т.е. приборных структур более сложных по сравнению с резистором, диодом и т.п., а также случай конечных температур.

Вследствие дискретности спектра в квантовой проволоке в общем случае имеем N проводящих каналов, а следовательно, необходимо рассматривать многоканальный случай. Обобщение формализма Ландауэра на этот случай было проведено с использованием матрицы рассеяния в работах [30,31] при нулевых температурах, а также с применением других подходов** в статьях [32 – 34]. При конечных температурах для двухтерминального (двух контактов) случая выражение для кондактанса (с учетом спина) было получено Ймри [18]:

* Необходимы отмеченные ранее модификации.

** Интересно заметить, что при обобщении может использоваться теория линейного отклика Кубо (см., например, [33,34]).

$$G_c = \frac{q^2}{\pi\hbar} \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sum_i T_i(E). \quad (3)$$

где E – энергия, f – функция распределения, T_i – коэффициент прохождения для i -го канала.

Важнейшими результатами применения формализма Ландауэра является установленная возможность неаддитивности последовательных сопротивлений и параллельных проводимостей мезоскопических систем (см., например, [18]).

Наиболее существенное обобщение было проведено Буттикером для четырехтерминального (четырёх контактов) случая* в статье [27]. При этом в образце (структуре) допускались процессы упругого рассеяния. Все процессы неупругого рассеяния происходят только в резервуарах (контактах). Процессы упругого рассеяния образца описывались с помощью коэффициентов прохождения носителей T_{ij} из j -го контакта в i -й и соответствующих коэффициентов отражения R_{ij} . В результате, кроме проводимостей, было получено полезное в мезоскопической физике выражение для тока i -го контакта (без учета спина), а именно [27]:

$$I_i = \frac{q}{2\pi\hbar} \left[(1 - R_{ii})\mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij}\mu_j \right], \quad (4)$$

где μ_j – химический потенциал j -го резервуара (контакта). Соотношение (4) справедливо и для более общего n -терминального случая. В многоканальном случае выражение (4) модифицируется путем замены 1 на N_i , где N_i – количество каналов для i -го терминала (контакта) [29]. Отметим, что получаемые кинетические коэффициенты удовлетворяют соотношениям симметрии онсагеровского типа (теорема

* Именно поэтому в литературе рассматриваемый формализм часто называется формализмом Ландауэра – Буттикера.

взаимности) [27,29,18]. Это свойство является важным физическим преимуществом многотерминальной формулировки Буттикера по сравнению с другими соотношениями для контактанса в подобных случаях [18].

Оригинальный и простой способ учета влияния процессов неупругого рассеяния непосредственно в образце был также предложен Буттикером [28]. В этом случае задача учета влияния неупругого центра рассеяния заменяется эквивалентной задачей путем подключения к образцу дополнительного резервуара (контакта) с двумя каналами, дающими в сумме нулевой ток. В результате может быть использована многотерминальная формулировка, описанная выше, и для этого практически важного случая, т.е. решаться гораздо более простая стационарная задача для процессов упругого рассеяния. Следует заметить, что данный способ с успехом применялся для построения упрощенной модели двухбарьерной резонансно-туннельной структуры в рамках описанного формализма [35].

В целом, *формализм Ландауэра – Буттикера является едва ли ни главным при построении моделей приборных структур на квантовых проволоках*. В связи с этим не следует забывать о предположениях, лежащих в его основе, а именно: 1) контакты находятся в термодинамическом равновесии; 2) процессы неупругого рассеяния происходят только в контактах; 3) в самой структуре без контактов могут иметь место только упругие процессы рассеяния; 4) контактанс вычисляется исходя из коэффициентов прохождения и отражения. Их следствием является то, что *этот формализм, строго говоря, применим для анализа внешних, а не внутренних, характеристик структур, которые близки к состоянию равновесия*. К сожалению, об этом часто забывают.

7.2. Квантовые проволоки

В своей пионерской работе Сакаки (H. Sakaki) [36] теоретически показал, что в "ультратонкой полупроводниковой проволоке" ("ultrafine semiconductor wire") с размерами в поперечном прямоугольном сечении, сравнимыми с длиной волны де Бройля электронов в каждом из измерений, возможно существенное снижение упругого рассеяния. В результате такая одномерная (1D) система может обладать сильно возросшей подвижностью электронов. Это было показано с помощью оценки подвижности, ограничиваемой рассеянием на удаленной ионизированной примеси, которое доминирует над другими процессами рассеяния при низких температурах, как считал автор [36]. Впоследствии такие структуры были названы "квантовыми проволоками" ("quantum wires"). Как предполагал Сакаки данное свойство таких проволок может найти широкое применение в различных электронных приборах [36]. Экспериментальная реализация квантовых проволок не заставила себя долго ждать [37].

Подвижность является важнейшим электрофизическим параметром не только объемных материалов, но и таких искусственных систем какими являются квантовые проволоки. Поэтому после работ Сакаки были начаты интенсивные исследования в этом направлении. Так, в статье [38] было показано, что ситуация оказывается не столь простой, так как необходимо учитывать другие механизмы рассеяния, в частности, на ионизированной примеси в самой квантовой проволоке и на акустических фононах. Подвижность в этих случаях может ограничиваться, а следовательно, вклад этих механизмов рассеяния не должен игнорироваться при анализе. В целом, было показано, что подвижность в квантовых проволоках на GaAs может не увеличиваться по сравнению с 3D системами [39]. Дополнительное отрицательное в этом же плане влияние может оказывать рассеяние на полярных оптических фононах

[39 – 41], а также температура окружающей среды [39,41]. Необходимо заметить, что применение приближения времени релаксации проблематично для учета процессов неупругого рассеяния таких как рассеяние на полярных оптических фонах, что отмечали сами авторы статьи [39]. Для более детальных по сравнению с [38] расчетов для вычисления волновых функций использовались приближения эффективной массы, а также бесконечно глубокой потенциальной ямы в поперечном сечении прямоугольной квантовой проволоки [39]. При этом подвижность электронов при малых полях в приближении времени релаксации вычислялась численно в квантоворазмерном пределе* на основе полученных упрощенных аналитических выражений. Существенное влияние на времена релаксации момента импульса для различных механизмов рассеяния может оказывать и учет экранирования в квантовых проволоках [42,43].

Различное влияние на рассеяние в квантовых проволоках, как было установлено, оказывают и другие факторы и процессы, а именно: границы раздела материалов; шероховатости поверхности проволоки; непараболичность зон; кристаллографическая ориентация; межподзонные и внутривозонные переходы, геометрическая форма сечения проволоки; электрон-электронные и даже трехчастичные процессы; неравновесные ("горячие") фононы; спин электронов и др. В целом, зависимость полной скорости рассеяния от энергии обычно характеризуется острыми пиками, что в значительной степени является следствием резонансной структуры плотности состояний в квантовых проволоках [44]. Под влиянием множества реальных факторов и процессов может скорее происходить уменьшение подвижности, чем ее увеличение, что отмечалось, например, в [45] при учете некоторых механизмов рассеяния.

* В литературе на русском языке встречается термин: "электрический квантовый предел".

Не менее важным при изучении транспортных свойств может быть также учет изменения эффективных масс в квантовых проволоках (см., например, [46] и далее), так как традиционно при анализе приборов на их основе используется метод эффективной массы.

Одним из главных недостатков ряда моделей квантовых проволок (и приборных структур на их основе) является неучет (или ограниченный учет) различных механизмов рассеяния в них. Многие модели разработаны лишь для баллистического режима транспорта*, хотя необходимо напомнить, что в первой работе Сакаки (см. ранее) по квантовым проволокам была показана принципиальная необходимость учета рассеяния в таких структурах. Весьма продуктивно для рассматриваемых целей в настоящее время используются методы Монте-Карло.

Модели, основанные на полуклассических методах Монте-Карло, как правило, предназначены для расчета дрейфовой скорости в стационарном и нестационарном случаях, средних значений кинетической энергии электронов. В стационарном случае может использоваться не многочастичный, а одночастичный метод Монте-Карло. Обычно моделируются квантовые проволоки на GaAs.

Дрейфовая скорость в квантовой проволоке на GaAs исследовалась в работе [47] в электрическом квантовом пределе (электроны занимают нижнюю подзону) в приближении бесконечно глубокой потенциальной ямы при температурах 30К и 300К. Учитывалось только рассеяние на полярных оптических фононах. Показано, что подвижность для 1D системы может быть выше, чем для 3D случая.

* Такой режим работы, как правило, реализуется в коротких структурах и/или при низких температурах, что нередко и имеет место на практике. Кроме того, рассмотрение этого режима полезно для оценки потенциальных (предельных) характеристик структур.

Дрейфовая скорость, средняя энергия и коэффициент диффузии в квантовой проволоке на GaAs квадратного поперечного сечения анализировались в работе [48] при температурах $T=30$, 77 и 120K. При моделировании учитывалось рассеяние на акустических и продольных оптических фононах.

Процессы установления стационарного состояния в квантовых проволоках квадратного поперечного сечения на GaAs при приложении электрического поля исследовались в работе [49] при температурах: 4,2; 77; 300K. Использовался многочастичный метод Монте-Карло для расчета дрейфовой скорости и средней энергии. Учитывался только один уровень и рассеяние на полярных оптических фононах.

Квантовая проволока квадратного сечения на GaAs в электрическом квантовом пределе в приближении бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы исследовалась в [50,51]. Анализировались дрейфовая скорость и средняя энергия. В модели учитывались механизмы рассеяния на полярных оптических фононах, на ионах примеси и неоднородностях поверхности. Для моделирования стационарных процессов использовался одночастичный метод Монте-Карло [50,51]. Показано, что при больших полях основное влияние на дрейфовую скорость оказывает рассеяние на полярных оптических фононах и неоднородностях поверхности. Для моделирования нестационарных процессов применялся многочастичный метод Монте-Карло [50,51]. Установлено, что примесное рассеяние и рассеяние на шероховатостях могут оказывать значительное влияние на переходные процессы в квантовых проволоках. В монографии [51] с использованием разработанного алгоритма исследовались также квантовые проволоки на Si.

Очень часто расчет параметров, характеризующих транспорт в квантовых проволоках, проводится в предположении электрического квантового предела. Однако исследования

показывают, что в ряде случаев может быть важно межподзонное рассеяние.

Модель, описывающая многоподзонный перенос в квантовых проволоках, была предложена в работе [52]. В ней использовался одночастичный метод Монте-Карло, включалось рассеяние на полярных оптических и акустических фонах, привлекалось приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы. С помощью модели рассчитывались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения квантовой проволоки на основе $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ структуры при $T=300$ и 77 К; анализировалось влияние изменения ограничивающего потенциала. С целью экономии памяти ЭВМ рассматривался небольшой энергетический интервал. Отмечается сложность: большие пики в интенсивностях рассеяния могут приводить к артефактам (не физическим результатам) для функции распределения. Установлено, что подвижность может быть в два раза больше, чем в объеме при $T=300$ К.

Осцилляции фотопроводимости и отрицательная проводимость в прямоугольных квантовых проволоках на GaAs , погруженных в AlAs , исследовались в работе [53] с помощью одночастичного и многочастичного методов Монте-Карло. Потенциальная яма предполагалась бесконечно глубокой. В модели учитывалась многоподзонная структура и рассеяние на продольных оптических фонах и локализованных поверхностных оптических фонах. В стационарном режиме при моделировании по одночастичному методу Монте-Карло оценивалось влияние рекомбинации электронов. В работе также анализировалась дрейфовая скорость и средняя энергия. Исследования проведены для температур: 10 ; 77 и 300 К.

Стационарные и переходные процессы в квантовой проволоке на GaAs квадратного сечения моделировались при $T=77$ и 300 К в работе [54] с помощью многочастичного метода Монте-Карло. Потенциальная яма предполагалась бесконечно глубокой.

Учитывалось анизотропия эффективной массы, а также рассеяние на полярных оптических фононах и междолинное рассеяние. Анализировались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения. В работе было получено удовлетворительное согласие результатов с таковыми для упрощенной полуклассической модели, основанной на уравнениях сохранения момента и энергии в приближении времени релаксации.

Исследования магнетотранспорта в GaAs квантовой проволоке при 77 и 300K проведены с помощью метода Монте-Карло в работе [55]. Влияние магнитного поля учитывалось путем использования закона дисперсии, плотности состояний и интенсивностей рассеяния, вычисляемых численно, исходя из первых принципов. В модель включалось рассеяние на оптических, акустических и поверхностных оптических фононах. Рассчитывались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения электронов по скоростям. Показано, что магнитное поле может увеличивать дрейфовую скорость.

Важный для квантовых методов Монте-Карло анализ был проведен в обзоре [56]. В нем было показано, что формализм функций Вигнера более удобен по сравнению с формализмами матриц плотности, функций Грина, интегралов по траекториям, в частности при построении моделей квантового переноса в полупроводниках на основе метода Монте-Карло ввиду аналогии с полуклассическим подходом. Отмечено по каким причинам метод кинетического уравнения Больцмана (КУБ) оказывается часто достаточно адекватным вне своих формальных пределов применимости. Для этого в традиционно используемом приближении эффективной массы получен вид уравнения Лиувилля – фон Неймана, подобный КУБ. Из него также выведены интегральные уравнения, удобные для применения методов Монте-Карло, аналогичным полуклассическим.

К сожалению, непосредственно использование уравнения Лиувилля – фон Неймана для моделирования структур практически невозможно [1]. В связи с этим в работе [57] в рамках формализма функций Вигнера были получены два более простых кинетических уравнения Левинсона и Баркера – Ферри, обобщенные для электрон-фоонных систем в квантовых проволоках. Основными приближениями являются слабое взаимодействие, равновесие фоонов, а также приближение случайных фаз. Выведены удобные в применении интегральные формы уравнений. В качестве примера моделировались переходные процессы в квантовой проволоке квадратного сечения на GaAs при нулевом электрическом поле и очень низких температурах. Учитывалось рассеяние на полярных оптических фоонах. При расчете применялся обращенный во времени метод Монте-Карло. Были проанализированы эволюция во времени функции Вигнера, электронной плотности и средней энергии. К сожалению, несмотря на введенные упрощения, временные затраты ЭВМ растут экспоненциально с увеличением времени эволюции. Поэтому доступны для моделирования времена в несколько сотен фемтосекунд. Для рассмотрения больших времен эволюции необходима разработка специальных ускоряющих процедур и использование новых возможностей вычислительной техники.

И в то же время учет дополнительных квантовых эффектов при моделировании целесообразен. Так, в работе [58] исследовался электронный транспорт в квантовых проволоках прямоугольного сечения на GaAs при больших электрических полях и $T=300\text{K}$. С помощью кинетического уравнения Баркера – Ферри для одночастичной функции распределения учтены квантовый внутрисударительный полевой эффект, а также межподзонное рассеяние на продольных оптических фоонах. Потенциальный барьер на границах квантовых проволок предполагался бесконечным. Для решения уравнения использовался метод Монте-Карло. Было показано, что

дрейфовая скорость электронов сильно уменьшается при средних электрических полях вследствие указанного квантового эффекта как для тонких (7 нм x 10 нм), так и для толстых (30 нм x 30 нм) проволок. Для этого проводилось сравнение с полуклассической моделью на основе КУБ. Эти данные, с одной стороны, подчеркивают важность учета квантовомеханических коррекций при моделировании квантовых проволок, а с другой, – возможный рациональный и более или менее эффективный путь применения методов Монте-Карло.

Кроме того, следует заметить, что при учете рассеяния только на потенциальном профиле, задаваемом приближенно, кинетическое уравнение для функции Вигнера может быть решено для резисторов на квантовых проволоках с помощью метода Монте-Карло, аналогичного описанному в [59], за приемлемое время на ПЭВМ [60,61].

Один из существенных недостатков методов Монте-Карло при моделировании квантовых проволок заключается в том, что флуктуации физических величин в них могут быть большими, а следовательно, для получения физически разумных результатов требуются существенные затраты вычислительных ресурсов ЭВМ.

Альтернативным в рамках полуклассического подхода является использование КУБ. Так, в работе [62] была разработана дискретная модель на основе КУБ для достаточно длинной квантовой проволоки на GaAs в условии вырождения. При этом учитывалось рассеяние на примеси и оптических фононах, межподзонное рассеяние. Применялось приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы. В работе анализировалась функция распределения, дрейфовая скорость и средняя энергия при низких температурах.

И в то же время в работе [63] с использованием метода Монте-Карло было установлено, что линейная аппроксимация КУБ

может приводить к ошибочным для квантовых проволок результатам.

Анализ показывает, что многое в получаемых результатах зависит не только от того какие приближения используются, например число включенных в рассмотрение подзон, но и от того какие механизмы рассеяния учитываются, а также от адекватности моделей для интенсивностей рассеяния. Бесспорно важной информацией является энергетический спектр носителей заряда в квантовых проволоках. Строго говоря, здесь необходимо дополнительно самосогласованно решать уравнение Шредингера и Пуассона. Кроме того, многое зависит и от граничных условий. Учитывая существенные затраты вычислительных ресурсов ЭВМ, чрезвычайно актуальной становится задача разработки различных ускоряющих процедур в рамках методов Монте-Карло.

В случае, когда размеры структуры соизмеримы с длиной фазовой когерентности λ_ϕ , особенно при низких температурах, использование полуклассических моделей становится неоправданным, и необходимо применять модели квантомеханических формализмов. В данных случаях, однако, временные затраты могут становиться просто гигантскими даже при использовании программ, реализующих параллельные алгоритмы вычислений и предназначенных для суперЭВМ. Так, при расчете одной точки вольт-амперной характеристики (ВАХ) простейших мезоскопических структур с учетом рассеяния только на полярных оптических фонах с применением метода Монте-Карло в рамках формализма функций Вигнера требуется около 30 часов на 100 CPU – Cray T3E вычислительной системе [64].

В целом, для адекватного моделирования электрофизических характеристик квантовых проволок необходимо учитывать целый комплекс факторов и процессов из отмеченных ранее. Так, в работе [65] изучалась электронная подвижность в малых

электрических полях протяженных цилиндрических кремниевых квантовых проволок диаметром от 3 до 14 нм, окруженных диэлектриком толщиной 1 нм и металлическим затвором, при $T=300\text{K}$ в рамках формализма Кубо – Гринвуда и самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Учитывались кулоновское, внутримолекулярное на акустических фонах, междолинное (6 типов) и на шероховатостях поверхности механизмы рассеяния, а также непараболичность зоны. Показано, что результаты могут противоречить полученным ранее в электрическом квантовом пределе, в частности, при учете экранирования.

В связи с изложенным *разработка моделей различных параметров (подвижности, эффективной массы, времен релаксации, скоростей рассеяния, диэлектрической проницаемости, плотности состояний и др.) квантовых проволок представляется чрезвычайно актуальной.* Тут еще многое предстоит сделать.

Перейдем к рассмотрению упрощенных моделей квантовых проволок, которые непосредственно использовались для расчета кондактанса, ВАХ. Для этих целей при вычислении кондактанса или удельного сопротивления, как правило, применяются описанные ранее формализмы Кубо – Гринвуда и/или Ландауэра – Буттикера. Так как основной задачей становится расчет коэффициентов прохождения и отражения системы, то использоваться могут отмеченные ранее квантовомеханические формализмы [1]: 1) волновых функций; 2) матриц плотности; 3) функций распределения Вигнера; 4) функций Грина; 5) фейнмановских интегралов по траекториям.

Простые расчетные формулы для проводимости и удельного сопротивления квантовых проволок с прямоугольным сечением были получены в работе [66]. При рассмотрении учитывалось рассеяние на акустических фонах и точечных дефектах.

Плотность состояний и проводимость одномерных каналов в кремниевых инверсионных слоях исследовались в работе [67]. При расчете проводимости на основе формулы Кубо учитывалось пространственное квантование, межподзонное рассеяние, рассеяние на заряженной примеси, экранирование, уширение уровней и влияние температуры (не более 10К). Использовалась теория возмущений и формализм функций Грина. Квантовая яма рассматривалась прямоугольной или параболической. Сравнение с экспериментальными данными для полевых транзисторов с решеточным затвором с 250 одномерными каналами в инверсионном слое [68] показало хорошее качественное согласование.

Упрощенная модель кондактанса "двумерного резистора" на квантовой проволоке была построена в статье [69]. Транспорт электронов предполагался баллистическим с прерывающими его процессами упругого рассеяния на случайно расположенных примесях в многомодовом режиме (30 мод). Для каждой из мод предполагался параболический закон дисперсии. Использовался формализм Ландауэра (при температуре $T=0\text{K}$), а при вычислении коэффициентов прохождения применялся метод матрицы рассеяния [31]. Было проведено сравнение результатов моделирования резистора на основе квантовомеханической модели и полуклассической модели, соответствующей закону Ома. В статье также дана оценка кондактанса для случая двух параллельно расположенных резисторов (электростатический эффект Ааронова – Бома). В последующей более подробной статье авторов [70] было проведено моделирование при учете от 10 до 40 мод. При вычислении матриц рассеяния для каждого из центров использовалось борновское приближение в рамках формализма волновых функций [70]. Было осуществлено сопоставление с результатами полученными ранее для неупорядоченных систем, в частности, в режимах слабой и сильной локализации, исследованы флуктуации кондактанса. В

целом, подтверждено согласие со скейлинговой теорией локализации [70].

Кондактанс и его различные составляющие в стационарном случае (в рамках теории линейного отклика в борновском приближении) квантовых проволок был рассмотрен в работе [71]. Поперечное квантование учитывалось с помощью аппроксимаций, соответствующих для прямоугольной и параболической квантовой ямы, а в вертикальном направлении – для треугольной ямы. Рассматривались процессы рассеяния на примесях и электрон-электронные взаимодействия в присутствии примесей. Применялся метод эффективной массы для описания транспорта вдоль проволоки.

Метод согласования мод [69,70] для волновых функций при решении уравнения Шредингера использовался в работе [72] для детального исследования влияния одного рассеивающего центра в квантовой проволоке бесконечной длины. Рассеяние предполагалось упругим. Анализировалось два случая: потенциал рассеивающего центра (притягивающего или отталкивающего) аппроксимируется δ -функцией и прямоугольной формы. Для дефекта конечного размера использовался метод матриц переноса (трансферных матриц). Кондактанс рассчитывался с применением формализма Ландауэра – Буттикера (с учетом от 6 до 100 мод).

Квантовые проволоки (цепочки) с дефектами и шероховатостями и контактами (резервуарами) анализировались в работе [73] с помощью метода матриц переноса. В уравнении Шредингера использовался гамильтониан Андерсона, а кондактанс вычислялся в рамках формализма Ландауэра.

Ситуация может сильно меняться в случае учета влияния магнитного поля [5]. Так, в работе [74] были исследованы флуктуации кондактанса фактически для "двумерного резистора" на основе квантовой проволоки в данном случае. Потенциал рассеивающего центра аппроксимировался δ -

функцией. Для анализа использовался метод матрицы рассеяния и формализм Ландауэра – Буттикера. При расчете кондактанса квантовых проволок при вычислении коэффициентов прохождения могут применяться и функции Грина [75].

В статье [76] с помощью методов согласования мод и матрицы рассеяния [69,70] рассчитывался кондактанс квантовой проволоки с учетом рассеяния на шероховатостях. При моделировании рассматривалась бесконечная полоска, содержащая конечную область рассеяния со случайными флуктуациями ширины проволоки. Метод матрицы рассеяния использовался вследствие его численной устойчивости, так как метод матриц переноса может быть неприменим при длинах области рассеяния протяженностью большей по сравнению с длиной волны де Бройля [76]. Расчет кондактанса осуществлялся с помощью формулы Ландауэра для многоканального случая. При этом учитывалось 50 мод. Анализ показал, что флуктуации кондактанса происходят не вследствие "классического рассеяния" от шероховатостей границ, а в результате модуляции фазы волн вследствие многократных их отражений в проволоке.

Метод согласования мод с успехом использовался для иллюстрации важности трехмерности контактов (резервуаров) к квантовым проволокам на основе GaAs при расчете кондактанса [77].

Интересный вывод получен в работе [78], в которой было показано, что в ряде случаев использование метода согласования мод в рамках формализма волновых функций приводит к полностью идентичным соотношениям для расчета кондактанса квантовых проволок, получаемым с применением формализма функций Грина.

В работе [79] была предложена двухзонная аппроксимация решения уравнения Шредингера для описания рассеяния в квази 1D электронном волноводе. Моделирование было проведено для различных случаев, включая одномерный волновод с донорной

примесью и связанный с резонатором. Для расчета кондактанса применялась формула Ландауэра.

Существенное влияние на ВАХ резистора на квантовой проволоке оказывает температура окружающей среды. Использование даже простых моделей, основанных на теории линейного отклика в бесстолкновительном приближении и формуле Ландауэра – Буттикера, позволяет показать, что возможно не только "размытие" (лестницы кондактанса) ВАХ, но и появление на них области насыщения при больших напряжениях (см., например, [80,81]).

Для исследования кондактанса квантовых проволок (одномерных решеток) с одной примесью или квантовой точкой (резонансно-туннельная структура) при конечных температурах может применяться упрощенный метод функционала ренормгруппы [82].

Использование формализма Келдыша [83] в модели неоднородной жидкости Томанага – Латтинджера (Tomonaga – Luttinger) позволили провести упрощенный анализ влияния единичной примеси, температуры, длины и смещений на кондактанс, ВАХ и характеристики шумов квантовой проволоки с двумя контактами [84].

Применение квантового и классического методов молекулярной динамики проводилось для исследования структуры и энергетических свойств четырех различных видов кремниевых квантовых проволок [85]. Проводимость вычислялась с помощью приближения гамильтониана переноса для проволок с длиной от 4 до 9 нм.

Кремниевая квантовая проволока с поверхностными шероховатостями и с двумя полубесконечными квантовыми проволоками в качестве электродов анализировалась в работе [86]. Для этого использовались метод сильной связи (sp^3 модель) и формализмы Кубо – Гринвуда и Ландауэра – Буттикера.

Кондактанс в рамках последнего формализма определялся с помощью рекурсивного вычисления функций Грина. В работе изучались плотность состояний, средняя длина свободного пробега, подвижность и кондактанс.

В целом, при построении упрощенных моделей кондактанса квантовых проволок и резисторов на их основе часто используются формализм волновых функций, метод матрицы рассеяния, метод матриц переноса, метод согласования мод, функции Грина, модель жидкости Латтинджера, формализм Ландауэра – Буттикера и Кубо – Гринвуда.

Проведенный анализ показывает, что даже для простейших структур на квантовых проволоках требуется одновременный учет широкого спектра факторов и процессов. Достичь этого в рамках описанных ранее упрощенных моделей в общем случае не удастся. Необходима разработка более сложных численных моделей. Неплохие обзоры таких моделей приведены, например, в [87 –89].

Важным следующим шагом в развитии формализма Ландауэра – Буттикера была разработка приближенного метода Датты (S. Datta) с соавторами [5,90 – 92], который рассматривался при анализе моделей резонансно-туннельных структур [13]. Существенным моментом метода для мезоскопических систем является обобщение многотерминальной формулы Буттикера для тока типа (4) на случай непрерывного распределения зондов напряжения (терминалов) в виде [92]:

$$I(\vec{r}) = \frac{q^2}{2\pi\hbar} \int d\vec{r}' T_o(\vec{r}, \vec{r}') [\mu(\vec{r}') - \mu(\vec{r})], \quad (5)$$

где $I(\vec{r})$ – ток; $T_o(\vec{r}, \vec{r}')$ – описывает вероятность (плотность вероятности прохождения) того, что электрон, испытав разрушающее фазу рассеяние в точке \vec{r}' , последующее подобное рассеяние претерпевает в точке \vec{r} ; $\mu(\vec{r})$ – электрохимический

потенциал в точке \vec{r} . Соотношение (5) было выведено из достаточно общего квантового кинетического уравнения в рамках формализма Келдыша – Каданова – Бейма [13] с применением ряда приближений. Это позволило также получить уравнения для вычисления функции $T_0(\vec{r}, \vec{r}')$ и упрощенное квантовое кинетическое уравнение для электрохимического потенциала $\mu(\vec{r})$ в интегральной форме. Очень важным преимуществом метода по сравнению с рассмотренными ранее моделями в рамках формализма Ландауэра – Буттикера и Кубо – Гринвуда является возможность вычисления внутренних характеристик – плотности электронов и плотности тока в структуре. Электростатический потенциал находится в результате решения линеаризованного уравнения Пуассона. Эти характеристики, как известно, имеют принципиальное значение для анализа физических процессов непосредственно в структурах. Важным достоинством метода является также возможность включения в рассмотрение различных диссипативных процессов. Наиболее существенный недостаток – большое количество независимых переменных даже в стационарном случае, а именно: \vec{r} , \vec{k} (волновой вектор), E . Поэтому для его реализации на практике в исходном квантовом кинетическом уравнении необходимо использовать много дополнительных аппроксимаций и условий. В результате, моделирование структур возможно в режиме линейного отклика при малых прикладываемых смещениях, низких температурах, только для электронов зоны проводимости, для простой модели процессов рассеяния и др. [92]. Об этом, к сожалению, часто забывают другие авторы, применяющие этот метод. Серьезным его недостатком является и нарушение консервативности плотности тока на границе "прибор-контакт".

С использованием описанного метода было проведено численное моделирование ряда простых структур [92]: проволоки с туннельным барьером в ее середине в одномодовом

режиме; квантовых проволок с контактами в одно- и многомодовом режимах; сужений различной формы и др. Для построения дискретной модели использовался метод сильной связи для преобразования гамильтониана и получения соответствующего уравнения Дайсона в матричной форме для функции Грина. Подробно метод ее нахождения описан в [92]. После этого может быть вычислена функция $T_o(\vec{r}, \vec{r}')$ и решено уравнение для электрохимического потенциала в структуре $\mu(\vec{r})$, что представляет собой чрезвычайно сложную задачу [92]. После этого находятся плотность тока, токи терминалов и электростатический потенциал [92]. Отмечу, что, несмотря на сложность дискретной модели, расчеты были проведены за приемлемое время на рабочей станции Sun 4.

Заметим, что в литературе по рассматриваемым задачам описанный метод (или его модификации) часто просто называется методом или формализмом неравновесных функций Грина. К сожалению, при этом иногда не дается никаких комментариев за исключением ссылок на работы Датты.

Достаточно часто при численном моделировании различных свойств квантовых проволок используется и формализм волновых функций [87 – 89] (см. также далее).

Требование учета большого количества деталей привело к тому, что для моделирования квантовых проволок (и простейших структур на их основе) *стали интенсивно использоваться и модифицироваться методы расчета зонных структур твердых тел и свойств химических соединений* (см., например [93 – 95]), *т.е. применяемые ранее для определения характеристик материалов. Это является, пожалуй, одной из главных особенностей численного моделирования квантовых проволок.* Отличный обзор таких методов и моделей приведен в работе [88].

В рассматриваемом случае при анализе ряда структур на квантовых проволоках, например, на основе отдельных атомов, молекул, атомных и молекулярных цепочек метод эффективной массы может быть уже недостаточен и необходимо более детально явно учитывать электронную структуру системы (и не только собственно квантовой проволоки!). Так как моделирование транспорта даже в квантовых проволоках (тем более в приборах на их основе) исходя из первых принципов без согласующих параметров с учетом всех деталей атомной конфигурации требует огромных затрат вычислительных ресурсов даже высокопроизводительных систем, то традиционно используются более простые подходы и методы. К ним могут быть отнесены [87,88]: метод сильной связи (см. например, приближенный метод Датты с соавторами) и его различные разновидности; методы теории функционала плотности; метод матриц переноса; методы формализма функций Грина; метод молекулярной динамики.

Рассмотрим эти методы. Так, использование эмпирических методов при расчете матричных элементов в методе сильной связи требует, к сожалению, большого числа параметров (от 15 до 29) [88]. В то же время от их знания во многом зависят результаты моделирования. Хотя и имеются неплохие наработки в этом направлении [88], однако, здесь еще многое предстоит сделать. Попытаться решить эту проблему можно с использованием полуэмпирических и *ab initio* методов. Однако и здесь возникают непростые вопросы, в частности с использованием различных приближений. Поэтому в настоящее время применение методов из первых принципов, несмотря на их перспективность, целесообразно в материаловедении, а эмпирических или полуэмпирических методов – для моделирования приборов [88]. Определенные успехи при

* Метод сильной связи и возможные пути его дальнейшего развития для моделирования двухтерминальных приборов, включающих наноструктуры и в которых проходит ток, рассмотрены в обзоре [96].

расчете матричных элементов в методе сильной связи достигнуты с помощью методов теории функционала плотности (см., например, [97]) с различного рода аппроксимациями [88]. Это позволяет моделировать структуры с несколькими тысячами атомов, а следовательно, в принципе применимых к простейшим приборным структурам на квантовых проволоках.

В целом же, вычисление транспортных свойств на основе теории функционала плотности (или метода Хартри – Фока) должно проводится очень тщательно, так как рассогласование теории и эксперимента по абсолютной величине тока может быть значительным, по меньшей мере, в 5 – 10 раз [88].

Возможные причины этого для моделей теории функционала плотности для двухэлектродных структур, включающих молекулы, выделены в работе [98], а именно: 1) применяемые модели недостаточно уточнены; 2) паразитные эффекты в экспериментах недооцениваются; 3) не совсем ясна физика границ раздела молекула-контакт и она очень не проста ввиду сложности атомной структуры этих границ; 4) несовпадение в общем случае уровней энергии, используемых в моделях, с реальными уровнями энергии системы; 5) применение различных обменно-корреляционных функционалов, которые приводят к вариациям тока более чем на порядок по величине. Ясно, что многие из отмеченных причин могут быть важны и при моделировании других приборных структур (см. далее).

Достаточно экономичные модели в рамках формализма волновых функций могут быть построены с использованием метода сильной связи и метода матриц переноса. Однако увеличивающееся число матричных перемножений приводит к понижению точности расчета, что ограничивает сложность моделируемых структур [88].

При использовании формализма функций Грина в сочетании с методом сильной связи и эмпирическими методами или методами теории функционала плотности, к сожалению, часто

требуется обращение матриц очень больших размеров. Такой случай был нами уже рассмотрен при анализе моделей резонансно-туннельных структур [13]. Это, естественно, приводит к существенным затратам вычислительных ресурсов ЭВМ. Возможно также и нарушение консервативности плотности тока. Внимание необходимо и при согласовании функций Грина на внутренних границах. Тем не менее, такие модели применялись для исследования проводимости и расчета тока для отдельных молекул, атомов, углеродных нанотрубок, атомных цепочек, кремниевых нанопроволок и др. [87,88]. Важным преимуществом формализма неравновесных функций Грина является возможность учета различных механизмов рассеяния, включая неупругие, и многочастичных (электрон-электронных) взаимодействий, по крайней мере, при вычислении тока в принципе (см. ранее и [88]). При этом часто используются формулы для тока, которые могут интерпретироваться как обобщения применяемых в формализме Ландауэра – Буттикера (см. (5), а также [88]). Возможно также моделирование совместного электрон-фононного переноса, например, в переходах из одного, двух атомов между различными полубесконечными 1D контактами [99]. Генерация тепла и его перенос могут быть важны, так как иногда приводят к разрушению структур.

Остановимся на ряде интересных результатов, полученных недавно в стационарном случае.

С применением теории функционала плотности показано [100], что реконструкция поверхности тонких кремниевых квантовых проволок приводит к появлению поверхностных состояний, которые могут усиливать проводимость. В результате, такие проволоки обладают металлическими или полуметаллическими свойствами, а следовательно, их легирование не требуется, чтобы получить хорошо проводящие Si проволоки.

Интересные результаты были получены и в работе [101] при расчете средней длины свободного пробега и сопротивления длинных кремниевых квантовых проволок в результате сравнения формализмов Кубо – Гринвуда и Ландауэра – Буттикера. В рамках последнего использовалось рекурсивное вычисление функций Грина. Оказалось, что два формализма приводят к качественно согласующимся результатам и имеют преимущества и недостатки, однако в процессе применения формализма Кубо – Гринвуда проблемы возникают чаще. Атомная и электронная структура проволок определялись на основе теории функционала плотности с помощью комплекса программ SIESTA. Это позволяло вычислить составляющие гамильтониана, необходимые в расчетах. При моделировании учитывался беспорядок в объеме и на поверхности.

Формализм неравновесных функций Грина и самосогласованное приближение Хартри – Фока использовались в работе [102] для исследования влияния примесного центра и взаимодействия электронов с и без учета спина электронов на проводимость квантовой проволоки с полубесконечными контактами в зависимости от длины, температуры и силы взаимодействия.

Электронная структура, фононные моды и частоты, электрон-фононная связь и неупругие свойства транспорта в цепочке атомов (от 3 до 7) золота между полубесконечными контактами и молекул углеводорода между двумя золотыми контактами исследовались в работе [103]. Для этого было проведено расширение возможностей комплексов программ SIESTA и TRANSIESTA, основанных на теории функционала плотности. Кондактанс, ВАХ и плотность мощности с учетом неупругих процессов рассчитывались на основе формализма

* Интересно заметить, что в обзоре [96] было показано, что в рамках метода сильной связи может быть получено пять эквивалентных с математической и с физической точек зрения формул для тока и кондактанса (в пределе нулевых смещений и температур) для двухтерминальных приборов, включающих наноструктуры.

неравновесных функций Грина. При этом использовано рекурсивное вычисление функций Грина. Электрон-фоонное взаимодействие учитывалось в рамках самосогласованного приближения Борна и более простого разложения, требующего существенно меньших вычислительных ресурсов ЭВМ. Использован формализм Ландауэра – Буттикера. Рассмотренный подход применим при малых смещениях. Было получено неплохое согласование с некоторыми экспериментальными данными.

В работе [104] исследовано влияние направления роста и шероховатостей поверхности на электронный транспорт в кремниевых квантовых проволоках малого диаметра (0,46 – 1,56 нм) с длиной до 390 нм. Теория функционала плотности использовалась для задания атомной структуры проволок, в частности, применялся комплекс программ VASP. Для описания транспорта использовалась $sp^3d^5s^*$ модель сильной связи в сочетании с формализмом неравновесных функций Грина. Электростатический потенциал предполагался изменяющимся линейно. Формализм Ландауэра – Буттикера применялся при вычислении тока и кондактанса. Показано, что указанные факторы могут существенно влиять на ВАХ проволок с полубесконечными контактами стока и истока, в частности, к существенному падению тока с ростом смещений для некоторых ориентаций.

Структурные и электронные свойства гидрогенизированных кремниевых квантовых проволок с ориентацией роста $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ диаметром от 0,7 до 3,2 нм исследовались с использованием многоступенчатого метода [105]: оптимизация геометрии проведена с применением полуэмпирического метода, а зонная структура вычисляется с помощью теории функционала плотности. Показано, что изменение поверхностной структуры за счет заместителей может быть существенно, а следовательно, и зонной структуры, и зависит от

ориентации проволоки. Кондактанс и ВАХ рассчитывались с использованием метода неравновесных функций Грина в рамках формализма Ландауэра – Буттикера для квантовых проволок диаметром около 0,8 нм и длиной ~ 1 нм между двумя контактами из Li и Si. В первом случае обнаружена отрицательная дифференциальная проводимость (ОДП) на ВАХ. Выбор Li связан с относительно малым временем вычисления, так как Au и Pt контакты требуют при расчетах очень больших времен. Во втором случае Si контактов устанавливаются собственно электрические свойства кремниевой квантовой проволоки. В целом, проводимость чувствительна к химически поглощаемым проволокой веществам, что может быть полезным для создания различных датчиков.

Приближение локальной спиновой плотности в неколлинеарном случае использовалось для исследования обменно-корреляционных эффектов с учетом спин-орбитального взаимодействия в квантовой проволоке на GaAs/AlGaAs гетероструктуре [106]. Параболический потенциал предполагался в поперечном сечении проволоки в сочетании с приближением эффективной массы. Анализировались специфика зонной структуры и кондактанс с учетом влияния магнитного поля при $T=0$ К. Показано, что учитываемые эффекты и взаимодействия могут приводить к "аномальным плато" в кондактансе. Результаты, прежде всего, важны для спинтроники.

Влияние модулируемого во времени рассеивающего потенциала в конечной области квантовой проволоки исследовалось в работе [107]. Анализ переходных процессов проводился в рамках формализма волновых функций. Нестационарное уравнение Шредингера с использованием преобразования Фурье сводилось к интегральному уравнению типа Липпмана – Швингера, которое далее решается численно. Форма потенциала в поперечном сечении предполагалась параболической. В работе

рассчитывался кондактанс в стационарном случае, а также токи и плотность вероятности в нестационарном случае при учете влияния магнитного поля. В предыдущей работе авторов [108] исследовалось распространение волнового пакета в квантовой проволоке с антиточкой или параллельными двумя квантовыми точками при воздействии однородного магнитного поля. При вычислении кондактанса использовался формализм Ландауэра – Буттикера. В работе показано важное влияние силы Лоренца на физические процессы в структурах.

При анализе переходных процессов используются также методы сильной связи, теории функционала плотности и молекулярной динамики [88].

Так, метод молекулярной динамики в сочетании с методом теории функционала плотности использовались для моделирования точечного контакта на Na при конечной температуре $T = 190$ K в работе [109]. Исследовались процесс растяжения металлической проволоки (вплоть до разрушения), а также плотности состояний и кондактанс для определенных конфигураций контакта. Кондактанс вычислялся в рамках формализма Кубо – Гринвуда. Обнаружено, что спектральные характеристики и кондактанс испытывают динамические тепловые флуктуации в субпикосекундном диапазоне благодаря перегруппировке атомов металла. Это может существенно модифицировать транспортные свойства таких проволок. Данные результаты подчеркивают важность анализа переходных процессов даже в квантовых проволоках и простейших структурах на их основе.

В методе молекулярной динамики при вычислении сил применяется и формализм функций Грина [87,88]. В сочетании с методом сильной связи может рассматриваться уравнение движения для оператора эволюции в представлении взаимодействия с дальнейшим вычислением тока по формуле типа используемым в формализме Ландауэра – Буттикера [110].

Перспективным является и применение методов Монте-Карло (см. ранее).

Таким образом, хотя немало достижений в развитии рассмотренных методов, еще многое предстоит сделать при согласовании моделей с экспериментом. Большое поле деятельности и по повышению экономичности моделей.

Среди других интересных моделей квантовых проволок (и простейших структур на их основе) отметим следующие.

В работе [111] была получена система упрощенных квантовых гидродинамических уравнений в стационарном случае для замкнутой квантовой проволоки с одним локализованным упругим рассеивающим центром с потенциалом в виде δ -функции. Уравнение Пуассона аппроксимировалось в режиме линейного отклика и малых температур.

Обращает на себя внимание тот факт, что если на начальном этапе применялись квазиодномерные модели, то впоследствии все чаще стали использоваться двумерные и даже трехмерные (по пространству) модели, особенно для атомных цепочек и молекул [89]. Это свидетельствует о том, что традиционное обоснование путем "разбиения" трехмерного уравнения Шредингера на два уравнения (двумерное в поперечном сечении, а одномерное в направлении транспорта) все меньше и меньше начинало удовлетворять исследователей, так как приводит к потере важных деталей, а, как следствие, к возможному плохому количественному согласованию моделей с экспериментальными данными. *Принципиально важным здесь может становится интерфейс между квантовой проволокой и макроскопическим контактом, а поэтому модель, вообще говоря, должна быть трехмерной.* Важность такого интерфейса была продемонстрирована в ряде работ (см., например, [112] для атомных цепочек на расчет ВАХ с применением метода теории функционала плотности). Необходимым может быть и учет

туннелирования на границе между квантовой проволокой и контактами [113].

7.3. Приборные структуры на эффектах квантовой интерференции

Ранее уже отмечалось, что в настоящее время предложено (и реализовано) большое количество таких приборных структур. Здесь лишь остановимся на наиболее важных для нас результатах.

Начиная с пионерской работы Ааронова и Бомы [8], наиболее часто для построения упрощенных моделей разнообразных структур на эффектах квантовой интерференции, включая баллистические каналы, микроконтакты, микросужения, используется формализм волновых функций. При этом применяются методы матрицы рассеяния и матриц переноса, метод согласования мод и другие упрощения, а в случае вычисления кондактанса (сопротивления) и токов – формализмы Ландауэра – Буттикера или Кубо – Гринвуда (иногда формула Тсу – Есаки для тока). Для ряда приборных структур при нахождении электростатического потенциала требуется также решение уравнения Пуассона, хотя бы приближенное.

Интересный комбинированный метод использовался в работе [114] при изучении влияния магнитного поля на баллистический транспорт в периодически модулируемом (по ширине) канале в 2D электронном газе. Структура предварительно разбивалась на ячейки. Коэффициент прохождения всего канала вычислялся с применением метода матрицы рассеяния. В то же время матрица рассеяния для ячейки определялась путем численного решения двумерного уравнения Шредингера по методу конечных

* При более или менее строгом анализе этих структур учет интерференционных эффектов необходим.

элементов. Для расчета кондактанса использовался формализм Ландауэра.

Для вычисления коэффициентов прохождения, кондактанса, тока используются также формализмы функций Грина и функций Вигнера.

Возможно также выполнение расчетов для Т-структур в 2D электронном газе на основе аналогии между электронными и электромагнитными волнами и применении ранее разработанных алгоритмов и программ для вычисления характеристик резонаторов, включающих сочленения волноводов [115,116].

Важное расширение возможностей формализма Ландауэра – Буттикера было проведено в работе [117] для построения электрических моделей многотерминальных мезоскопических (баллистических) приборных структур для случая малого сигнала. В качестве примера был рассмотрен нанотранзистор с 2D электронным газом на GaAs/AlGaAs системе материалов. Для расчета коэффициентов прохождения и других параметров применялся метод матрицы рассеяния.

Рассмотрим упрощенные модели приборных структур, включающих непосредственно квантовые проволоки. Сразу же заметим, что многие методы, подходы, модели, отмеченные ранее, не только легко распространяются на случаи таких структур, но и могут использоваться или уже применялись для их расчета (некоторые рассмотренные ранее структуры допустимо, вообще говоря, интерпретировать в качестве простейших приборных структур). *Обращает на себя внимание то, что при построении упрощенных моделей используются более простые подходы, так как моделирование приборных структур, как правило, более сложно по сравнению с моделированием отдельных квантовых проволок или резисторов на их основе.* Хороший обзор ранних упрощенных моделей

приборных структур на эффектах квантовой интерференции дан в [4,5,118].

Основными на начальном этапе являлись хорошо апробированные ранее метод матрицы рассеяния и формализм Ландауэра – Буттикера [4]. Для вычисления матриц рассеяния используются различные методы, экономичность которых резко падает с увеличением длины и/или ширины прибора, однако в ряде случаев для этих целей может достаточно эффективно применяться метод граничных элементов [5]. В дальнейшем исследования с использованием метода матрицы рассеяния продолжались.

Так, в работе [119] анализировались ВАХ и частотные характеристики Т-транзисторов на четырех материалах (GaAs, InAs, InSb, Si) с экстремально малыми размерами поперечных сечений квантовых проволок. Принципиальное отличие используемой модели от модели работы [120] заключалось во введении зависимости эффективной массы от размеров квантовой проволоки, что связано с их экстремально малыми величинами. Оказалось, что это важно не только количественно, но и качественно при расчете электрических характеристик Т-транзисторов в рассматриваемых случаях. В последующей работе [121] модель была модифицирована на случай не только учета зависимости эффективной массы от геометрических размеров квантовой проволоки и концентрации примеси в ней, но и на случай рассеяния на удаленной заряженной примеси и на неоднородностях поверхности квантовой проволоки. В статье исследовались ВАХ и частотные характеристики однозатворных Т-транзисторов на восьми материалах, а именно: Si, Ge, GaAs, InAs, GaSb, InSb, GaP, InP. Для расчета тока с учетом влияния механизмов рассеяния применялась не формула Тсу – Есаки, а ее модификация. Было также проведено сопоставление с экспериментальными данными.

Упрощенная модель для расчета ВАХ и частотных характеристик интерференционного Т-транзистора с удаленным затвором в режиме баллистического транспорта была построена в работе [122] в рамках формализма функций Вигнера. Коэффициент прохождения в структуре при этом также вычисляется с помощью метода матрицы рассеяния.

Приборная структура на Y-пересечении квантовых проволок, которая может использоваться в качестве логических элементов, анализировалась (электрические свойства, коэффициенты прохождения и отражения) в работе [123] при различных температурах и смещениях. При моделировании применялся метод матрицы рассеяния (для многотерминального случая) и формализм Ландауэра–Буттикера. Так как сопротивление баллистических приборов определяется в основном контактами, то электростатический потенциал в структуре предполагается неизменным, а падения напряжения учитывались только на контактах. Это предположение позволяет упростить выражение для тока.

Метод матрицы рассеяния применялся в работе [124] для анализа интерферометра на двух квантовых проволоках, формируемых в квантовых ямах с помощью затворов. В приборе при этом выделяются секции, в каждой из которых самосогласованно решаются одномерное уравнение Шредингера и уравнение Пуассона.

Среди известных методов следует также отметить метод согласования мод, примененный в работе [125] для расчета коэффициентов прохождения и контактанса полупроводниковых Т-структуры, сужения и изгибов. При этом стационарное уравнение Шредингера решалось в приближениях эффективной массы и равенства нулю волновых функций на границах квантовой проволоки. Аналогичный подход использовался в работе [126] для исследования влияния магнитного поля на энергетические уровни квантовой точки на

L- и T-пересечениях квантовых проволок. Одним из главных недостатков данного упрощенного метода является возникающее бесконечное число линейных уравнений, и, к сожалению, в общем случае неясно каким количеством мод (уравнений) можно ограничиться.

В статье [127] метод согласования мод использовался для вычисления параметров рассеяния в рамках метода обобщенной матрицы рассеяния при расчете коэффициентов прохождения, контактанса и ВАХ сужений, изгибов, квантовых волноводов с периодически изменяющейся шириной. Рассмотрение осуществлялось на основе стационарного уравнения Шредингера в приближении эффективной массы. Транспорт в каждой из равномерных волноводных секций предполагался баллистическим, а падение потенциала – линейным. Одним из наиболее интересных результатов работы являлось установленное подобие характеристик двойного сужения и резонансно-туннельного диода (РТД). Метод согласования мод в сочетании с методом матрицы рассеяния применялся в работе [128] для моделирования схем на основе матриц пересекающихся квантовых проволок в одномодовом режиме функционирования.

В статье [129] метод согласования мод, но уже в сочетании с методом матриц переноса, использовался для вычисления коэффициентов прохождения и контактанса квантовых проволок с изменяющимся потенциалом и столбиками с одной стороны. При вычислении матрицы переноса секции (блока) структуры решается стационарное уравнение Шредингера в приближении эффективной массы, а потенциал границы квантовой проволоки считается бесконечно высоким. Отмечается, что в ряде случаев могут возникать проблемы*, так как необходимо инвертировать матрицы, которые становятся

* Аналогичные численные проблемы для метода матриц переноса отмечались в работе [130].

численно вырожденными. Сравнение данной модели с другими упрощенными моделями на основе формализма функций Грина [131] и обычного метода согласования мод показало хорошее соответствие результатов расчетов.

Подобный подход использовался в работе [132] для исследования точечного контакта с различной формой сужения, сформированного в 2D электронном газе. Модель позволяет учитывать рассеяние на примеси и рассчитывать коэффициент прохождения и кондактанс.

В работе [133] метод согласования мод был распространен на случай изгибов (углов) на квантовых проволоках с произвольными углами. Основное внимание было уделено расчету коэффициентов прохождения структур. Метод согласования мод с успехом использовался в [134] для расчета коэффициентов прохождения направленного ответвителя на двух квантовых проволоках. При этом решалось двумерное стационарное уравнение Шредингера.

Упрощенное решение нестационарного уравнения Шредингера использовалось для анализа переключателя на основе Y-разветвителя (перехода) на квантовых проволоках в работе [135]. Начальный волновой пакет задавался в виде распределения Гаусса. Более строгая модель была реализована в последующей работе [136] одного из авторов. В ней дополнительно с нестационарным уравнением Шредингера с использованием ряда приближений (Томаса – Ферми и др.) решалось уравнение Пуассона. Анализ кондактанса осуществлялся также для Y-разветвителя на квантовых проволоках, сформированного в 2D электронном газе с помощью затворов. Для вычисления тока применялась формула Буттикера для многотерминального случая с учетом спина.

Кольцо и ромбовидная рамка с ненулевой шириной проволоки полупроводника при воздействии однородного магнитного поля моделировались в работе [137]. Нестационарное уравнение

Шредингера с учетом силы Лоренца решалось с использованием метода разделения переменных. Вычислялись коэффициент прохождения, плотности заряда и тока. Показано, что для проволок конечной ширины сила Лоренца может сильно влиять на осцилляции Ааронова – Бома вплоть до их подавления.

Теоретическое и экспериментальное исследования проводились для модулированных квантовых проволок [138] и одномерных колец на кремниевых квантовых проволоках [139]. При вычислении коэффициента прохождения и контактанса применялась упрощенная δ -потенциальная модель на основе метода матриц переноса.

В целом, *методы согласования мод и матрицы рассеяния могут использоваться для моделирования достаточно разнообразных и сложных структур на квантовых проволоках*. Преимущества метода матрицы рассеяния по сравнению с методом матриц переноса заключаются в его устойчивости* и в удобстве при вычислении суммарного контактанса [118].

Баллистический транспорт в T-структуре на квантовой проволоке рассматривался в работе [140]. Двумерное нестационарное уравнение Шредингера решалось с использованием неявного метода и метода конечных разностей. Применялся также метод согласования мод. Системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) решались с использованием итерационного метода Гаусса – Зейделя. Модель применялась для малых смещений и температур. Вычислялись коэффициент прохождения, а по нему контактанс в рамках формализма Ландауэра – Буттикера. Рассчитывалась также спектральная плотность для контактанса. Установлено, что переходной процесс по контактансу характеризуется квазигармоническими осцилляциями.

* Для метода матриц переноса возникают проблемы устойчивости для длин, больших длины волны де Бройля электронов на поверхности Ферми [118].

Квантовый интерференционный транзистор на одномерном кольце анализировался в работе [141]. Для решения нестационарного уравнения Шредингера использовался неявный метод переменных направлений. Для вычисления тока применялась модифицированная формула Тсу – Есаки для 1D приборных структур.

Применяются и другие более специфические упрощения. Так, в работе [142] была проведена оценка коэффициента передачи для полевого направленного ответвителя на основе упрощенного решения стационарного уравнения Шредингера. При этом использовался специальный аналитический вид волновых функций и формы потенциала для системы двух квантовых проволок в случае их слабой связи между собой.

В рамках формализма волновых функций метод сильной связи применялся для построения упрощенной модели баллистического транспорта в пересечении проволок типа "крест", состоящих из малого числа цепочек [143]. Потенциал предполагался бесконечным вне решетки.

Метод сильной связи использовался для моделирования квантовых проволок со столбиком в виде цепочки туннельно-связанных квантовых точек [144], с кольцом, состоящим из квантовых точек или атомов [145], с двумя кольцами с двух сторон [146] в качестве резонаторов. Кондактанс при $T=0\text{K}$ вычислялся с помощью одноканальной формулы Ландауэра.

Туннельно-связанные две квантовые проволоки на GaAs с туннельным барьером из слоя AlGaAs в баллистическом режиме функционирования рассматривались в работе [147]. Использовался в рамках формализма волновых функций метод сильной связи для ограничивающего параболического потенциала квантовых проволок. Исследовалось влияние наклонного магнитного поля на кондактанс, термоэлектронную мощность и намагничиваемость.

Использование ряда специфических предположений позволило рассчитать коэффициенты прохождения и контактанс приборной структуры на квантовой проволоке с управляющим электродом на основе аналитического решения уравнения Шредингера в приближении эффективной массы в баллистическом режиме транспорта [148].

Упрощенная адиабатическая модель и экспериментальные результаты по контактансу квантовых проволок (с атомными размерами) между двумя металлами (точечный контакт) описаны в работе [149]. Модель основывается на решении уравнения Шредингера в приближении свободных электронов (баллистический транспорт) с учетом упругого рассеяния на границах. При расчете дискретных уровней поперечное сечение проволоки аппроксимируется прямоугольниками с нулевыми значениями волновых функций на границе. Атомная конфигурация металлической проволоки в процессе вытяжки, т.е. формирования контакта, находится в результате моделирования по методу молекулярной динамики*. Параллельно рассчитывается контактанс в рамках формализма Ландауэра–Буттикера. В работе [149] отмечается, что учет эволюции детальной атомной структуры в модели расчета контактанса точечного контакта ведет к улучшению ее согласования с экспериментальными данными.

Упрощенные модели формализма волновых функций разработаны для расчета ВАХ сужений [151 – 154]. При этом для анализа важным может быть учет влияния пространственного заряда даже с помощью аппроксимаций решения уравнения Пуассона [152 – 154].

Экспериментальное и теоретическое исследования контактанса Т-структуры с квантовой точкой в центре в 2D электронном газе

* Моделирование нанотехнологии изготовления, в частности, формы наноструктур не является предметом данной работы. Более подробно с этими вопросами, включая применение метода молекулярной динамики, можно ознакомиться в книге [150].

в баллистическом режиме функционирования при очень низких температурах проведены в работе [155]. Для вычисления коэффициента прохождения решалось двумерное уравнение Шредингера (в приближении нулевых волновых функций на краях волноводов). Электростатический потенциал находился путем решения уравнения Лапласа. Кондактанс вычислялся с помощью формулы Ландауэра для многоканального случая.

Формализм функций Грина в сочетании с методом сильной связи использовался для вычисления коэффициентов прохождения и отражения в квантовом интерференционном Т-транзисторе* [5,131,156] и многостолбиковых структурах [131]. При этом не учитывалось электрон-электронное взаимодействие, присутствие примесей и неупругое рассеяние.

Подобный подход применялся в работе [157] для вычисления кондактанса квантовых проволок, содержащих "щели" (множество сужений) и примесь, а также в работе [158] при расчете кондактанса металлических углеродных нанотрубок с дефектами и гетеропереходами на их основе. И в том и в другом случаях использовалась многоканальная формула Ландауэра.

В то же время в работе [159] показано как с помощью метода сильной связи в сочетании с рекурсивным вычислением функций Грина может находиться матрица рассеяния, и таким образом определяться коэффициенты прохождения и отражения трехтерминального перехода на квантовых проволоках в одномодовом режиме функционирования.

Важное влияние на приборные структуры часто оказывает магнитное поле. Так, кондактанс точечного контакта (узкое сужение) и последовательного соединения двух точечных контактов в случае влияния магнитного поля в баллистическом

* Авторами [156] он был назван "квантово-модуляционным транзистором" ("quantum-modulated transistor"), однако, автору кажется более удачным другое название – "квантовый интерференционный Т-транзистор" ("quantum interference T-structure transistor" [120]).

Режиме транспорта был исследован в работе [160] с применением многоканальной формулы Ландауэра. Для вычисления коэффициентов прохождения использовался формализм функций Грина при решении стационарного уравнения Шредингера, аппроксимируемого на прямоугольной решетке. При этом применялась параболическая зависимость для ограничивающего потенциала. С целью учета неупругого рассеяния в гамильтониан вводилась комплексная составляющая.

T-структура, состоящая из точечного контакта и квантовой проволоки, в случае учета влияния магнитного поля экспериментально и теоретически исследовалась в [161] при очень низких температурах. При моделировании баллистического транспорта в структуре использовалась двумерная решеточная модель, а для метода матриц переноса была предложена стабилизирующая итерационная процедура, обобщенная на случай применяемого в работе рекурсивного вычисления функций Грина. В модели возможно определение коэффициентов прохождения и отражения, волновых функций. Кондактанс вычисляется в рамках формализма Ландауэра – Буттикера по формуле для многоканального двухтерминального случая. Было показано, что даже для качественного согласования теории с экспериментом могут быть важны факторы, связанные с формой структуры, в частности, геометрия ее изгибов, вид ограничивающего потенциала.

Важные результаты были получены в работе [162], в которой было показано, что моделирование электронного транспорта (вычисление коэффициентов прохождения и отражения, локальной плотности состояний) в многотерминальной структуре в рамках метода сильной связи в сочетании с методом или матриц переноса, или матрицы рассеяния, или функций

* Необходимо, вообще говоря, использовать формулу для трехтерминального случая, однако, для рассматриваемой в статье ситуации она сводится к двухтерминальному случаю.

Грина может быть переформулировано путем сведения к эквивалентному более простому двухтерминальному случаю с последующим возможным применением известных формул. Подход допускает обобщение на многоканальный случай, необходимость учета электрон-электронных взаимодействий и случай ненулевых прикладываемых к приборным структурам смещений.

Формализм функций Грина в сочетании с методом сильной связи использовался для моделирования Т-структур на квантовых проволоках и приборных структур, состоящих из двух Т-структур [163]. При этом осуществлялось сведение к двухтерминальному случаю, а при вычислении кондактанса применялся формализм Ландауэра – Буттикера.

Баллистический транспорт электронов в переходах (внахлест) на квантовых проволоках с квадратным, прямоугольным и круглым поперечным сечениями изучался в работе [164]. Использовался формализм функций Грина в сочетании с моделями сильной связи при расчете кондактанса. Установлено минимальное количество узлов в моделях сильной связи достаточное для количественного или качественного описания кондактанса, что может быть важным для оптимизации моделей схем, состоящих из большого числа подобных переходов.

В работе [165] изучался баллистический транспорт в металлическом точечном контакте. На предварительном этапе осуществлялось моделирование его атомной структуры в результате вытяжки. Параллельно с моделированием этого процесса проводился расчет кондактанса контакта. Было также проведено сравнение расчетов по двум упрощенным моделям: непрерывной модели "желе" в рамках формализма волновых функций и дискретной модели в рамках метода сильной связи (формализм функций Грина). Установлено качественное отличие результатов расчета при оценке поведения кондактанса

с ростом температуры окружающей среды, что вызвано различающимися приближениями, сделанными в моделях.

Изучение механических и транспортных свойств точечных контактов, включающих атомы золота, а также атомы золота и примесь в виде атомов и молекул H, O, H₂, O₂, в процессе их деформации и разрушения осуществлялись в работе [166]. Для этих целей использовались методы теории функционала плотности. При вычислении кондактанса применялся формализм функций Грина.

Метод неравновесных функций Грина использовался в работе [167] для моделирования квантового точечного контакта с учетом влияния магнитного поля. Взаимодействие двух частиц было включено на уровне метода Хартри – Фока с помощью простой модели, описываемой δ -функцией. На границе предполагался бесконечно высокий потенциальный барьер, а выводные контакты считались полубесконечными. Для уменьшения вычислительных затрат применялся метод рекурсивного вычисления функций Грина. С целью расчета электронной плотности этот метод был модернизирован на рассматриваемый случай простой модели взаимодействия. Кондактанс вычислялся на основе формулы Ландауэра. Было показано, что для известной "0,7 аномалии" кондактанса метод теории функционала плотности и используемый метод не дают, к сожалению, правильной температурной зависимости.

Феноменологический способ учета дефазировки с целью упрощения предложенного ранее Даттой с соавторами приближенного метода (см. ранее) в рамках формализма неравновесных функций Грина был предложен в [168]. В его основе лежит простой феноменологический выбор для собственно-энергетической функции, описывающей процессы дефазировки и учитывающей фазовую релаксацию с или без релаксации импульса. Рассматриваются только упругие процессы в приборах 1D или 2D активными областями

(каналом) и двумя терминалами при малых прикладываемых смещениях.

В работе [169] был предложен метод квантовой передачи на границе (quantum transmitting boundary method) в сочетании с методом конечных элементов для численного решения уравнения Шредингера в приближении эффективной массы для квантовых приборов произвольной формы в двумерном случае. С его помощью определяются не только коэффициенты прохождения и отражения, но и волновые функции в области прибора. Потенциал при этом может быть произвольным в ней и должен быть задан. Наиболее существенные преимущества этого метода по сравнению с методом решения уравнения Дайсона для функции Грина на решетке, формируемой в методе сильной связи [131], заключаются в следующем: 1) он более эффективен для произвольной формы приборов и потенциалов; 2) при его использовании находятся непосредственно волновые функции в области прибора, что облегчает физический анализ. С помощью данного метода вычислялись коэффициенты прохождения квантового волновода с прямоугольным резонатором и квантового волновода в виде закругления.

Среди других моделей отметим следующие.

Модель жидкости Латтинджера использовалась для построения упрощенной модели квантовой проволоки с двумя контактами, в которой плотность электронов контролировалась затвором [170].

Контактанс для перехода в точке M полубесконечных квантовых проволок изучался в работе [171] при $T=0$ К. Переход и проволоки представлялись решеточной моделью. С помощью метода функционала ренормгруппы (см. ранее) получена упрощенная транспортная модель, которая далее исследуется для слабых и среднего уровня взаимодействий. Дополнительные исследования проведены с использованием приближения Хартри – Фока.

В цикле статей [172 – 174] было получено квантовое кинетическое уравнение, применимое для расчета различных электрофизических характеристик квантовых проволок и приборных структур на их основе. Исходя из него была выведена система моментных (балансных) уравнений для импульса и энергии [172]. С их помощью были получены упрощенные соотношения для частот релаксации импульса и температуры в квази 1D электронном газе (единичной квантовой проволоке), а также одно- и двухмерных решеток квантовых проволок [174].

Уравнения непрерывности для электронных плотностей в сочетании с упрощенными уравнениями для потенциалов барьеров и параллельного электрического поля использовались для анализа переходных процессов в двух взаимодействующих параллельных квантовых проволоках в статье [175].

С целью учета многоэлектронных эффектов на транспорт в баллистическом режиме в двумерных структурах на квантовых проволоках в работе [176] была предложена модель. Для расчета эффективного потенциала в структуре применялся метод теории функционала плотности в приближении локальной плотности (разложение Томаса – Ферми – Дирака – Вайцзеккера). Коэффициент прохождения далее вычисляется путем решения одноэлектронного уравнения Шредингера по методу конечных элементов. Модель использовалась для расчета коэффициентов прохождения T-структуры на квантовой проволоке.

Проводимость и спиновая поляризация квантового точечного контакта, формируемого в приборной структуре с расщепленным затвором на GaAs–AlGaAs гетероструктуре, исследовались в работе [177] с использованием теории функционала плотности в приближении локальной спиновой плотности с учетом обменных и корреляционных эффектов для различных напряжений на затворе, температур и длин. Потенциалы рассчитывались на основе упрощенных

соотношений. Этот же метод применялся ранее авторами для анализа проводимости и спиновой поляризации при $T=0$ К квантового точечного контакта с двумя квантовыми точками [178] и с полубесконечными резервуарами [179], а также влияния магнитного поля на проводимость бесконечной проволоки [180], формируемых в подобных структурах. С целью уменьшения числа уравнений задачи вместо дискретизации исходных уравнений на сетке в [177] использовалось разложение по базисным функциям. При решении СЛАУ применялся прямой метод, так как соответствующие матрицы не являются разреженными. Для вычисления проводимости используется формализм Ландауэра – Буттикера.

Применение упрощенной гидродинамической модели позволяет вычислять спектр плазмонов в квантовой проволоке с плавно изменяющейся плотностью (основного состояния). Модель также использовалась для расчета зонной структуры сверхрешетки в квантовой проволоке с синусоидальной модуляцией равновесной плотности носителей [181].

Оценки ВАХ и крутизны могут быть также проведены с помощью упрощенной модели диффузионно-дрейфового приближения для полевого транзистора с 1D каналом на квантовых проволоках или однослойных нанотрубках в не баллистическом режиме функционирования [182]. При этом устанавливается главное отличие таких приборных структур от планарных полевых транзисторов – более слабое экранирование носителей заряда в низкоразмерном случае.

Полезным для оценок иногда является упрощенное решение уравнения Пуассона [183], использование электростатических моделей [184].

Простая феноменологическая модель, построенная на основе теории линейного отклика, применялась в [185] для анализа контактанса точечного контакта в 2D газе.

К сожалению, в рассмотренных моделях приборных структур уравнение Пуассона не решается либо решается с упрощениями, как правило, серьезными. Для более детального анализа приборных структур на квантовых проволоках необходимы более строгие численные модели, включая самосогласованные. Рассмотрим их.

Одной из первых моделей, основанной на самосогласованном численном решении уравнений Шредингера и Пуассона, являлась работа [186]. В ней исследовались энергетические уровни в 1D канале в инверсионном слое МОП-структуры с несколькими затворами. Двумерное уравнение Шредингера решалось в приближении эффективной массы. Многочастичные эффекты не учитывались. Уравнения аппроксимировались с использованием метода конечных разностей, а возникающая полная система нелинейных алгебраических уравнений решалась с помощью метода Ньютона с демпфированием с приближенной матрицей Якоби. Вычисления проводились на IBM 3090/200 ЭВМ с векторным процессором. Типичное время одного самосогласованного решения было в диапазоне 20 – 45 минут.

Уровни энергии и распределение плотности электронов по модам в приборной структуре с квантовой проволокой на Si с затвором рассчитывались в работе [187]. При этом учитывалось электрон-электронное взаимодействие в приближении Хартри, решая в поперечном двумерном сечении самосогласованно уравнение Пуассона с тремя уравнениями Шредингера для долин кремния для различающихся областей. При линеаризации уравнения Пуассона использовалось приближенное соотношение для интеграла Ферми – Дирака $-1/2$ порядка. Конечно-разностная аппроксимация уравнений осуществлялась с помощью метода конечных элементов.

Двумерная (в поперечном сечении) комбинированная самосогласованная модель напряженных кремниевых квантовых

проволок, полученных селективным травлением в SiGe гетероструктурах, в приборных структурах с затворами предложена в [188]. Уравнение Пуассона аппроксимируется с помощью метода интегрирования на ячейке на неравномерной сетке и решается для всей приборной структуры. Электронные и дырочные концентрации получаются различным образом по областям прибора. В областях, где нет сильного пространственного квантования, используется полуклассическая плотность состояний и статистика Ферми – Дирака. В областях с сильным пространственным квантованием в двух измерениях плотность состояний находится посредством решения двумерного уравнения Шредингера. В работе применяется метод эффективной массы. Так как каждый минимум зоны проводимости характеризуется тремя различными эффективными массами в трех направлениях, то уравнение Шредингера необходимо решать три раза. Для вычисления концентрации дырок необходимо решать уравнение Шредингера для легких и тяжелых дырок. В областях с сильным пространственным квантованием в одном измерении плотность состояний находится с помощью решения одномерного уравнения Шредингера. Уравнения Шредингера и Пуассона после конечно-разностной аппроксимации решаются с использованием метода Ньютона – Рафсона в сочетании с упрощенной версией предиктор-корректор схемы. Собственные функции и собственные значения вычисляются только на первой итерации метода Ньютона – Рафсона, что позволяет повысить эффективность алгоритма расчета. Сходимость оценивается по приращению электростатического потенциала между полными итерациями. В работе анализировался энергетический спектр и плотности электронов по модам в зависимости от напряжения на затворе и ширины квантовых проволок.

Модель многомерных мезоскопических структур на основе численного решения нестационарного уравнения Шредингера со стохастическим членом для учета слабого электрон-фононного

взаимодействия была построена в [189]. Использовались одночастичное эффективной массы приближение, а также явный метод четвертого порядка при аппроксимации по времени. В качестве примеров был проведен учет рассеяния на полярных оптических фонах при расчете плотности вероятности для квантовой проволоки с полубесконечной плоскостью и кондактанса квантовой проволоки, прерываемой сужением к полубесконечной плоскости. Для расчета кондактанса применялся формализм Ландауэра – Буттикера.

В работе [190] показано, что квантовые логические элементы могут быть реализованы на связанных квантовых проволоках. Для иллюстрации этого численно решалось нестационарное уравнение Шредингера в двумерном случае с помощью метода Кранка – Никольсона.

Сопrotивление цепочек из 1–3 атомов между двумя полубесконечными металлическими электродами как при малых, так и больших смещениях анализировалось в работе [191]. Для расчетов использовалась самосогласованная модель, построенная в рамках формализмов функционала плотности и функций Грина. Дискретизированное уравнение Пуассона решалось с помощью метода Хокни.

Кондактанс точечных контактов, включающих атомы (цепочки) Al, Au и C, с металлическими электродами (Al и Au) анализировался в работе [192] в рамках формализма функций Грина. Для построения численной модели использовались методы теории функционала плотности, реализованные в стандартном комплексе программ квантовохимических расчетов GAUSSIAN 98, а полубесконечные объемные электроды представляются решеткой Бете. Отмечу, что адаптация известного программного обеспечения для целей расчета кондактанса точечных контактов с помощью формулы типа Ландауэра является достижением авторов. В работе показано, что очень важное влияние на результаты может оказывать

детальная атомная структура точечного контакта, особенно перехода между атомной цепочкой и электродом. При этом методы сильной связи и полуэмпирические методы могут не давать корректных результатов.

Таким образом, важно моделирование не только процесса формирования структуры контакта, но и его детальная атомная структура. *Принципиально важным является моделирование рассмотренного вида точечного контакта как системы электрод-молекула-электрод в целом* [192].

В работе [193] моделировались характеристики электронного транспорта (коэффициенты прохождения, ВАХ и др.) цепочек атомов углерода, золота, углеродные нанотрубки с точечными дефектами между полубесконечными металлическими электродами. Метод базируется на теории функционала плотности. Для учета влияния прикладываемых смещений используется формализм неравновесных функций Грина, а уравнение Пуассона после конечно-разностной аппроксимации решается с помощью быстрого преобразования Фурье. Для вычисления контактного сопротивления применялся формализм Ландауэра – Буттикера. Модель реализована в комплексе программ TRANSIESTA (модификация известного комплекса программ квантовохимических расчетов SIESTA). Было установлено, что падение напряжения в контакте очень чувствительно к электронной структуре электродов.

Модель контакта в рамках теории функционала плотности была предложена в статье [194]. Для электродов используются обобщенные волновые функции Блоха. После конечно-разностной аппроксимации уравнения Кона – Шема эффективно применяется метод согласования волновых функций на границе. Контактное сопротивление рассчитывается в рамках формализма Ландауэра – Буттикера. Модель продемонстрирована на примере вычисления контактного сопротивления четырех атомов Au между полубесконечными кристаллическими Au электродами.

Коэффициенты прохождения сужения и ВАХ двухбарьерной структуры между двумя полубесконечными контактами в 2D электронном газе, контролируемого с помощью напряжения на затворе, исследовались в работе [195]. Модель построена в рамках теории функционала плотности, формализма неравновесных функций Грина и приближения эффективной массы. Электростатический потенциал находился в предположении электронейтральности системы. Показана важность для повышения точности расчетов сгущения сетки пространственной дискретизации в методе конечных элементов на границах между центральной частью и контактами. Эта же модель использовалась для исследования влияния спонтанной спиновой поляризации на контактные токи точечных контактов для различных длин и ширин квантовых проволок, температур и прикладываемых смещений затвора, контролирующего 2D электронный газ [196].

Несмотря на перспективность использования методов теории функционала плотности, особенно для структур, содержащих небольшое количество атомов в активной области прибора, для них характерны отмеченные ранее недостатки. Анализ новых достижений в их разработке для расчета различных характеристик материалов и систем материалов привел к выводу группы известных специалистов Германии о большей перспективности для развития методов моделирования приборных наноструктур, в частности, на квантовых точках на основе огибающих (волновых) функций [197].

Одной из главных проблем численного моделирования полевых транзисторов на квантовых проволоках с затворами заключается в том, что, несмотря на преимущественно одномерный перенос вдоль проволоки (направление z), необходимо решение стационарного уравнения Шредингера в трехмерном случае для расчета энергетического спектра, так как он, строго говоря, зависит не только x и y (см. ранее рассмотренные модели), но и

z. После этого может быть реализована модель транспорта носителей заряда. Такой подход требует, к сожалению, существенных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ.

Экономичная комбинированная квазитрехмерная модель (в рамках приближения эффективной массы) транзисторов на кремниевых квантовых проволоках с цилиндрическим, треугольным и прямоугольным поперечным сечениями была предложена в работе [198]. Ее сущность заключается в следующем. На первом шаге решается трехмерное уравнение Пуассона для всего транзистора. Для его аппроксимации используется метод конечных элементов. На втором шаге решается двумерное уравнение(я) (в зависимости от степени "развязки") Шредингера в поперечном(ых) сечении(ях) транзистора (x, y) для того, чтобы определить энергетический спектр и собственные функции. Для аппроксимации также применяется метод конечных элементов. На третьем этапе решается транспортная задача в рамках формализма неравновесных функций Грина (см. подход Датты с соавторами) для нахождения плотности заряда электронов и тока. Шаги 1–3 повторяются до полной сходимости. Авторами было показано, что при использовании одного из способов "развязки" достаточно один раз решать двумерное уравнение Шредингера, что существенно повышает экономичность комбинированной модели и делает возможным ее применение для целей проектирования. Точность расчетов ВАХ при этом изменяется не существенно. С целью учета процессов рассеяния было предложено использовать упрощенный способ Буттикера (см. ранее), однако в разработанной модели "виртуальные 1D решетки" (контакты) распределяются вдоль всей квантовой проволоки. Показано, что для транзистора с цилиндрической квантовой проволокой диссипативные процессы понижают ток стока как в открытом, так и закрытом состояниях по сравнению

* Для упрощения трехмерного уравнения Шредингера к двумерному авторами было предложено три способа [198].

с баллистическим режимом работы, когда процессы рассеяния не учитываются. Различия при этом могут достигать ~30%.

Эта же модель была модифицирована на случай учета рассеяния на шероховатостях границы раздела Si/SiO₂ [199]. Было показано, что для транзистора на квантовой проволоке малого диаметра с окружающим затвором это рассеяние менее важно по сравнению с обычным планарным МОП-транзистором.

Повышение эффективности данной комбинированной квазитрехмерной модели может быть проведено с помощью методики статьи [200]. В ней рассматривались полевые транзисторы на квантовой проволоке с окружающими и тремя затворами в баллистическом режиме работы. Также использовалась самосогласованная модель в приближении эффективной массы на основе численного решения трехмерного уравнения Пуассона и метода неравновесных функций Грина для описания одномерного транспорта, а в поперечных прямоугольных сечениях двумерные уравнения Шредингера решались с помощью эффективной методики разделения переменных путем введения усредненных по каждому из измерений потенциалов. Исток и сток считались полубесконечными проволоками.

В целом, такие приборы могут иметь преимущества перед традиционными МОП-транзисторами вследствие усиления контроля затворами короткоканальных эффектов [200].

Полевой транзистор с квадратной кремниевой квантовой проволокой с окружающими затворами в баллистическом режиме анализировался в работе [201]. Зонная структура рассчитывалась с помощью sp^3 модели сильной связи. В остальном использовалась подобная изложенной выше комбинированная квазитрехмерная модель. Так, применялось трехмерное уравнение Пуассона, а для решения трехмерного уравнения Шредингера использовалась методика разделения по модам. Одномерный транспорт вдоль проволоки для каждой из

подзона описывался по методу неравновесных функций Грина. В работе показано, что приближение эффективной массы может быть неудовлетворительно (при вычислении токов приборов) для малых поперечных сечений проволок. В то же время в статье [200] отмечается, что этот вывод подтверждается исследованиями для площадей поперечного сечения проволок около $5 \times 5 \text{ нм}^2$, но, подстраивая другие параметры прибора, приближение эффективной массы может применяться и для меньших площадей.

Полевой транзистор на цилиндрической кремниевой квантовой проволоке с окружающим затвором моделировался в работе [202]. Модель основывалась на методе неравновесных функций Грина. Для определения кулоновского вклада в потенциал самосогласованно решалось уравнение Пуассона. При этом учитывалось рассеяние на примесях в рамках самосогласованной борновской аппроксимации. С помощью модели анализировались ток, плотность носителей заряда и контактанс.

Такой же структуры транзистор при $T=300\text{К}$ исследовался в работе [203] с помощью модели, основанной на решении трехмерного уравнения Пуассона и метода неравновесных функций Грина. Моделировались ВАХ и шумовые характеристики.

Самосогласованная модель, основанная на решении уравнения Шредингера с применением метода сильной связи и трехмерного уравнения Пуассона с использованием метода конечных элементов, для транзистора с тремя затворами* на Si квантовой проволоке была описана в [204]. Квадратное сечение проволоки бралось малым $2,1 \times 2,1 \text{ нм}^2$ ввиду ограничений по вычислительным ресурсам. В работе было исследовано и показано важное влияние различных кристаллографических

* Точнее тремя затворами, объединенными в один затвор ("triple-gate"), т. е. тройным затвором.

ориентаций ([100], [110], [111] и [112]) для канала и шероховатостей на границе раздела Si/SiO₂ на ВАХ транзистора и его пороговое напряжение.

В работе [205] предложена самосогласованная трехмерная модель, которая использовалась для анализа сопротивления канала на квантовой проволоке МОП-транзистора на КНИ с тремя затворами. Для моделирования транспорта использовался метод, описанный в статье [206]. Эта высокоэффективная процедура предложена для специального случая кристаллографической ориентации слоя Si в приборной структуре в режиме баллистического транспорта. Предполагается также постоянство эффективных масс на границе раздела Si/SiO₂. Конечно-разностная аппроксимация трехмерного уравнения Шредингера проводится на равномерной по x, y и z сетке. Получаемую дискретную форму уравнения Шредингера удается в результате представить через матрицы переноса и искомые решения для волновых функций поперечных слоев структуры. Для устранения главного недостатка процедуры решения, связанного с перемножением большого числа матриц (см. ранее), применяется специальная стабилизирующая итерационная методика [161]. Для вычисления тока, исходя из вычисленных коэффициентов прохождения, используется формула Ландауэра для конечных температур. В работе [205] дискретная форма уравнения Шредингера была представлена в виде уравнения типа Дайсона. Это позволило учитывать рассеяние с помощью собственно-энергетической части в рекурсивной процедуре. В статье проведено исследование слабого рассеяния на акустических и оптических фононах при переходе от баллистического к диффузионному транспорту в транзисторе. В статье [207] эта же модель была модифицирована на случай учета неупругого рассеяния. Для этого добавляется комплексная составляющая в гамильтониан. Кроме того, при расчетах использовалась неравномерная сетка. Было показано сильное влияние

дискретности заряда немногочисленных для подобных структур примесных атомов на интерференционные эффекты в на квантовой проволоке МОП-транзисторе на КНИ с тремя затворами (возникают вихри электронного потока и др.), а, как следствие, – на ВАХ (появляются выбросы тока на характеристиках) и его параметры, в частности, пороговое напряжение. Дополнительное (усложняющее) влияние на эти процессы оказывает неупругое рассеяние. Все расчеты осуществлялись при $T=300\text{K}$.

Замечу, что более простой вариант этой модели использовался ранее [208] для моделирования структуры с квадратной квантовой точкой (резонатор) с терминалами в виде полубесконечных квантовых проволок. Были исследованы флуктуации кондактанса и сгущения волновых функций в квантовой точке в случае приложения магнитного поля при нулевой и низкой температурах. Оказалось, что амплитуда флуктуаций кондактанса падает экспоненциально в зависимости от величины $1/\tau_\phi$, τ_ϕ – время неупругого рассеяния, что хорошо согласуется с экспериментом. С ростом же температуры согласование теории и эксперимента в целом ухудшается. В статье [209] исследовался случай квадратной квантовой точки с двумя точечными контактами.

Двухкубитовый прибор моделировался в работе [210]. Кубит в верхней плоскости формировался из двух параллельных квантовых проволок в 2D газе на гетероструктуре GaAs/AlGaAs, функционирующих в баллистическом режиме и связанных двумя переключками друг с другом. Кубит в нижней плоскости также формировался в 2D газе и включал две туннельно-связанные квантовые точки. Кроме того, моделировались верхний кубит отдельно и более простая H-структура на квантовых проволоках. Формализм волновых функций использовался для вычисления электронных состояний на первом этапе, а на втором этапе применялись формализмы

функций Грина и Ландауэра – Буттикера для вычисления тока. К сожалению, при анализе не учитывались другие возможные источники декогеренции за исключением рассматриваемого кулоновского взаимодействия между кубитами. И несмотря на это, только самосогласованное решение уравнения Шредингера и Пуассона на первом этапе занимало около двух дней для самой современной персональной техники [210].

Среди других моделей следует отметить подход Обухова И.А. с соавторами [211], примененный для моделирования резисторов и ряда приборов на квантовых проволоках, а также резонансно-туннельных диодов (модель была рассмотрена в [13]).

Остановимся на некоторых моделях других структур.

Предложение (теоретическое) нового перспективного элемента ИС будущих поколений – "реле атома" ("atom relay") на основе квантовой проволоки (цепочки атомов, "atom wire"), переключаемого атома и переключающего затвора с общими размерами менее 10 нм проанализировано в работе [212]. Моделирование переноса электрона (стационарного тока) в этом механическом реле, в логических элементах и в элементах памяти на его основе было проведено с помощью метода сильной связи.

Теоретическое исследование, но уже динамики такого же атомного переключателя ("atomic switch"), состоящего фактически из двух перпендикулярных цепочек атомов кремния, было описано в статье [213] и осуществлено с помощью метода молекулярной динамики в сочетании с методом из первых принципов и с теорией функционала плотности. Для вычисления псевдопотенциала решалось полевое уравнение Дирака. При анализе, к сожалению, не учитывались тепловые флуктуации атомов и влияние подложки.

В целом, эти работы показали то, что "границы между механикой, электроникой и оптикой размываются в наноструктурных динамических системах" [213].

Простой анализ показывает, что в приборных структурах на квантовых проволоках переносить ток может небольшое число электронов, фактически единицы (см. далее). Поэтому в таких приборах могут быть важны и одноэлектронные эффекты*, для которых характерна возможность влияния на транспорт нецелых частей элементарного заряда [214]. По этим причинам в работе [215] была построена одномерная самосогласованная модель со специальным видом уравнения Пуассона и расширением формализма функций Грина на этот важный случай. Модель использовалась для моделирования (локальной плотности состояний, среднего числа электронов, ВАХ) 1D полевого транзисторами с окружающим затвором (коаксиальная структура) с барьером Шоттки в качестве инжектора при температуре $T=77\text{K}$.

В заключение отметим, что ряд положений предыдущих глав книги справедливы и для рассмотренного типа приборных структур нанoeлектроники. Поэтому здесь лишь выделим наиболее характерные выводы для квантовых проволок и приборных структур на их основе, а именно: 1) основными при разработке моделей являются формализмы волновых функций и функций Грина; 2) формализм функций Вигнера перспективен для использования в сочетании с методами Монте-Карло; 3) большую перспективу представляет построение моделей, описывающих электрофизические и электрические характеристики структур; 4) учитывая, по существу, гибридный характер приборных структур на квантовых проволоках целесообразно для повышения адекватности и экономичности моделирования построение комбинированных

* То есть такие приборные структуры становятся по существу комбинированными (гибридными) [1].

моделей, например, основанных на применении формализмов волновых функций и функций Грина; 5) многое предстоит сделать по разработке методик идентификации параметров моделей с целью их согласования с экспериментальными данными, а также по повышению их экономичности.

В целом, рассмотрение проблем и принципов физики и моделирования данного типа приборных структур наноэлектроники еще более убеждает в возросшей важности, в казалось бы на первый взгляд, деталей.

7.4. Перспективы приборов на квантовых проволоках

Согласно последним прогнозам [216] – большие. Кроме выделенных в [1] причин, скорость переключения приборов на квантовых проволоках традиционно оценивается в терагерцовом диапазоне с их плотностью около $5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ и низким энергопотреблением. В работе [217] было проведено теоретическое сравнение резонансно-туннельного транзистора, интерферометра Ааронова – Бома, Y-переключателя и полевых транзисторов в предположении, что энергия переключения достигает фундаментального предела, в частности теплового. Оценки показали, что крутизна у интерферометра Ааронова – Бома и Y-переключателя может быть значительно выше, чем у полевого транзистора.

Несмотря на большой потенциал рассматриваемого типа приборов, на пути создания высокоинтегрированных систем на их основе необходимо преодолеть значительные и часто взаимосвязанные проблемы технологии их изготовления и определяемые электрическими характеристиками.

К технологическим проблемам можно отнести следующие [11, 118, 216, 218, 219]. Для достижения комнатных температур функционирования квантовые проволоки должны быть очень

малых ширин (около 10 нм) и с хорошо контролируемыми свойствами. Особые требования также предъявляются к чистоте материалов проволок, контактам, процессам легирования и размещения проволок, материалам диэлектриков и затворов.

Не менее серьезными являются проблемы, связанные с электрическими характеристиками [11, 118, 216, 218, 219]. Высокое сопротивление, необходимость согласования импедансов приводят к неизбежному ограничению частотного диапазона. При этом для приборов характерны очень маленькие токи и невысокое усиление. Существенными являются и проблемы шумов и статистического разброса параметров структур, чему способствует чрезвычайно высокая чувствительность электрических характеристик к вариации конструктивно-технологических параметров приборов данного типа. Для ослабления отмеченных проблем предложено параллельное соединение ряда квантовых проволок (приборов), что, естественно, приводит к дальнейшему усложнению технологии.

В целом, на начальном этапе разработки перспективы приборов на квантовых проволоках выглядели весьма сомнительными (см., например, [11, 118, 218]). Современные достижения в нанотехнологии все более и более убеждают в обратном.

Хороший обзор стремительных и впечатляющих успехов в разработке технологий изготовления полупроводниковых квантовых проволок и приборов на их основе дан в статьях [220, 221]. Приведу цитату из одного из обзоров.

"Нанопроволоки и нанотрубки интенсивно исследуются в качестве компонентов ряда наномасштабных приборов. Полупроводниковые нанопроволоки особенно привлекательны в этом смысле, так как они могут быть синтезированы в монокристаллической форме с прецизионно контролируемыми

* В этой цитате отсутствуют только многочисленные ссылки на литературу, подтверждающую текст.

структурами, диаметрами и длинами, химическими составами и примесными/электронными свойствами, используя катализированный нанокластерами паро-жидко-твердотельный процесс выращивания. Этот контролируемый при росте нанопроволок процесс позволяет "снизу-вверх" сборку интегрированных электронных и фотонных приборов, включающих нанометрового масштаба полевые транзисторы, диоды, биполярные транзисторы, бистабильные переключающие элементы, логические ИС, дешифраторы, светодиоды, лазеры и сенсоры. Однако большинство исследований по нанопроволокам и нанотрубкам ограничиваются демонстрацией единичных или небольшого числа наноприборов..." [220]. Сюда же может быть добавлено и ряд других технологических методов [221] и приборов, в частности РТД, гетероструктурные полевые транзисторы, одноэлектронные приборы, термоэлектронные приборы, солнечные элементы и др. [221].

В то же время "транзисторы на кремниевых квантовых проволоках с окружающим затвором рассматриваются в настоящее время как многообещающие альтернативы планарным МОП полевым транзисторам вследствие лучшего контроля напряжением затвора каналов и, таким образом, снижением различных короткоканальных эффектов" [222]. Поэтому не удивительно, что подобного вида приборные структуры в прогнозе 2007 года [216] анализировались уже в подразделе: "Расширения к КМОП: Низкоразмерные структуры." Более того, в этом же прогнозе они рассматриваются как наиболее перспективные элементы вследствие приближения к пределу уменьшения длины затвора в КМОП-технологии (ориентировочно он будет достигнут к 2022 году и составит около 5 нм).

В работе [220] описан общий и эффективный подход для иерархической организации блоков квантовых проволок в матрицы интегрированных приборов на относительно больших

участках. Подход применим и для кремниевых квантовых проволок. Возможно формирование и большого числа переходов на пересечениях проволок (архитектура ИС на пересечениях), а также матриц полевых транзисторов на единичных кремниевых квантовых проволоках р-типа, которые по своим характеристикам конкурентоспособны современным планарным кремниевым элементам [220]. Разработаны и другие технологические подходы к решению подобных задач [221]. А это уже возможные пути к созданию высокоинтегрированных информационных систем.

Нельзя не отметить оригинальную и перспективную функционально-интегрированную приборную структуру, которая была сконструирована и экспериментально исследована в работе [223]. Она представляет собой n-типа и р-типа с общим каналом на кремниевой нелегированной квантовой проволоке МОП-транзисторы. В зависимости от знака прикладываемого к затвору структуры смещения реализуется либо n-типа, либо р-типа полевой транзистор. Уменьшая толщину квантовой проволоки, могут быть аналогичным образом реализованы одноэлектронный либо однодырочный транзистор, обладающие хорошими электрическими характеристиками при комнатной температуре. Важно также отметить, что предложенная технология совместима с КМОП-технологией.

Что же касается углеродных нанотрубок, то, несмотря на перспективность их возможного использования для построения высокоинтегрированных информационных систем [216, 224 – 227], приведу цитату из работы [228], которая, по-видимому, наиболее верно отражает состояние дел и на сегодняшний день. "... все приборы, важные для технологии микроэлектроники, такие как межсоединения и переключатели, уже были реализованы с углеродными нанотрубками. Некоторые реализации даже превосходят современную кремниевую технологию. Особенно многообещающей выглядит трехмерная

интеграция. Несмотря на то, что проблема размещения нанотрубки еще пока не решена удовлетворительно, введение методов биологической сборки может открыть новые и экономически выгодные методы для производства сложных схем на углеродных нанотрубках".

Список литературы к главе 7

1. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. IV. Квантовомеханические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24–32.
2. Washburn S., Webb R. A. Aharonov – Bohm effect in normal metal. Quantum coherence and transport // Advances in Physics. 1986. V. 35. N 4. P. 375 – 422.
3. Webb R. A., Washburn S. Quantum interference fluctuations in disordered metals // Physics Today. 1988. V. 41. N 12. P. 46 – 53.
4. Datta S. Quantum devices // Superlattices and Microstructures. 1989. V. 6. N 1. P. 83 – 93.
5. Nanostructure Physics and Fabrication: Proc. of the International Symposium. College Station, Texas, 13 – 15 March, 1989 / Ed. by M.A. Reed, W.P. Kirk. San Diego: Academic Press. 1989. 517 p.
6. Capasso F., Datta S. Quantum electron devices // Physics Today. 1990. Feb. P. 74 – 82.
7. Лускинович П.Н. Метод синтеза квантовых интегральных элементов и схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 3. С. 8 – 11.
8. Aharonov Y., Bohm D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory // Phys. Rev. (Sec. Ser.). 1959. V. 115. N 3. P. 485 – 491.

9. Шарвин Д.Ю., Шарвин Ю.В. Квантование магнитного потока в цилиндрической пленке из нормального металла // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 34. Вып. 5. С. 285 – 288.
10. Альтшулер Б.Л., Аронов А.Г., Спивак Б.З. Эффект Ааронова–Бома в неупорядоченных проводниках // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 33. Вып. 2. С. 101 –103.
11. Thornton T.J. Mesoscopic devices // Rep. Prog. Phys. 1994. V. 57. P. 311 – 364.
12. Петрашов В.Т. Квантовый электронный транспорт в металлических наноструктурах // Микроэлектроника. 1994. Т. 23. Вып. 5. С. 3 – 16.
13. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанозлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 3. С. 57 – 70.
14. Обухов И.А. Приборы на основе квантовых проводов: перспективы и проблемы // Материалы 6-й Международной Крымской Микроволновой Конференции, КрыМиКо'96, 1996, Севастополь, Крым, Украина. С. 55 – 64.
15. Erdős P., Herndon R.C. Theories of electrons in one-dimensional disordered systems // Advances in Physics. 1982. V. 31. N 2. P. 65 – 163.
16. Tartakovski A.V. Theory of mesoscopic transport in disordered wires // Phys. Rev. B. 1995. V.52. N 4. P. 2704 – 2722.
17. Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастур Л.А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука. 1982. 360 с.
18. Имри Й. Введение в мезоскопическую физику. М.: Физматлит. 2004. 304 с.
19. Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос. 2000. 248 с.

20. Anderson P.W. Absence of diffusion in certain random lattices // *Phys. Rev.* 1958. V. 109. N 5. P. 1492 – 1505.
21. Абрикосов А.А., Рыжкин И.А. Электрические свойства одномерных металлов // *ЖЭТФ*. 1976. Т. 71. Вып. 9. С. 1204 – 1224.
22. Вопросы квантовой теории необратимых процессов / Сб. статей, пер. с англ. Под ред. В.Л. Бонч-Бруевича. М.: Изд. Иностранной литературы. 1961. 365 с.
23. Landauer R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1957. V. 1. July. P. 223 – 231.
24. Landauer R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices // *Philos. Mag.* 1970. V. 21. N 172. P. 863 – 867.
25. Рёпке Г. Неравновесная статистическая механика. М.: Мир. 1990. 320 с.
26. Landauer R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 3. P. 306 – 316.
27. Büttiker M. Four-terminal phase-coherent conductance // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 57. N 14. P. 1761 – 1764.
28. Büttiker M. Role of quantum coherence in series resistors // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 33. N 5. P. 3020 – 3026.
29. Büttiker M. Symmetry of electrical conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 3. P. 317 – 334.
30. Anderson P.W., Thouless D.J., Abrahams E., Fisher D.S. New method for a scaling theory of localization // *Phys. Rev. B.* 1980. V. 22. N 8. P. 3519 – 3526.
31. Anderson P.W. New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a "wire" and possible extension to higher dimensionality // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 23. N 10. P. 4828 – 4836.

32. Azbel M.Ya. Quantum δ -dimensional Landauer formula // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1981. V. 14. P. L225 – L 230.
33. Fisher D.S., Lee P.A. Relation between conductivity and transmission matrix // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 23. N 12. P. 6851 – 6854.
34. Langreth D.C., Abrahams E. Derivation of the Landauer conductance formula // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 24. N 6. P. 2978 – 2984.
35. Büttiker M. Coherent and sequential tunneling in series barriers // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 1. P. 63 – 75.
36. Sakaki H. Scattering suppression of high-mobility effect of size-quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1980. V. 19. N 12. P. L735 – L738.
37. Petroff P.M., Gossard A.C., Logan R.A., Wiegmann W. Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties // *Appl. Phys. Lett.* 1982. V. 41. N7. P. 635 – 638.
38. Lee J., Spector H.N. Impurity-limited mobility of semiconducting thin wire // *J. Appl. Phys.* 1983. V. 54. N7. P. 3921 – 3925.
39. Lee J., Vassel M.O. Low-field electron transport in quasi-one-dimensional semiconducting structures // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1984. V. 17. P. 2525 – 2535.
40. Leburton J.P. Size effects on polar optical phonon scattering of 1-D and 2-D electron gas in synthetic semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1984. V. 56. N 10. P. 2850 – 2855.
41. Fishman G. Phonon-limited mobility in quasi-one-dimensional semiconductor // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 36. N 14. P. 7448 – 7456.
42. Lee J., Spector H.N. Dielectric response function for a quasi-one-dimensional semiconducting system // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 57. N 2. P. 366 – 372.
43. Стрoшио М., Дутта М. Фононы в наноструктурах. М.: Физматлит. 2005. 320 с.

44. Mickevičius R., Mitin V.V., Kim K.W., Strocio M.A., Iafate G.J. Electron intersubband scattering by confined and localized phonons in real quantum wires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1992. V. 4. P. 4959 – 4970.
45. Vagner P., Moško M. Electron-impurity scattering in free-standing quantum wires: Effect of dielectric confinement // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 81. N 7. P. 3196 – 3200.
46. Ghoshal A., Mitra B., Ghatak K.P. On the effective electron mass in quantum well wires of ternary chalcopyrite semiconductors // *Il Nuovo Cimento*. 1990. V. 12D. N 7. P. 891 – 899.
47. Ghoshal A., Chattopadhyay D., Bhattacharyya A. One-dimensional hot-electron transport in quantum-well wires of polar semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1986. V. 59. N 7. P. 2511 – 2513.
48. Chattopadhyay D., Bhattacharyya A. Monte Carlo calculations of transport parameters of one-dimensional hot electrons in quantum-well wires // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 12. P. 7105 – 7107.
49. Осадчий В.М. Исследование методом Монте-Карло нестационарного переноса горячих электронов в квантовых проволоках // *Физика и техника полупроводников*. 1994. Т. 28. Вып. 9. С. 1636 – 1644.
50. Борздов В.М., Комаров Ф.Ф. Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Минск. БГУ. 1999. 235 с.
51. Борздов В.М., Жевняк О.Г., Комаров Ф.Ф., Галенчик В.О. Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники. Минск. БГУ. 2007. 175 с.
52. Briggs S., Leburton J.P. Size effects in multisubband quantum wire structures // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 38. N 12. P. 8163 – 8170.
53. Mickevičius R., Mitin V., Strocio M.A., Dutta M. Oscillations of photoconductivity and negative absolute conductivity in quantum wires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1993. V. 5. P. 2233 – 2254.

54. Ando Y., Cappy A. Ensemble Monte Carlo simulation for electron transport in quantum wire structures // J. Appl. Phys. 1993. V. 74. N 6. P. 3983 – 3992.
55. Telang N., Bandyopadhyay S. Effects of magnetic field on hot electron transport in quantum wires // Appl. Phys. Lett. 1995. V. 66. N 13. P. 1623 – 1625.
56. Jacoboni C., Brunetti R., Bordone P., Bertoni A. Quantum transport and its simulation with the Wigner-function approach // Int. J. of High Speed Electron. and Syst. 2001. V. 11. N 2. P. 387 – 423.
57. Nedjalkov M., Vasileska D., Ferry D.K., Jacoboni C., Ringhofer C., Dimov I., Palankovski V. Wigner transport models of the electron-phonon kinetics in quantum wires // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. N 3. P. 035311-1–18.
58. Sano N., Natori K. Drift-velocity degradation caused by an electric field during collision in one-dimensional quantum wires // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. N 12. P. R8325 – R8328.
59. Rossi F., Poli P., Jacoboni C. Weighted Monte Carlo approach to electron transport in semiconductors // Semicond. Sci. Technol. 1992. V. 7. P. 1017 – 1035.
60. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Игнатенко С.А., Королев А.В., Новик Е.Г., Рогачев А.И. Система моделирования нанозлектронных приборов – NANODEV // Микроэлектроника. 2003. Т. 32. № 2. С. 124 – 133.
61. Абрамов И.И., Строгова А.С., Рогачев А.И. Моделирование квантовых проволок на различных материалах с использованием формализма функций Вигнера // "Актуальные проблемы твердотельной электроники и микроэлектроники". Труды Девятой Междунар. НТК. Ч.1. Дивноморское, Россия, 12–17 сентября 2004 г. С. 29 – 32.

62. Yamada T., Sone J. High-field electron transport in quantum wires studied by solution of the Boltzmann equation // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 9. P. 6265 – 6271.
63. Briggs S., Leburton J.P. Breakdown of the linear approximation to the Boltzmann transport equation in quasi-one-dimensional semiconductors // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39. N 11. P. 8025 – 8028.
64. Bordone P., Pascoli M., Brunetti R., Bertroni A., Jacoboni C., Abramo A. Quantum transport of electrons in open nanostructures with the Wigner-function formalism // *Phys. Rev. B*. 1999. V. 59. N 4. P. 3060 – 3069.
65. Jin S., Fischetti M. V., Tang T. Modeling of electron mobility in gated silicon nanowires at room temperature: Surface roughness scattering, dielectric screening, and band nonparabolicity // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 102. N 8. P. 083715-1–14.
66. Arora V.K. Quantum size effect in thin-wire transport // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 23. N 10. P. 5611 – 5612.
67. DasSarma S., Xie X.C. Calculated transport properties of ultrasubmicrometer quasi-one-dimensional inversion lines // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 35. N 18. P. 9875 – 9878.
68. Warren A.C., Antoniadis D.A., Smith H.I. Quasi one-dimensional conduction in multiple, parallel inversion lines // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 56. N 17. P. 1858 – 1861.
69. Datta S., Cahay M., McLennan M. Scatter-matrix approach in quantum transport // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 36. N 10. P. 5655 – 5658.
70. Cahay M., McLennan M., Datta S. Conductance of an array of elastic scatterers: A scattering-matrix approach // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 17. P. 10125 – 10136.
71. Vasilopoulos P., Peeters F.M. Electrical transport in a quantum wire: Influence of one- and two-body interactions // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 15. P. 10079 – 10087.

72. Bagwell P.F. Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 41. N 15. P. 10354 – 10371.
73. Berthod C., Gagel F., Maschke K. dc transport in perturbed multichannel quantum wires // *Rhys. Rev. B*. 1994. V. 50. N 24. P. 18299 – 18311.
74. Tamura H., Ando T. Conductance fluctuations in quantum wires // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 44. N 4. P. 1792 – 1800.
75. Nanostructures and Quantum Effects: Proc. of JRDC Int. Symp., Tsukuba, Japan, 17-18 Nov., 1993 / Ed. by H. Sakaki, H. Noge. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag. 1994. 356 p.
76. Takagaki Y., Ferry D.K. Conductance of quantum waveguides with a rough boundary // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1992. V. 4. P. 10421 – 10432.
77. Dacal L.C.O., Damião A.J., de Andrada e Silva E.A. Quantum ballistic conductance of quasi-two-dimensional and three-dimensional semiconductor nanowires // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 15. P. 155330-1–6.
78. Khomyakov P.A., Brocks G., Karpan V., Zwierzycki M., Kelly P.J. Conductance calculations for quantum wires and interfaces: Mode matching and Green's functions // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 035450-1–13.
79. Tekman E., Bagwell P. F. Fano resonances in quasi-one-dimensional electron waveguides // *Phys. Rev. B*. 1993. V. 48. N 4. P. 2553 – 2559.
80. Неволин В.К. Q1D-проводники при конечных температурах // *Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника*. 1991. Вып. 6. С. 56 – 58.
81. Баграев Н.Т., Иванов В.К., Клячкин Л.Е., Маляренко А.М., Шелых И.А. Баллистическая проводимость квантовой

проволоки при конечных температурах // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 34. Вып. 6. С.737 – 741.

82. Enss T., Meden V., Andergassen S., Barnabé-Thériault X., Metzner W., Schönhammer K. Impurity and correlation effects on transport in one-dimensional quantum wires // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. N 15. P. 155401-1 – 19.

83. Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. Вып. 4. С.1515 – 1527.

84. Dolcini F., Trauzettel B., Safi I., Grabert H. Transport properties of single-channel quantum wires with an impurity: Influence of finite length and temperature on average current and noise // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. N 16. P. 165309-1 – 26.

85. Ponomareva I., Menon M., Srivastava D., Andriotis A.N. Structure, stability, and quantum conductivity of small diameter silicon nanowires // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. N 26. P. 265502-1 – 4.

86. Lherbier A., Persson M.P., Niquet Y.-M., Triozon F., Roche S. Quantum transport length scales in silicon-based semiconducting nanowires: Surface roughness effects // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. N 8. P. 085301-1 – 5.

87. Ciraci S., Buldum A., Batra I.P. Quantum effects in electrical and thermal transport through nanowires // J. Phys.: Condens. Matter. 2001. V. 13. P. R537 – R568.

88. Pecchia A., Di Carlo A. Atomistic theory of transport in organic and inorganic nanostructures // Rep. Prog. Phys. 2004. V. 67. N 8. P. 1497 – 1561.

89. Nanoscience. Nanotechnologies and Nanophysics / Ed. by C. Dupas, P. Houdy, M. Lahmani. Berlin–Heidelberg–New York: Springer-Verlag. 2007. 823 p.

90. Datta S. Steady-state quantum kinetic equation // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 8. P. 5830 – 5833.

91. Datta S. A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1990. V. 2. P. 8023 – 8052.
92. McLennan M.J., Lee Y., Datta S. Voltage drop in mesoscopic systems: A numerical study using a quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 43. N 17. P. 13846 – 13884.
93. Цидильковский И.М. Зонная структура полупроводников. М.: Наука. 1978. 328 с.
94. Кацнельсон А.А., Степанюк В.С., Фарберович О.В., Сас А. Электронная теория конденсированных сред. М.: МГУ. 1990. 240 с.
95. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. 2001. 519 с.
96. Todorov T.N. Tight-binding simulation of current-carrying nanostructures // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2002. V. 14. P. 3049 – 3084.
97. Теория неоднородного электронного газа / Под. ред. С. Лундквиста, Н. Марча. М.: Мир. 1987. 400 с.
98. Kurth S., Stefanucci G., Almladh C.-O., Rubio A., Gross E.K.U. Time-dependent quantum transport: A practical scheme using density functional theory // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 035308-1 – 13.
99. Lü J.T., Wang J.-S. Coupled electron and phonon transport in one-dimensional atomic junctions // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 76. N 16. P. 165418-1 – 9.
100. Rurali R., Lorente N. Metallic and semimetallic silicon <100> nanowires // *Phys. Rev. Lett*. 2005. V. 94. N 2. P. 026805-1 – 4.
101. Markussen T., Rurali R., Brandbyge M., Jauho A.-P. Electronic transport through Si nanowires: Role of bulk and surface disorder // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. N 24. P. 245313-1 – 11.

102. Agarwal A., Sen D. Conductance of quantum wires: A numerical study of effects of an impurity and interactions // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73. N 4. P. 045332-1 – 14.
103. Frederiksen T., Paulsson M., Brandbyge M., Jauho A.-P. Inelastic transport theory from first principles: Methodology and application of nanoscale devices // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 75. N 20. P. 205413-1 – 22.
104. Svizhenko A., Leu P.W., Cho K. Effect of growth orientation and surface roughness on electron transport in silicon nanowires // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 75. N 12. P. 125417-1 – 7.
105. Ng M.-F., Zhou L., Yang S.-W., Sim L.Y., Tan V.B.C., Wu P. Theoretical investigation of silicon nanowires: Methodology, geometry, surface modification, and electrical conductivity using a multiscale approach // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 76. N 15. P. 155435-1 – 11.
106. Malet F., Pi M., Barranco M., Serra L., Lipparini E. Exchange-correlation effects on quantum wires with spin-orbit interactions under the influence of in-plane magnetic fields // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 76. N 11. P. 115306-1 – 12.
107. Gudmundsson V., Thorgilsson G., Tang C.-S., Moldoveanu V. Transient magnetotransport through a quantum wire // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. N 3. P. 035329-1 – 10.
108. Thorgilsson G., Tang C.-S., Gudmundsson V. Time-dependent magnetotransport of a wave packet in a quantum wire with embedded quantum dots // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 76. N 19. P. 195314-1 – 9.
109. Barnett R.N., Landman U. Cluster-derived structures and conductance fluctuations in nanowires // *Nature*. 1997. V. 387. 19 June. P. 788 – 790.
110. Kwapiński T. Time-dependent transport through a quantum wire // *Phys. Rev. B*. 2004. V. 69. N 15. P. 153303-1 – 4.

111. Soree B., Magnus W., Schoenmaker W. Energy and momentum balance equations: An approach to quantum transport in closed circuits // *Phys. Rev. B*. 2002. V. 66. N 3. P. 035318-1 – 11.
112. Asari Y., Nara J., Kobayashi N., Ohno T. Effect of crystalline electrodes on the transport properties of Al monatomic wires at finite biases // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 035459-1 – 5.
113. Fabrizio M., Gogolin A.O. Interacting one-dimensional electron gas with open boundaries // *Phys. Rev. B*. 1995. V. 51. N 24. P. 17827 – 17841.
114. Leng M., Lent C.S. Recovery of quantized ballistic conductance in a periodically modulated channel // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 71. N 1. P. 137 – 140.
115. Силин Р.А., Чепурных И.П. Расчет характеристик резонаторов, которые можно представить в виде сочленения волноводов // *Радиотехника и электроника*. 1990. Т. 35. № 2. С. 287 – 294.
116. Тагер А.С., Чепурных И.П. Одноканальные интерференционный транзистор и электронный фильтр // *Письма в ЖТФ*. 1995. Т. 21. Вып. 11. С. 72 – 77.
117. Nemnes G.A., Wulf U., Racec P.N. Nano-transistors in the Landauer-Büttiker formalism // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 96. N 1. P. 596 – 604.
118. *Quantum Transport in Ultrasmall Devices* / Ed. by D.K. Ferry, H.L. Grubin, C. Jacoboni, A.-P. Jauho. New York, London: Plenum Press. 1995. 544 p.
119. Абрамов И.И., Берашевич Ю.А., Данилюк А.Л. Потенциальные электрические характеристики интерференционных транзисторов на различных материалах // *ЖТФ*. 1999. Т. 69. Вып. 11. С. 130 – 131.
120. Subramaniam S., Bandyopadhyay S., Porod W. Analysis of the device performance of quantum interference transistors utilizing

ultrasmall semiconductor T structures // *J. Appl. Phys.* 1990. V. 68. N 9. P. 4861 – 4870.

121. Абрамов И.И., Рогачев А.И. Электрические характеристики интерференционных транзисторов с одним затвором на различных полупроводниковых материалах // *Физика и техника полупроводников.* 2001. Т. 35. Вып. 11. С. 1365 – 1369.

122. Абрамов И.И., Рогачев А.И. Модель интерференционного Т-транзистора в режиме баллистического транспорта, основанная на формализме функций Вигнера // *Изв. Белорусской инженерной академии.* 2001. № 1(11)/3. С. 74 – 76.

123. Csontos D., Xu H.Q. Quantum effects in the transport properties of nanoelectronic three-terminal Y-junction devices // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 67. N 23. P. 235322-1 – 10.

124. Okuda M., Fujii K., Shimizu A. Realistic structures for electron interferometers constituted by the control of the wavefunctions in double quantum wire structures // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N 1. P. 708 – 711.

125. Weisshaar A., Lary J., Goodnick S.M., Tripathi V.K. Analysis of discontinuities in quantum waveguide structures // *Appl. Phys. Lett.* 1989. V. 55. N 20. P. 2114 – 2116.

126. Lin Y.-K., Chen Y.-N., Chuu D.-S. Bound state of the quantum dot formed at intersection of L- or T-shaped quantum wire in inhomogeneous magnetic field // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 91. N 5. P. 3054 – 3061.

127. Weisshaar A., Lary J., Goodnick S.M., Tripathi V.K. Analysis and modeling of quantum waveguide structures and devices // *J. Appl. Phys.* 1991. V. 70. N 1. P. 355 – 366.

128. Sheng W.-D. Quantum coherent networks: A theoretical study // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 81. N 9. P. 6210 – 6213.

129. Wu H., Sprung D.W.L., Martorell J., Klarsfeld S. Quantum wire with periodic serial structure // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 44. N 12. P. 6351 – 6360.
130. Akis R., Vasilopoulos P., Debray P. Ballistic transport in electron stub tuners: Shape and temperature dependence, tuning of the conductance output, and resonant tunneling // *Phys. Rev. B*. 1995. V. 52. N 4. P. 2805 – 2813.
131. Sols F., Macucci M., Ravaioli U., Hess K. Theory for a quantum modulated transistor // *J. Appl. Phys.* 1989. V. 66. N 8. P. 3892 – 3906.
132. Tekman E., Ciraci S. Theoretical study of transport through a quantum point contact // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 43. N 9. P. 7145 – 7169.
133. Wu H., Sprung D.W.L., Martorell J. Electronic properties of a quantum wire with arbitrary bending angle // *J. Appl. Phys.* 1992. V. 72. N 1. P. 151 – 154.
134. Vanbèsien O., Lippens D. Theoretical analysis of a branch line quantum directional coupler // *Appl. Phys. Lett.* 1994. V. 65. N 19. P. 2439 – 2441.
135. Palm T., Thylén L. Analysis of an electron-wave Y-branch switch // *Appl. Phys. Lett.* 1992. V. 60. N 2. P. 237 – 239.
136. Palm T. Self-consistent calculations of an electron-wave Y-branch switch // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N 5. P. 3551 – 3557.
137. Szafran B., Peeters F.M. Time-dependent simulations of electron transport through a quantum ring: Effect of the Lorentz force // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 16. P. 165301-1 – 8.
138. Баграев Н.Т., Гсельхофф В., Иванов В.К., Клячкин Л.Е., Малярченко А.М., Шелых И.А. Интерференция носителей тока в модулированных квантовых проволоках // *Физика и техника полупроводников*. 2000. Т. 34. Вып. 4. С. 477 – 487.

139. Баграев Н.Т., Буравлев А.Д., Иванов В.К., Клячкин Л.Е., Маляренко А.М., Рыков С.А., Шелых И.А. Интерференция носителей тока в одномерных полупроводниковых кольцах // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 34. Вып. 7. С. 846 – 855.
140. Burgnies L., Vanbèsien O., Lippens D. Transient analysis of ballistic transport in stublike quantum waveguides // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71. N 6. P. 803 – 805.
141. Heller E.K., Jain F.C. Simulation of one-dimensional ring quantum interference transistors using the time-dependent finite-difference beam propagation method // J. Appl. Phys. 2000. V. 87. N 11. P. 8080 – 8087.
142. del Alamo J.A., Eugster C.C. Quantum field-effect directional coupler // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 56. N 1. P. 78 – 80.
143. Gaididei Yu.B., Malysheva L.I., Onipko A.I. Electron scattering and bound-state energies in crossed N-chain wires. A comparative study of discrete and continuous models // J. Phys.: Condens. Matter. 1992. V. 4. P. 7103 – 7114.
144. Orellana P.A., Dominguez-Adame F., Gómez I., Ladrón de Guevara M.L. Transport through a quantum wire with a side quantum-dot array // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. N 8. P. 085321-1 – 5.
145. Orellana P.A., Ladrón de Guevara M.L., Pacheco M., Latgé A. Conductance and persistent current of a quantum ring coupled to a quantum wire under external fields // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. N 19. P. 195321-1 – 7.
146. Orellana P.A., Pacheco M. Persistent current magnification in a double quantum-ring system // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. N 23. P. 235330-1 – 6.
147. Huang D., Lyo S.K., Thomas K.J., Pepper M. Field-induced modulation of the conductance, thermoelectronic power and

magnetization in ballistic coupled double quantum wires under a tilted magnetic field // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. N 8. P. 085320-1 – 10.

148. Петров В.А., Сандлер И.М. Управляемые электронные интерференционные эффекты в баллистической проводимости полупроводниковых наноструктур транзисторного типа // *Микроэлектроника*. 1994. Т. 23. Вып. 4. С. 3 –12.

149. Brandbyge M., Shjøtz J., Sørensen M.R., Stoltze P., Jacobsen K.W., Nørskov J.K., Olesen L., Laegsgaard E., Stensgaard I., Besenbacher F. Quantized conductance in atom-sized wires between two metals // *Phys. Rev. B*. 1995. V. 52. N 11. P. 8499 – 8514.

150. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. Москва–Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика". 2005. 160 с.

151. Неволин В.К. Вольт-амперные характеристики квазиодномерных микропроводников // *Письма в ЖТФ*. 1996. Т. 22. Вып. 21. С. 57 – 60.

152. Неволин В.К. Вольт-амперные характеристики квазиодномерных контактов S-типа // *Изв. вузов. Электроника*. 1997. № 5. С. 37 – 40.

153. Неволин В.К. Двухэлектродные элементы нанoeлектроники на основе квантовых проводов // *Микроэлектроника*. 1999. Т. 28. № 4. С. 293 – 300.

154. *Нанотехнологии в электронике* / Под ред. Ю.А. Чаплыгина. М.: Техносфера. 2005. 448 с.

155. Dcbray P., Raichev O.E., Vasilopoulos P., Rahman M., Perrin R., Mitchell W.C. Ballistic electron transport in stubbed quantum waveguides: Experiment and theory // *Phys. Rev. B*. 2000. V. 61. N 16. P. 10950 – 10958.

156. Sols F., Macucci M., Ravaioli U., Hess K. On the possibility of transistor action based on quantum interference phenomena // *Appl. Phys. Lett.* 1989. V. 54. N 4. P. 350 – 352.
157. Joe Y.S., Khatun M., Cosby R.M. Quantum transport anomalies in semiconductor nanosystems // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 78. N 12. P. 7120 – 7129.
158. Chico L., Benedict L.X., Louie S.G., Cohen M.L. Quantum conductance of carbon nanotubes with defects // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. N 4. P. 2600 – 2606.
159. Itoh T. Scattering matrix of a three-terminal junction in one dimension // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. N 3. P. 1508 – 1511.
160. Ando T. Quantum point contacts in magnetic fields // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 44. N 15. P. 8017 – 8027.
161. Usuki T., Saito M., Takatsu M., Kiehl R.A., Yokoyama N. Numerical analysis of ballistic-electron transport in magnetic fields by using a quantum point contact and a quantum wire // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. N 11. P. 8244 – 8255.
162. Xu H.Q. Method of calculations for electron transport in multiterminal quantum systems based on real-space lattice models // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. N 16. P. 165305-1 – 11.
163. Chen Y.P., Yan X.H., Xie Y.E. Transport through T-shaped quantum wires under potential modulation: Lattice Green's function approach // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. N 24. P. 245335-1 – 7.
164. Chan K.S., Wei J.H. Quantum ballistic transport in nanowire junctions // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. N 12. P. 125310-1 – 16.
165. Bratkovsky A.M., Sutton A.P., Todorov T.N. Conditions for conductance quantization in realistic models of atomic-scale metallic contacts // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. N 7. P. 5036 – 5051.
166. Jelinek P., Pérez R., Ortega J., Flores F. *Ab initio* study of evolution of mechanical and transport properties of clean and

contaminated Au nanowires along the deformation path // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 77. N 11. P. 115447-1 – 12.

167. Lassel A., Schlagheck P., Richter K. Effects of short-range interactions on transport through quantum point contacts: A numerical approach // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. N 4. P. 045346-1 – 11.

168. Golizadeh-Mojarad R., Datta S. Nonequilibrium Green's function based models for dephasing in quantum transport // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. N 8. P. 081301(R)-1 – 4.

169. Lent C.S., Kirkner D.J. The quantum transmitting boundary method // *J. Appl. Phys.* 1990. V. 67. N 10. P. 6353 – 6359.

170. Matveev K.A. Conductance of a quantum wire at low electron density // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 70. N 24. P. 245319-1 – 15.

171. Barnabé-Thériault X., Sedeki A., Meden V., Schönhammer K. Junctions of one-dimensional quantum wires: Correlation effects in transport // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. N 20. P. 205327-1 – 13.

172. Boiko I.I., Sirenko Yu.M., Vasilopoulos P. Dielectric formalism for a quasi-one-dimensional electron gas. I. Quantum transport equations // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 43. N 9. P. 7216 – 7223.

173. Boiko I.I., Sirenko Yu.M., Vasilopoulos P. Dielectric formalism for a quasi-one-dimensional electron gas. II. Dielectric functions and potential correlations // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 43. N 9. P. 7224 – 7230.

174. Sirenko Yu.M., Vasilopoulos P., Boiko I.I. Dielectric formalism for a quasi-one-dimensional electron gas. III. Arrays of quantum wires // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 44. N 19. P. 10724 – 10730.

175. Utecht C., Schöll E. Real-space transfer oscillations in coupled quantum wires // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N 5. P. 3602 – 3604.

176. Wang J., Wang Y., Guo H. Many-electron effects on transport through two-dimensional quantum structures // *J. Appl. Phys.* 1994. V. 75. N 5. P. 2721 – 2723.

177. Jaksch P., Yakimenko I., Berggren K.-F. From quantum point contacts to quantum wires: Density-functional calculations with exchange and correlation effects // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. N 23. P. 235320-1 – 9.
178. Berggren K.-F., Yakimenko I.I. Effects of exchange and electron correlation on conductance and nanomagnetism in ballistic semiconductor quantum point contacts // *Phys. Rev. B*. 2002. V. 66. N 8. P. 085323-1 – 7.
179. Starikov A.A., Yakimenko I.I., Berggren K.-F. Scenario for the 0.7-conductance anomaly in quantum point contacts // *Phys. Rev. B*. 2003. V. 67. N 23. P. 235319-1 – 8.
180. Berggren K.-F., Jaksch P., Yakimenko I. Effects on electron interactions at crossing of Zeeman-split subbands in quantum wires // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 11. P. 115303-1 – 5.
181. Mendoza B.S., del Castillo-Mussot M., Luis Mochán W. Plasmons in a spatially modulated quasi-one-dimensional quantum wire // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 53. N 3. P. 1026 – 1029.
182. Rotkin S.V., Ruda H.E., Shik A. Universal description of channel conductivity for nanotube and nanowire transistors // *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 83. N 8. P. 1623 – 1625.
183. Шик А.Я. Расчет полупроводниковой структуры с квазиодномерным электронным газом // *Физика и техника полупроводников*. 1985. Т. 19. Вып. 8. С. 1488 – 1491.
184. Sun Y., Kirczenow G., Sachrajda A.S., Feng Y. An electrostatic model of split-gate quantum wires // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 77. N 12. P. 6361 – 6369.
185. Reilly D.J. Phenomenological model for the 0.7 conductance feature in quantum wires // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 033309-1 – 4.
186. Laux S.E., Stern F. Electron states in narrow gate-induced channels in Si // *Appl. Phys. Lett.* 1986. V. 49. N 2. P. 91 – 93.

187. Okawa Y., Tsuchiya H., Miyoshi T. Guided modes in a Si-quantum wire and their control // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1996. V. 35. N 2B. P. 861 – 864.
188. Curatola G., Iannaccone G. Two-dimensional modeling of etched strained-silicon quantum wires // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 95. N 3. P. 1251 – 1257.
189. Register L.F., Hess K. Numerical simulation of electron transport in mesoscopic structures with weak dissipation // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 49. N 3. P. 1900 – 1907.
190. Bertoni A., Bordone P., Brunetti R., Jacoboni C., Reggiani S. Quantum logic gates based on coherent electron transport in quantum wires // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 84. N 25. P. 5912 – 5915.
191. Lang N.D. Resistance of atomic wires // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. N 7. P. 5335 – 5342.
192. Palacios J.J., Pères-Jiménez A.J., Lousis E., San Fabián E., Vergès J.A. First-principles approach to electrical transport in atomic-scale nanostructures // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. N 3. P. 035322-1 – 14.
193. Brandbyge M., Mozos J.-L., Ordejón P., Taylor J., Stokbro K. Density-functional method for nonequilibrium electron transport // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 65. N 16. P. 165401-1 – 17.
194. Fujimoto Y., Hirose K. First-principles calculation method of electron-transport properties of metallic nanowires // *Nanotechnology.* 2003. V. 14. P. 147 – 151.
195. Havu P., Havu V., Puska M.J., Nieminen R.M. Nonequilibrium electron transport in two-dimensional nanostructures modeled using Green's functions and the finite-element method // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69. N 11. P. 115325-1 – 13.
196. Havu P., Puska M.J., Nieminen R.M., Havu V. Electron transport through quantum wires and point contacts // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 70. N 23. P. 233308-1 – 4.

197. Majewski J.A., Birner S., Trellakis A., Sabathil M., Vogl P. Advances in the theory of electronic structure of semiconductors // *Phys. Stat. Sol (c)*. 2004. V. 1. N 8. P. 2003 – 2027.
198. Wang J., Polizzi E., Lundstrom M. A three-dimensional quantum simulation of silicon nanowire transistors with the effective-mass approximation // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 96. N 4. P. 2192 – 2203.
199. Wang J., Polizzi E., Ghosh A., Datta S., Lundstrom M. Theoretical investigation of surface roughness scattering in silicon nanowire transistors // *Appl. Phys. Lett.* 2005. V. 87. N 4. P. 043101-1 – 3.
200. Shin M. Efficient simulation of silicon nanowire field effect transistors and their scaling behavior // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 101. N 2. P. 024510-1 – 6.
201. Nehari K., Cavassilas N., Michelini F., Bescond M., Autran J.L., Lanoo M. Full-band study of current across silicon nanowire transistors // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 90. N 13. P. 132112-1 – 3.
202. Oh J.H., Ahn D., Yu Y.S., Hwang S.W. Green-function approach to transport through a gate-surrounded Si nanowire with impurity scattering // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. N 3. P. 035313-1 – 7.
203. Park H.-H., Jin S., Park Y.J., Min H.S. Quantum simulation of noise in silicon nanowire transistors // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 104. N 2. P. 023708-1 – 5.
204. Luisier M., Schenk A., Fichtner W. Atomistic treatment of interface roughness in Si nanowire transistors with different channel orientations // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 90. N 10. P. 102103-1 – 3.
205. Gilbert M.J., Akis R., Ferry D.K. Phonon-assisted ballistic to diffusive crossover in silicon nanowire transistors // *J. Appl. Phys.* 2005. V. 98. N 9. P. 094303-1 – 8.

206. Gilbert M.J., Ferry D.K. Efficient quantum three-dimensional modeling of fully depleted ballistic silicon-on-insulator metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 95. N 12. P. 7954 – 7960.
207. Gilbert M.J., Ferry D.K. Quantum interference in fully-depleted tri-gate quantum wire transistors: The role of inelastic scattering // *IEEE Trans. on Nanotechnology.* 2005. V. 4. N 5. P. 599 – 604.
208. Akis R., Bird J.P., Ferry D.K. The effects of inelastic scattering in open quantum dots: reduction of conductance fluctuations and description of wave-function "scarring" // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1996. V. 8. P. L667 – L674.
209. Akis R., Ferry D.K., Bird J.P. Magnetotransport fluctuations in regular semiconductor ballistic quantum dots // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. N 24. P. 17705 – 17715.
210. Zibold T., Vogl P., Bertoni A. Theory of semiconductor quantum-wire-based single- and two-qubit gates // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. N19. P. 195301-1 – 14.
211. Обухов И.А. Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах. Севастополь: Вебер. 2005. 226 с.
212. Wada Y., Uda T., Lutwyche M., Kondo S., Heike S. A proposal of nanoscale devices based on atom/molecule switching // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N12. P. 7321 – 7328.
213. von Allmen P., Hess K. Dynamics of an atomic switch computed by first-principles molecular dynamics // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. N 7. P. 5243 – 5246.
214. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. VI. Одноэлектронные структуры // *Нано- и микросистемная техника.* 2007. № 7. С. 10 – 24.

215. Indlekofer K.M., Knoch J., Appenzeller J. Quantum kinetic description of Coulomb effects in one-dimensional nanoscale transistors // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N12. P. 125308-1 – 7.
216. International Technology Roadmap for Semiconductors: 1999 edition. Austin, TX: International SEMATECH, 1999; 2005 edition; 2007 edition.
217. Palm T., Thylén L., Nilsson O., Svensson C. Quantum interference devices and field-effect transistors: A switch energy comparison // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N1. P. 687 – 694.
218. Kelly M.J. The poor prospects for one-dimensional devices // *Int. J. Electronics*. 1993. V. 75. N1. P. 27 – 40.
219. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Ed. by R. Compañó. EC IST programme Future and Emerging Technologies, Second Edition, 2000. 104 p.
220. Whang D., Jin S., Lieber C.M. Large-scale hierarchical organization of nanowires for functional nanosystems // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2004. V. 43. N7B. P. 4465 – 4470.
221. Lu W., Lieber C.M. Semiconductor nanowires // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006. V. 39. P. R387 – R406.
222. Cho K.H., Yeo K.H., Yeoh Y.Y., Suk S.D., Li M., Lee J.M., Kim M.-S., Kim D.-W., Park D., Hong B.H., Jung Y.C., Hwang S.W. Experimental evidence of ballistic transport in cylindrical gate-all-around twin silicon nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistors // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V. 92. N5. P. 052102-1 – 3.
223. Kobayashi M., Hiramoto T. Experimental study on quantum confinement effects in silicon nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistors and single-electron transistors // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103. N5. P. 053709-1 – 6.
224. Наноматериалы. Нанотехнологии. Наносистемная техника. Мировые достижения за 2005 год / Сб. под ред. П.П. Мальцева. М.: Техносфера, 2006. 152 с.

225. Пул-мл. Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. М.: Техносфера, 2006. 336 с.

226. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2006. 293 с.

227. Нанотехнологии. Наноматериалы. Наносистемная техника. Мировые достижения – 2008 год / Сб. под ред. П.П. Мальцева. М.: Техносфера. 2008. 432 с.

228. Hoenlein W. New prospects for microelectronics: Carbon nanotubes // Jpn. J. Appl. Phys. 2002. V. 41. N6B. P. 4370 – 4374.

ГЛАВА 8

НАНОТРАНЗИСТОРЫ С МДП-СТРУКТУРОЙ

В данной главе проанализированы модели кремниевых нанотранзисторов со структурой металл-диэлектрик-полупроводник (МДП). Оценены перспективы развития электроники после окончания "эры" данного типа приборных структур.

И все же основным типом активных элементов ИС твердотельной наноэлектроники остаются кремниевые нанотранзисторы с МДП-структурой.* Серьезной альтернативы для них пока не видно, если иметь ввиду схемы степени интеграции около 10^{10} и, возможно, выше [2].

На этом пути увеличения степени интеграции встретится немало проблем. Так, при дальнейшем уменьшении размеров МОП-транзисторов (металл-окисел-полупроводник) более существенное отрицательное влияние будут оказывать различные паразитные эффекты. В частности, как правило, усиливаются короткоканальные эффекты. Кроме того, все более важными становятся туннельные токи затвора и между истоком и стоком (прямое туннелирование), другие составляющие токов утечки, уменьшение подвижности носителей заряда, флуктуации распределений зарядов примесей, увеличение последовательных сопротивлений областей стока и истока, задержки межсоединений и др.

С целью борьбы (часто хотя бы уменьшения влияния, а не полного устранения) с данными эффектами для сохранения приемлемыми ряда электрических характеристик элементов

* Заметим, что рядом специалистов данный тип приборных структур не относится собственно к наноэлектронике (см., например, [1]). Автор не разделяет эту точку зрения. Аргументация приведена в [2,3] (см. также далее).

предложено большое разнообразие конструктивно-технологических вариантов и их разновидностей (сочетания и т.п.) кремниевых нанотранзисторов с МДП-структурой, включая с КНИ-структурой (кремний-на-изоляторе), а именно: частично и полностью обедненные; необедненные; вертикальные совмещенные; с ультратонким основанием; с управляемой проводимостью канала; с напряженными слоями; с высокой диэлектрической проницаемостью подзатворного диэлектрика; с вертикальной и "реберной" структурами; с двойным, тройным, вертикальным, сторонним, окружающим, π - и Ω -затворами; одно- и многоканальные; с локальной изоляцией канала; на основе гетероструктур; на квантовых проволоках; с опрокинутой T -образной формой; со структурой "кремний ни на чем" и др.

Важный конструктивно-технологический вид нанотранзисторов на основе кремниевых квантовых проволок был рассмотрен в [4]. Замечу, что многие рассмотренные подходы, методы, характерные для приборных структур на квантовых проволоках, сохраняют свою эффективность и для нанотранзисторов с МДП-структурой. Так, некоторые модели, описанные в [4], с успехом модифицируются и используются для последнего типа приборных структур (см. далее).

Однако такая в целом благоприятная ситуация не всегда имеет место. Иногда конструктивно-технологические особенности могут существенно изменить требования к модели. Например, двумерный анализ бывает недостаточен, и необходима разработка трехмерных моделей. Еще более важными, как правило, являются размеры структуры, что приводит к *фундаментальному вопросу: когда достаточно использовать модели полуклассического подхода [5,6], а когда необходимо применять квантовомеханические модели?*

Рассмотрим вопрос о размерах приборной структуры ввиду его принципиальной важности для нас более подробно. Так, с ноября 2007 года компания Intel серийно производит

микропроцессоры с проектными нормами 45 нм (длина затвора L_z около 22 нм [7]) семейства Penгун. Она же заявила о разработке технологического процесса с проектными нормами 32 нм [8]. Процесс с такими же нормами разработан компанией IBM с партнерами [8]. Это что касается серийного производства. Сейчас о научных исследованиях. В настоящее время имеется сообщение о создании типа "реберных" нанотранзисторов (FinFET) с длиной канала $L_k = 3$ нм [9]. Теория и оценки показывают, что кремниевые МДП-нанотранзисторы будут обладать приемлемыми характеристиками, по крайней мере, до $L_k = 2$ нм (см. [10] и далее). Существует точка зрения, что возможны полевые транзисторы "теоретически при $L_k > 0$ " [11]. Согласно авторитетному прогнозу 2007 года [12] нанотранзисторы с длинами затвора около 5 нм будут использоваться в серийных ИС к 2022 году. Однако последующие исследования дают более сдержанную оценку. Так, уже согласно прогнозу 2009 года [12] физическая длина затвора составит около 7,4 нм к 2024 году. Отмечу, что при прогнозировании 2009 года интенсивно использовалось программное обеспечение MASTAR, реализующее аналитические модели МОП-транзисторов, настроенные на экспериментальные данные.

Другая точка зрения заключается в том, что полевые транзисторы с длиной канала менее 1 нм* будут вряд ли обладать приемлемыми электрическими характеристиками, причем изготовленные на различных материалах и по различным технологиям [13]. Замечу, однако, что она не противоречит первой точке зрения, т.е. изготовить может быть и можно, но будут ли они нормально функционировать? Так, оценка предельно достижимого размера любого необратимого двоичного логического элемента на основе соотношения неопределенностей Гейзенберга и выражения Шеннона – фон

* Заметим, однако, что это уже будет не наноэлектроника [3] (см. далее).

Неймана – Лаидауэра для минимальной энергии переключения составляет около 1,5 нм при температуре $T = 300$ К [14]. С другой стороны, "меньше не обязательно лучше" [13]. Вспомним про такие информационные системы как мозг человека – объект органической гибридной нанoeлектроники, созданный Природой [15].

Итак, в данной главе будут рассмотрены проблемы и принципы физики и моделирования МДП-транзисторов на основе кремния с длинами канала от 100 до 1 нм, т.е. нанотранзисторы с МДП-структурой нанoeлектроники [3]. В связи с тем что модели приборных структур на квантовых проволоках уже были рассмотрены [4], здесь основное внимание будет уделено численным (дискретным), как наиболее адекватным, моделям кремниевых нанотранзисторов других конструктивно-технологических видов.

8.1. Модели полуклассического подхода

Основные классы моделей полуклассического подхода и общие оценки справедливости полуклассического и квантовомеханического подходов [15] были рассмотрены в [5]. Оценки допустимого применения моделей полуклассического подхода при расчете внешних электрических характеристик приборных структур микроэлектроники приведены в [6]. Двинемся дальше в диапазон характеристических длин $L_{хар}$ от 100 до 1 нм в соответствии с целью данной главы.

В [5,6] отмечалось, что многие модели полуклассического подхода, которые, как правило, проще и экономичнее моделей квантовомеханического подхода, сохраняют свою адекватность при расчете электрических характеристик в значительной части этого диапазона, т.е. и для МДП-транзисторов нанoeлектроники. Так, первые экспериментальные транзисторы с $L_c < 100$ нм, едва ли отличающиеся в конструктивном плане

от обычных планарных МОП-транзисторов глубокосубмикронной области (см., например, [11,16–18]), анализировались и проектировались с применением известных комплексов программ, в которых реализованы диффузионно-дрейфовые модели. В частности, в работах [19,20] для этих целей для МОП-транзисторов с $L_g = 70$ нм использовался комплекс FIELDAY (двумерное моделирование), а в работах [21,22] для МОП-транзисторов с $L_k = 90$ нм применялся комплекс MINIMOS (двумерное моделирование) (см. также [6]). Однако лучшее согласование с экспериментальными данными [19,20], особенно при более низкой по сравнению с комнатной температуре ($T = 77$ К), достигается с помощью кинетического моделирования на основе полуклассического метода Монте-Карло частиц [23], так как в данном случае физически корректно описывается эффект всплеска скорости, который важен для кремниевых МОП-транзисторов с $L_k < 100$ нм [6]. Необходимо отметить, что эти результаты были получены с использованием, по-видимому, наиболее адекватной на тот момент времени модели [24], основанной на методе Монте-Карло частиц и реализованной специалистами фирмы IBM в программе двумерного численного моделирования полупроводниковых приборов DAMOCLES [25].

Остановимся на данной модели, ввиду особой важности ряда результатов, полученных с ее применением. Полуклассическая самосогласованная модель [24] основана на решении уравнения Пуассона в двумерном сечении прибора и использовании метода Монте-Карло частиц. Квантовые эффекты не учитываются (исключение – вырождение^{*}). Для описания вырождения носителей заряда применяется простая аппроксимация. Зонная структура получается с помощью метода эмпирического псевдопотенциала, а далее с ее учетом вычисляются

* В литературе так сложилось, что под учетом квантовых эффектов обычно подразумевается нечто большее, чем включение в модель только вырождения.

интенсивности рассеяния электронов на фононах, примесях и электронах. Учитывается также ударная ионизация. Моделировались кремниевые n -МОП- транзисторы с эффективной длиной канала вплоть до 60 нм при $T = 77$ и 300 К. Получено хорошее согласование с экспериментальными данными по крутизне для случая малого сигнала в области насыщения транзистора работы [19]. Кроме важности эффекта всплеска скорости, особенно при $T = 77$ К, показана необходимость детального описания зонной структуры Si. В частности, традиционно используемая параболическая аппроксимация зонной структуры приводит к сильному завышению эффекта всплеска скорости, средней энергии, особенно при $T = 77$ К. Отмечается, что описание транспорта электронов в Si с помощью только четырех согласующих параметров – большое достижение. О значительности вычислительных затрат свидетельствуют следующие данные. На IBM 3090/600E вычислительной системе с векторным процессором требуется порядка десятков часов на одну точку смещения. И в то же время переход к параболической аппроксимации зонной структуры уменьшает это время в 20 – 100 раз. В последующей работе [25] метод Монте-Карло частиц распространен на случай описания транспорта дырок. Сравнивались n - и p -МОП-транзисторы с $L_k = 233$ и 53 нм при $T = 77$ и 300 К. Оказалось, что для однотипных структур (модули профилей легирования, работ выхода затворов и прикладываемых напряжений – равны) ток и крутизна p -МОП-транзисторов составляет около половины от таковых для n -МОП-транзисторов с $L_k = 233$ нм, а для $L_k \leq 100$ нм крутизна p -МОП-транзисторов уже составляет 75 % от значений для n -МОП-транзисторов. Однако наиболее интересные и важные результаты были получены в [26]. В ней исследовались МОП-транзисторы с L_k от 233 до 43 нм с подложками n -типа на Ge, Si, GaAs, InP, $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ и p -типа на Si (характеристики этих

материалов и некоторых других полупроводников рассчитывались в [27]) при $T = 77$ и 300 К. Установлено, что за исключением приборов, включающих In, "скорость", оцениваемая по крутизне, МОП-транзисторов с $L_k \leq 100$ нм практически не зависит от полупроводника. Такое "универсальное" поведение в основном обусловлено подобием плотностей состояний зонных структур соответствующих материалов при средних энергиях. Это связано с тем, что концепции эффективной массы и подвижности, оцениваемых у дна и потолка зон, т. е. при малых энергиях, строго говоря, неприменимы для описания транспорта заряда в малых приборах с $L_k \leq 100$ нм. Тем самым в работе [26], фактически показано, т. е. в 1991 году (!), что при создании на МОП-транзисторах УБИС нанозлектроники кремнию нет альтернативы среди ряда рассмотренных технологически значимых материалов, по крайней мере до $L_k = 43$ нм*. Замечу также, что программа DAMOCLES использовалась при моделировании биполярных $n-p-n$ - и $p-n-p$ -транзисторов на кремнии с шириной базы $W_b = 50$ нм и полевых транзисторов с барьером Шоттки на основе GaAs [25,28]. В частности, показано слабое влияние эффекта всплеска скорости на высокочастотное поведение кремниевых биполярных транзисторов (см. также [6]). В работе [29] DAMOCLES применялась для оценки потенциала масштабирования n -МОП-нанотранзисторов с каналом на напряженном Si и $Si_{1-x}Ge_x$ (L_g 66; 44; 22 и 11 нм). На предварительном этапе масштабирования использовалась FIELDAY (диффузионно-дрейфовая модель). Установлено, что улучшение характеристик будет несильным, что согласуется с экспериментальными данными.

В дальнейшем модели полуклассического подхода с успехом применялись как для теоретических исследований, предложений

* Во многом именно по этой причине данная глава посвящена нанотранзисторам с МДП-структурой на кремнии.

новых конструкций нанотранзисторов, так и для анализа и при разработке экспериментальных образцов приборных структур. Отметим лишь некоторые работы.

В статье [17] анализировались перспективные конструктивно-технологические варианты МОП-транзисторов при их масштабировании в область $L_k \leq 100$ нм. Использовались программы FIELDAY (трехмерный анализ) и DAMOCLES. В частности, с помощью диффузионно-дрейфовой модели (FIELDAY) исследовалось влияние флуктуаций распределения примесей на выходные токи и пороговое напряжение. Подобные исследования также проводились в некоторых других работах с помощью гидродинамических моделей и методов Монте-Карло. Так, влияние флуктуаций примесей на эти же характеристики и дрейфовую скорость исследовалось для 30 МОП-нанотранзисторов с $L_k = 50$ нм в [30] с помощью многочастичного метода Монте-Карло в сочетании с методом молекулярной динамики [31]. Важно при этом отметить, что применяемая модель была предварительно настроена на экспериментальные данные по зависимости подвижности от уровня легирования при малых электрических полях. Ясно, что такой прогноз будет более достоверным по сравнению с другими, в которых подобная настройка модели не производится.

В то же время в ряде работ с применением различных полуклассических моделей были предложены новые конструктивно-технологические варианты МОП-нанотранзисторов. В статье [32] для этих целей при исследовании нанотранзистора с $L_j = 10$ нм ($L_k \approx 16$ нм) использовалась двумерная диффузионно-дрейфовая модель. Интересно заметить, что оценка вклада тока прямого туннелирования была 15 % от полного тока стока для предлагаемой конструкции транзистора. Т.е. диффузионно-дрейфовая модель продолжает работать хорошо! (см. также

далее). В [33] был предложен новый конструктивно-технологический вариант МОП-нанотранзистора на КНИ с $L_k = 10$ нм. Для этого применялись гидродинамическая модель и метод Монте-Карло. Сравнение n -МОП-нанотранзисторов на КНИ различных конструктивно-технологических вариантов (с L_k до 50 нм) с помощью коммерческого пакета программ ISE TCAD (двумерное моделирование) проводилось в [34]. Была также предложена новая конструкция нанотранзистора. В настоящее время перечень проведенных исследований подобного рода весьма многочисленен*, поэтому ограничимся лишь приведенными.

Интересные результаты приведены в статье [35]. В работе была построена двумерная численная модель кремниевого нанотранзистора со структурой КНИ с полным и частичным обеднением на основе одночастичного метода Монте-Карло. С помощью предложенной модели для транзистора с $L_z = 50$ нм были проиллюстрированы возможности исследования влияния на его электрические характеристики не только различных конструктивно-технологических параметров, но и некоторых электрофизических параметров. В последующей статье [36] описан простой способ коррекции модели для учета поперечного квантования в канале кремниевых нанотранзисторов с КНИ-структурой. Модель реализована в программе BALSOL.

Гидродинамическая модель в сочетании с методом Монте-Карло использовалась в [37] для анализа шумовых характеристик МОП-транзисторов с L_k от 2000 до 60 нм. Показано, что главный механизм (дробовый) шума в современных МОП-нанотранзисторах подобен характерному для баллистических приборов, а не для длинноканальных МОП-транзисторов.

* Этому вопросу целесообразно посвятить отдельную работу.

Важные результаты были получены при сопоставлении различных полуклассических моделей в работе [38]. Рассчитывались стоковые и сток-затворные характеристики n -МОП-транзисторов с тонким слоем кремния с двойным затвором с его длинами от 100 до 5 нм ($L_s = L_k$) с использованием трех моделей различных классов, а именно: метода Монте-Карло частиц, гидродинамической и диффузионно-дрейфовой. Отмечу, что результаты были получены с применением хорошо известного инструментария моделирования приборов, а именно: программы DAMOCLES (метод Монте-Карло частиц), коммерческого комплекса программ ATLAS (гидродинамическая и диффузионно-дрейфовая модели). Сравнение осуществлялось с результатами, полученными по методу Монте-Карло частиц (без учета квантования в канале), как наиболее адекватному. Вырождение носителей заряда во всех моделях учитывалось. В работе преследовались две цели. Во-первых, метод Монте-Карло (даже частиц) не очень подходит для трехмерного анализа приборов, который принципиально важен для некоторых конструктивно-технологических вариантов нанотранзисторов, вследствие огромных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ, и для расчета подпорогового тока МОП-транзисторов. Поэтому желательно использовать другие модели. Вопрос возникает – какие? Во-вторых, необходимо проверить точность более простых и экономичных моделей при моделировании перспективного вида нанотранзистора. В целом, оказалось, что без настройки параметров более простых моделей лучше согласуются с результатами, полученными по методу Монте-Карло частиц, расчеты по диффузионно-дрейфовой модели, а не по гидродинамической. В принципе, это не является неожиданным в свете изложенного в [5]. Основной вывод работы: в случае использования известных моделей электрофизических

* Таким образом, речь в определенном смысле идет о "стандартных моделях" [38].

характеристик с уменьшением L_3^* необходима подстройка численных значений параметров этих моделей при согласовании расчетов по диффузионно-дрейфовой и гидродинамической моделям с таковыми по методу Монте-Карло частиц для рассмотренного вида нанотранзисторов. Так, при согласовании диффузионно-дрейфовой модели рекомендуется корректировка скорости насыщения модели подвижности. В целом, эти выводы соответствуют традиционным рекомендациям при моделировании МОП-транзисторов обычных конструкций, в том числе и при согласовании с экспериментальными данными (см., например, [6,39,40]). В работе также получена аппроксимация для зависимости скорости насыщения от L_3 , позволяющая получить хорошее соответствие с результатами расчета по методу Монте-Карло частиц. Более кардинальный, с точки зрения автора, путь – построение новых моделей подвижности, например, для сильных электрических полей.

Приведем другой очень существенный аргумент в пользу диффузионно-дрейфовых моделей. Так, они с успехом применяются для многомерного численного моделирования не только сложных, например функционально-интегрированных, элементов, но также и целых фрагментов ИС, как единого целого [41]. Данный подход становится особенно важным с ростом степени интеграции ИС вследствие усиления взаимодействия между элементами. Недавно его эффективность была показана и для оценки различных характеристик наноэлектронных ИС, в частности на туннельно-связанных наноструктурах [42]. Поэтому *многомерные дискретные диффузионно-дрейфовые модели, судя по всему, будут по-прежнему важны для анализа сложных элементов и фрагментов ИС, как единого целого, и на МДП-нанотранзисторах.*

* Для диффузионно-дрейфовой модели для $L_3 < 40$ нм.

Основное направление последующего усовершенствования (корректировки) моделей полуклассического подхода для моделирования кремниевых нанотранзисторов проводилось по пути учета других по сравнению с вырождением квантовомеханических эффектов. Об их важности для детального исследования физических процессов в некоторых областях даже обычных МОП-транзисторов на кремнии указывалось в [6]. Здесь, прежде всего, отмечу богатую предысторию вопроса, в частности по описанию электронных свойств инверсионных 2D-слоев на границах раздела полупроводник-диэлектрик, включая МОП-структуры, описанную в отличном обзоре ранних работ [43]. Хороший обзор по достигнутым успехам и неясностям в теоретическом понимании транспорта носителей заряда в инверсионных (квантованных) слоях кремния на соответствующий момент времени дан в [44]. Обзор работ по учету квантовых эффектов в упрощенных моделях обычных МОП-транзисторов приведен, например, в [45]. Может быть важным их учет и на уровне моделирования схем [46].

Отметим следующие результаты по упрощенным моделям. Как и для субмикронных элементов ИС, при разработке моделей, применяемых при масштабировании кремниевых МДП-нанотранзисторов разнообразных конструкций, используются решения уравнения Пуассона в различных приближениях. Однако при этом, как правило, вводятся новые или дополнительные параметры масштабирования. Часто такими удобными для анализа расчетов параметрами являются различные характеристические длины (см., например, [47 – 50]). Модели отмеченных работ следует отнести к чисто полуклассическим (без квантовых коррекций). В связи с этим они обычно сравниваются с численными моделями, например реализующими диффузионно-дрейфовые модели в программах FIELDAY, TMA – MEDICI.

Однако не менее важными и здесь могут являться квантовомеханические коррекции. Так, в работе [51] на основе простых моделей масштабных длин, характеризующих электростатический контроль затвором L_E и эффект квантового ограничения L_Q , было проведено оценочное сравнение трех перспективных конструкций МОП-нанотранзисторов, а именно: 1) с симметричной планарной структурой с двойным затвором; 2) на цилиндрической квантовой проволоке с окружающим затвором (с коаксиальной структурой); 3) на прямоугольной квантовой проволоке с тройным затвором. Опосредованная связь L_E и L_Q показала, что планарная и коаксиальная структуры обладают приблизительно одинаковым потенциалом масштабируемости для подложки ориентации (001). При этом коаксиальная структура характеризуется лучшим электростатическим контролем, но большей чувствительностью порогового напряжения $V_{пор}$ к девиациям толщины слоя кремния. Худшей из трех является структура на прямоугольной квантовой проволоке. И в то же время для другой ориентации подложки (011) непланарные структуры намного лучше, особенно на цилиндрической квантовой проволоке. Необходимо подчеркнуть, что эти важные качественные выводы подтверждаются результатами, полученных с помощью более строгих численных моделей (см. [4] и далее).

В статье [52] разработанные авторами упрощенные модели для $V_{пор}$ и подпороговой крутизны (первая была модифицирована на случай учета пространственного квантования) использовались для оценки пределов масштабирования МОП-нанотранзисторов с двойным затвором. Было показано, что характеристики будут приемлемыми для транзисторов с L_k около 10 нм. Анализировались также МДП-транзисторы с высокой диэлектрической проницаемостью. Было проведено сравнение с результатами численного моделирования по программам:

FIELDAY; Medici; DESSIS, ISE TCAD. В целом, получено хорошее согласование с более строгими численными моделями.

Далее основное внимание уделим дискретным моделям кремниевых нанотранзисторов сначала полуклассического подхода с квантовыми коррекциями (базовая модель – полуклассическая), а затем непосредственно квантовомеханического подхода.

Основные общие требования к подобного рода моделям, включая только квантовые макроскопические модели, относительно непосредственно полуклассических были сформулированы в [53], а именно: 1) их вычислительная сложность должна быть сравнима с соответствующим аналогом; 2) они должны "переходить" в их аналог при $\hbar \rightarrow 0$ (\hbar – постоянная Планка, деленная на 2π); 3) основные уравнения должны быть теми же или подобными. *Удовлетворение этим требованиям приводит к следующим преимуществам: 1) возможно моделировать приборные структуры со столь же сложной геометрией; 2) легко исследовать относительное влияние квантовых эффектов; 3) возможность использования в инженерных приложениях; 4) допустимо сформулировать подобные с полуклассическим случаем граничные условия. Не менее важным, с точки зрения автора, является также применимость во многих случаях тех же численных методов или им подобным, что значительно упрощает разработку соответствующего программного обеспечения, вплоть до незначительной модификации уже созданного.*

Влияние пространственного квантования в тонком слое кремния в 5 нм *n*-МОП-нанотранзистора с двойным затвором ($L_g = 30$ нм) при $T = 300$ К на выходные вольт-амперные характеристики (ВАХ) было исследовано в [54]. Предварительно осуществлялась соответствующая модернизация программы DAMOCLES. Расчеты проводились при использовании параболической и первого порядка непараболической

аппроксимаций зонной структуры Si. Оказалось, что результаты по току стока I_c отличаются до 30 %. И в тоже время интересно заметить, что учет квантового эффекта в сочетании с более реалистичной непараболической аппроксимацией приводит к меньшему отличию (до 15 %) с моделью, в которой пространственное квантование не учитывается. Различия же по пороговому напряжению незначительны. Моделировался также p -МОП-нанотранзистор с двойным затвором ($L_g = 30$ нм), который, как оказалось, приемлем для интеграции с исследованным n -МОП-нанотранзистором в КМОП-схемах (комплементарных МОП). В целом, результаты численного моделирования МОП-нанотранзисторов, с одной стороны, показали целесообразность квантовомеханических коррекций полуклассических моделей в рассматриваемых случаях, а, с другой, – важность при этом достаточно точного описания зонной структуры кремния.

Модифицированная комбинированная самосогласованная модель для моделирования электронного транспорта в инверсионном слое Si МОП-структур, реализованная в программе DAMOCLES и использованная для получения описанных выше результатов, приведена в статье [55]. Модель основана на самосогласованном решении кинетического уравнения Больцмана (КУБ) (неявном) с помощью метода Монте-Карло частиц, двумерного уравнения Пуассона и одномерных (в поперечных сечениях канала) уравнений Шредингера (в первом приближении непараболической зонной структуры). При этом учитываются рассеяния на акустических и внутри- и межзонных объемных фононах, на поверхностных оптических модах, на поверхностных шероховатостях, на ионизированных примесях и зарядах границы раздела полупроводник-оксид. Одной из самых сложных задач являлся учет перехода из 3D в 2D состояние (и наоборот) и воплощение этого перехода в самосогласованной схеме итерационного

решения. Для ее разрешения авторы разработали эмпирические правила.

Замечу, что подобная комбинированная модель применялась в [56] для моделирования МОП-нанотранзистора с двойным затвором $L_z = 15$ нм. При этом учитывались внутри- и межзонное рассеяние на объемных акустических фононах, рассеяние на примесях, а также непараболичность зонной структуры. Сравнение с трехмерной полуклассической моделью, основанной на методе Монте-Карло, показало, что в рассматриваемом случае пространственное квантование слабо влияет на сток-затворные характеристики.

Нельзя не остановиться на других интересных результатах, полученных с помощью программы DAMOCLES и описанных в работе [57], хотя в ней непосредственно и не исследовались МДП-нанотранзисторы (длина канала бралась около 0,15 мкм). В статье анализировалось влияние эффектов горячих носителей в кремниевых приборных структурах на следующие характеристики: коэффициент умножения в биполярном транзисторе; ток подложки в МОП-транзисторе; инжекцию в SiO_2 затвора. Основной вывод: *"мы, действительно, можем объяснить транспорт горячих электронов качественно, а в некоторых случаях – количественно"*. Для получения этого результата необходимо учитывать многие механизмы, причем пересмотреть их роль и описывающие их модели. Так, качественное и в большинстве случаев количественное согласие с экспериментом получается только при корректном учете зонной структуры, всех значимых процессов рассеяния (на фононах, кулоновское, ударная ионизация) и сильно нелокальных свойств транспорта в малых кремниевых приборах. Показано, что эффекты квантования в инверсионных слоях вызывают сдвиг пороговой энергии ударной ионизации, что очень важно для вычисления тока подложки в МОП-транзисторах. Отмечается, что *количественное согласование с*

экспериментом достигается в результате "хрупкого баланса" между многими эффектами, причем "малое отклонение в каждой аппроксимации может приводить к чрезвычайно сильно различающемуся результату", т.е. потере этого согласования. Поэтому авторы делают вывод о том, что не могут с уверенностью утверждать, что количественное согласование с экспериментом является доказательством того, что их "модель в целом справедлива". Замечу, что выделенные в тексте данного абзаца места касаются одной из наиболее адекватных физико-математических моделей полупроводниковых приборов, поэтому подобного рода неуверенность можно отнести ко множеству известных моделей приборных структур микро- и нанoeлектроники. Для ее устранения при проверке адекватности модели необходимо использовать набор процедур, выделенных в [58,59]. К сожалению, этот набор сложно реализовать на практике в полном объеме.

Интересная модифицированная модель описана в [60,61]. В ней в двумерном случае решается (неявно) с помощью метода Монте-Карло КУБ с квантовой коррекцией потенциала на основе градиента плотности (см. далее). При этом учитывается шестидолинная структура зоны проводимости кремния. В работе [60] исследовались МОП-нанотранзисторы с КНИ-структурой с L_k от 50 до 5 нм при $T = 300$ К. Учитывалось три механизма рассеяния на фононах в канале, рассеяние на примесях в областях стока и истока. Сначала проводилось сравнение модели с одномерным решением уравнений Шредингера и Пуассона в равновесных условиях. Показано, что результаты для электронов в инверсионном слое достаточно хорошо согласуются для транзистора с $L_k = 50$ нм. Проводилось также сравнение методов Монте-Карло с квантовой коррекцией и без при расчете стоковых ВАХ. Оказалось, что ток с учетом квантовой коррекции меньше в основном за счет уменьшения

заряда инверсионного слоя. Проиллюстрировано, что многодолинная структура зоны проводимости Si играет важную роль как в неравновесном, так и в квазибаллистическом режимах транспорта МОП-нанотранзисторов. В последующей работе [61] моделировались МОП-транзисторы с двойным затвором с L_k от 50 до 8 нм при $T = 300$ К. Отмечаются преимущества используемого способа квантовой коррекции метода Монте-Карло по сравнению с другими подобными коррекциями, в частности, простота и применимость к широкому кругу задач. При расчетах учитывались: рассеяние на примесях, шероховатостях границ раздела, внутридолинное на акустических фононах, междолинное на f - и g - фононах, электрон-электронное, а также непараболичность зонной структуры и вырождение. Для учета одной из составляющих электрон-электронного рассеяния использовался метод молекулярной динамики. Анализировались физические процессы в баллистическом и квазибаллистическом режимах транспорта на основе функции распределения, средней скорости и других характеристик. Показано, что средняя скорость электронов достигает у конца области истока баллистического предела при $L_k < 10$ нм в случае учета рассеяния.

В работе [62] данная модель применялась для исследования МОП-транзисторов с двойным затвором (L_k от 100 до 10 нм) двух разновидностей: 1) с барьером Шоттки; 2) с легированием областей истока и стока (традиционная структура). Оказалось, что первая разновидность характеризуется лучшей баллистической эффективностью и меньшим обратным рассеянием, что делает ее предпочтительнее при масштабировании.

Отмечу также несколько работ по использованию квантовых коррекций полуклассических моделей на основе других выражений для эффективного потенциала (см. далее). Так, в работе [63] получено соотношение для эффективного

потенциала в случае учета электрон-электронного взаимодействия для применения в сочетании с полуклассическим методом Монте-Карло. Проводилось трехмерное моделирование МОП-нанотранзистора с КНИ-структурой с $L_g = 10$ нм. В результате расчета выходных характеристик установлено, что включение квантовой коррекции существенно снижает ток, крутизну и увеличивает пороговое напряжение транзистора. Однако, судя по приведенным результатам, различие между полуклассической моделью и моделью с учетом эффективного потенциала в области насыщения ВАХ не превышало 25 %. Подобные результаты (около 20 % по току открытого состояния) были получены в более ранних работах для квантовых коррекций на основе двух других выражений для эффективного потенциала для МОП-транзисторов ($L_k = 50$ нм и $L_g = 25$ нм) [53,64,65]. Замечу, что увеличение времени счета по сравнению с полуклассическим методом Монте-Карло без коррекции – невелико (около 10 %) [64].

Иное выражение для эффективного потенциала в сочетании с полуклассическим методом Монте-Карло использовалось в [66]. Моделировались n -МОП-нанотранзистор и с двойным затвором с КНИ-структурой с $L_k = 25$ нм. Учитывалось рассеяние на фононах, шероховатостях и кулоновском потенциале. Исследовались средняя энергия, дрейфовая скорость, зависимость тока стока от толщины канала. Проведено моделирование переходных процессов в нанотранзисторе при подаче различных ступенчатых сигналов на нижний и верхний затворы. Возможность анализа нестационарных процессов с учетом квантовой коррекции представляется особенно ценной в данной модели.

МОП-нанотранзисторы с двойным затвором с L_g от 40 до 5 нм на напряженных слоях кремния канала (одно- и двухосные сжатия и растяжения, различные ориентации канала)

исследовались в [67]. Использовался комплекс программ FALCON, в котором реализован метод Монте-Карло с учетом рассеяния на фонах, примесях и шероховатостях. Проведена также корректировка с целью учета квантовых эффектов и произвольного угла направления токов относительно кристаллографических осей. Зонная структура напряженного кремния рассчитывается с помощью первопринципного (псевдопотенциала) метода, реализованного в программе PHASE. Установлено, что наиболее предпочтительной комбинацией для n -МОП-нанотранзисторов является двухосное растяжение и $\langle 100 \rangle$ направление канала, а для p -МОП-нанотранзистора – одноосное сжатие и $\langle 110 \rangle$ направление канала.

В баллистических приборах ток и шумовые характеристики во многом определяются инжекционными процессами из контактов. В [68,69] предложена инжекционная модель электронов для полевых нанотранзисторов с учетом (или без) квантового ограничения и вырождения для использования в сочетании с методами Монте-Карло. С помощью модели исследовались шумовые характеристики МОП-нанотранзисторов с двойным затвором с размерами каналов: $15 \text{ нм} \times 10 \text{ нм} \times 8 \text{ нм}$; $15 \text{ нм} \times 10 \text{ нм} \times 2 \text{ нм}$; $15 \text{ нм} \times 5 \text{ нм} \times 2 \text{ нм}$. Рассеяние не учитывалось. Оказалось, что с уменьшением размеров канала шумовые характеристики ухудшаются. Частично ухудшение ослабляется с увеличением числа подзон.

Для полуклассических методов Монте-Карло с квантовыми коррекциями на основе эффективного потенциала характерно два существенных недостатка [53]: 1) нарушение принципа неопределенности Гейзенберга; 2) положительная определенность получаемых функций распределения, хотя известно, что функция Вигнера может принимать и отрицательные значения. Интересный подход устранения, по крайней мере, второго недостатка был предложен в [70]. В ней

полуклассический многочастичный метод Монте-Карло используется для неявного решения кинетического уравнения для функции Вигнера. С этой целью вводится дополнительная характеристика, названная авторами сродство частиц (particle affinity). Метод применялся для моделирования резонансно-туннельных диодов (РТД). Замечу, что в работе [71] была проиллюстрирована полезность подхода для физического понимания декогеренции, вызванной взаимодействием с фононами, на нескольких примерах, включая РТД. В моделях данного подхода учтено подобие квантового кинетического уравнения для функции Вигнера и КУБ. Механизмы рассеяния, однако, в них, по-прежнему, трактуются полуклассически. И тем не менее, их целесообразно отнести к квантовым моделям (см. далее).

Комбинированная модель МОП-нанотранзистора с двойным затвором с тонким слоем кремния предложена в статье [72]. В модели в поперечном сечении канала самосогласованно решаются одномерное уравнение Шредингера и двумерное уравнение Пуассона. Далее в электрическом квантовом пределе вдоль канала решаются одномерные уравнения, аналогичные уравнениям диффузионно-дрейфовой модели и полученные из КУБ для баллистического режима работы нанотранзисторов. Важным моментом является то, что при построении дискретной модели в этом случае может использоваться физическая конечно-разностная аппроксимация типа Шарфеттера – Гуммеля (см. [6]). Моделирование стоковой характеристики нанотранзистора с $L_k = 10$ нм показало очень хорошее согласие с моделью, в которой для описания баллистического транспорта применялось непосредственно КУБ. Подобные результаты получены и для внутренних характеристик. Замечу, что при этом не использовалось каких-либо согласующих параметров. Интересные результаты были также получены в [73] с помощью другой комбинированной модели, в которой для описания транспорта вдоль канала используется одномерная упрощенная

модель на основе КУБ в баллистическом режиме в электрическом квантовом пределе. Анализировались стоковые характеристики без учета последовательных сопротивлений стока и истока. Показано, что в открытом состоянии ток контролируется не столько всплеском скорости, а определяется механизмом переноса у вершины потенциального барьера возле истока. При этом наблюдается охлаждение и разогрев в областях у истока и стока, соответственно. В то же время отмечается, что другие обычные полуклассические модели, основанные на моментных уравнениях (см. [5]), не могут адекватно описывать квазибаллистический транспорт в нанотранзисторах.

Комбинированная модель МОП-нанотранзистора была предложена в [74]. Уравнения Пуассона и Шредингера (одномерные в сечениях с учетом анизотропии эффективной массы) решаются самосогласованно в двумерной области сильного квантового ограничения. Для этого также используется теория функционала плотности. В других областях структуры применяется полуклассическое приближение. Транспорт считается баллистическим и описывается упрощенным выражением для плотности тока подзоны. Полная плотность тока вычисляется как сумма плотностей токов всех подзон. Туннелирование между истоком и стоком не учитывается, "так как оно пренебрежимо мало даже для приборов с длиной канала до 10 нм". Для самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера после дискретизации используется метод Ньютона – Рафсона с экстраполяцией. В результате моделирования нанотранзистора с $L_k = 25$ нм было установлено, что фактически только нижняя подзона занята носителями, т.е. допустимо приближение электрического квантового предела. Рассчитывались стоковые характеристики и крутизна транзистора. Сравнение с программой MEDICI

* Другие результаты группы проф. М. Лундстрёма рассмотрены далее, хотя некоторые из них могли описываться в этом разделе.

(диффузионно-дрейфовая модель с квантовыми поправками) выявило различия в токе насыщения и крутизне. Программа, реализующая описанную модель, предназначена для современных ПЭВМ.

n-МОП-нанотранзисторы самосовмещенные с двойным затвором одно-, трех- и пятиреберные (FinFET) исследовались в [75]. Для этого использовалась комбинированная двумерная численная модель, основанная на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона по методу конечных разностей. Для вычисления плотности тока электронов применялись уравнения (для плотности тока и непрерывности) диффузионно-дрейфовой модели. Рассчитывались стоковые и сток-затворные характеристики транзисторов с $L_k = 30$ нм и толщинами ребра от 10 до 75 нм. Результаты сравнивались с экспериментальными данными и полученными по диффузионно-дрейфовой модели (без квантовых коррекций). Оказалось, что при расчете стоковых характеристик комбинированная модель приводит к приблизительно на 30 % более низким значениям токов по сравнению с диффузионно-дрейфовой моделью и лучше согласуется с экспериментальными данными. В целом, результаты показали необходимость использования квантовой коррекции для анализа рассмотренной конструкции нанотранзистора для $L_k < 30$ нм.

Интересная комбинированная модель, основанная на самосогласованном решении в стационарном случае одномерных КУБ (вдоль канала по подзонам), двумерных уравнений Шредингера (поперек канала) и трехмерного уравнения Пуассона, построена в работе [76]. Для упрощения и развязки для исходного КУБ применяются допущения: приближения времени релаксации и эффективной массы; отсутствуют взаимодействия между подзонами. При численном решении дискретных аналогов уравнений используется приближенный метод Ньютона. Модель применена для

моделирования МОП-нанотранзисторов с коаксиальной структурой (окружающий затвор) на квантовой проволоке с $L_z = L_k$ от 20 до 9 нм и диаметром Si d от 3 до 10 нм с толщиной оксида $t_{ox} = 0,8$ нм при $T = 300$ К в квазибаллистическом режиме функционирования. Проведено сравнение с результатами квазитрехмерной модели на основе формализма неравновесных функций Грина [77] (см. далее) с учетом электрон-фононного взаимодействия. Получено хорошее согласование по стоковым ВАХ. При этом в комбинированной модели время релаксации в подзоне настраивалось с привлечением эффективной подвижности (постоянная) так, чтобы получить согласование с расчетами по квазитрехмерной модели в области насыщения выходных ВАХ. Показано, что приближение эффективной массы (параболическая аппроксимация) может использоваться вплоть до диаметров кремния в 3 нм. С уменьшением d наклон подпороговой характеристики улучшается, однако, пороговое напряжение $V_{пор}$ становится более чувствительным к девиациям d . Наряду с рассеянием на шероховатостях эти два фактора становятся важными при масштабировании рассмотренного вида нанотранзисторов. Определены также ток открытого и закрытого состояний. Интересным результатом является зависимость первого тока от длины затвора, что почти не имеет места в баллистическом режиме. Сравнение с результатами по квазитрехмерной модели показало, что прямое туннелирование между истоком и стоком незначительно при $L_z \geq 10$ нм, что согласуется с данными других авторов. Установлено, что для хорошего электростатического контроля в нанотранзисторе с окружающим затвором необходимо, чтобы $d < 2/3 L_z$. В работе [78] комбинированная модель применялась для МОП-нанотранзистора с коаксиальной структурой на кремниевой квантовой проволоке с $L_z = 8$ нм при $T = 300$ К. При этом учитывалось рассеяние на акустических и междолинных

фонах, шероховатостях границ раздела Si/SiO₂, ионизированных примесях, а также непараболичность зон. Установлена возможность флуктуаций дифференциальной проводимости на выходных ВАХ нанотранзистора.

Флуктуации различных конструктивно-технологических параметров элементов представляют, как известно, серьезную проблему разработки и создания СБИС и УБИС (сверх- и ультрабольших ИС) микроэлектроники. Она еще более обостряется для нанoeлектроники, в частности для рассматриваемого диапазона длин каналов и затворов нанотранзисторов с МДП-структурой. Можно выделить два известных качественно различных подхода к исследованию с помощью математических моделей влияния флуктуаций конструктивно-технологических параметров на электрические характеристики элементов ИС. В первом подходе метод Монте-Карло или другой способ используется для выборки параметров, например концентрации примеси, толщины оксида и т. п., а далее рассчитываются для выбранных параметров электрические характеристики элемента, как правило, по полуклассической модели (см. ранее). Этот подход очень не экономичен и вряд ли может применяться в сочетании с квантовыми моделями элементов ввиду необходимости большего числа расчетов по ним. Второй подход часто использовался в сочетании с полуклассическими моделями при исследовании чувствительности электрических характеристик к девиациям различных параметров. В этом случае на предварительном этапе осуществляется линеаризации, как правило, дискретных уравнений базовой модели, а далее осуществляется прямое решение соответствующих уравнений с целью определения флуктуаций анализируемых электрических характеристик в зависимости от изменения исследуемых параметров. Этот подход является намного экономичнее первого, так как исключается необходимость большого числа расчетов по базовой модели элемента.

В работе [79] рассмотрено влияние случайного распределения примеси и флуктуаций толщины оксида на электрические характеристики МОП-структур. Предложена экономичная методика оценки флуктуаций порогового напряжения, основанная на линеаризации дискретных уравнений модели (второй подход). В качестве базовой для МОП-нотранзисторов разработана комбинированная двумерная модель, в которой самосогласованно решаются уравнения диффузионно-дрейфовой модели (в предположении постоянства уровня Ферми в полупроводнике при малых прикладываемых смещениях) и в поперечных сечениях канала в инверсионном слое одномерные уравнения Шредингера. В результате значительно упрощается и вычисление порогового напряжения по сравнению с более строгими квантовыми моделями (см. далее). Расчеты показали, что квантовомеханические эффекты усугубляют ситуацию и увеличивают девиации порогового напряжения в рассматриваемых случаях приблизительно на 10 – 15 % для транзисторов с $L_k \leq 25$ нм.

В заключение рассмотрения моделей полуклассического подхода не могу не отметить важные и весьма успешные усилия по разработке численных моделей, основанных на решении КУБ [80,81], но не с помощью явного или неявного использования для численного решения методов Монте-Карло [82].

Таким образом, модели полуклассического подхода продолжают развивать и с успехом использовать для анализа кремниевых МОП-нотранзисторов. С их помощью удастся наиболее рационально разрешить одну из основных проблем моделирования – проблему компромисса "адекватность – реализуемость" модели (AP-проблема [6,59]). В то же время диффузионно-дрейфовая модель по-прежнему остается "рабочей лошадкой" инженера. Основным и эффективным направлением модернизации моделей полуклассического подхода становится введение разнообразных квантовомеханических

коррекций, в том числе в рамках комбинированных моделей. Так как когда делать коррекции поперек канала, в общем-то, ясно, то возникает важный вопрос: "Когда их целесообразно делать вдоль канала?" Ответ на него может быть, в принципе, получен с применением более последовательных дискретных моделей, рассматриваемых ниже.

8.2. Модели квантовомеханического подхода

В предыдущих главах было показано, что для приборных структур нанoeлектроники можно построить подобную иерархию основных классов моделей, как и для элементов микроэлектроники, а именно [83]: квантовые кинетические модели; квантовые методы Монте-Карло; квантовые гидродинамические модели; квантовые квазигидродинамические модели; квантовые диффузионно-дрейфовые модели; комбинированные модели. Модели данных классов разрабатываются и для кремниевых нанотранзисторов с МДП-структурой с целью детального исследования квантовомеханических эффектов в них. Рассмотрим эти модели. Прежде всего, нельзя не остановиться на некоторых упрощенных моделях, учитывая их важность.

Упрощенная квантовомеханическая модель баллистического n -МОП-нанотранзистора в рамках формализмов волновых функций (метод эффективной массы, приближение Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна (ВКБ) и др.) и Ландауэра была предложена в работе [84]. В ней получено выражение для тока стока без подвижности, причем ток зависит от ширины канала и не зависит от длины канала. Выражение может быть обобщено для других баллистических полевых транзисторов (p -МОП, нанотранзистора с двойным затвором, гетероструктурного полевого транзистора с селективным легированием (HEMT)). Так как не учитываются процессы рассеяния, то полученные

соотношения могут использоваться для оценок максимально достижимых токов для рассмотренных нанотранзисторов. Получено удовлетворительное согласование при расчете ВАХ нанотранзистора с двойным затвором ($L_k = 30$ нм) по разработанной модели и полуклассическому методу Монте-Карло частиц [54].

Простые модели для тока насыщения и в линейной области наномасштабных кремниевых транзисторов на основе использования коэффициентов прохождения и отражения в рамках формализма Ландауэра (см. [4]) были предложены в [85,86]. С их помощью получена количественная связь тока стока в этих областях с подвижностью инверсионного слоя почти равновесного состояния длинноканального МОП-транзистора [87]. Следовательно, было показано, что такая подвижность остается важным параметром и для приборных структур с $L_k < 100$ нм.

Баллистический транспорт в кремниевом нанотранзисторе с двойным затвором с $L_k = 10$ нм и менее при $T = 300$ К исследовался в [88]. Для этих целей использовалась простая одномерная модель на основе упрощенного уравнения Пуассона и уравнения для плотности баллистического тока. В соответствии с полученными оценками оказалось, что предельные минимальные длины канала для логических схем около 10 нм, и для схем памяти ~ 4 нм.

В дальнейшем упрощенные модели МОП-нанотранзисторов в баллистическом режиме функционирования продолжали разрабатываться, как правило, в рамках формализма Ландауэра – Буттикера. Так, в статье [89] была предложена модель, применимая не только для приборных структур, включающих квантовые ямы, но и квантовые проволоки. С ее помощью получено удовлетворительное согласование с результатами моделирования по программе nanoMOS (см. далее), а также с

экспериментальными данными по крутизне МОП-транзистора на квантовой проволоке с окружающим затвором.

Теоретическое исследование предельно достижимых электрических характеристик кремниевого МОП-транзистора с проектными нормами 100 нм проведено в [90]. Транзистор анализируется в баллистическом режиме функционирования (баллистический предел) и когда толщина оксида устремляется к нулю. Используется упрощенный подход, подобный применяемому в модели [84], дополненный самосогласованным решением одномерных уравнений Шредингера (с учетом обменных и корреляционных взаимодействий) и Пуассона в поперечном сечении канала. Рассчитывались стоковые, сток-затворные ВАХ, крутизна и другие характеристики. Показано, что даже в этом идеальном случае предел по крутизне будет ниже по сравнению с таковым для биполярного транзистора (так называемый биполярный предел). Отмечается, что на практике электрические характеристики при уменьшении L_k будут хуже, чем для случая баллистического предела, вследствие влияния последовательных сопротивлений стока и истока, рассеяния на фононах, границах раздела Si/SiO₂, отражений в канале, а также от стока и истока.

Здесь уместно вспомнить, что в квантовой механике любое взаимодействие микрочастицы может интерпретироваться как "столкновение" [92]. Поэтому электрон в нанотранзисторе, взаимодействуя с любым объектом, например другим электроном, испытывает столкновение, а следовательно, *точнее говорить не о баллистическом режиме (это идеал), а о квазibalлистическом режиме работы реальных нанотранзисторов.*

* Аналогичный подход использовался для анализа предельных характеристик нанотранзисторов на углеродных нанотрубках [91].

** Более того, в соответствии с квантовой теорией поля реальная микрочастица взаимодействует даже с вакуумом.

И тем не менее, исследования нанотранзисторов в баллистическом режиме функционирования очень полезны, так как при этом устанавливаются предельно достижимые характеристики приборных структур соответствующего конструктивно-технологического варианта.

Интересная упрощенная комбинированная модель описана в [93]. Чтобы отказаться от метода эффективной массы, метод эмпирического псевдопотенциала модифицирован на случай расчета электронной структуры нанотранзисторов, содержащих около миллиона атомов. Моделировалась активная область *n*-МОП-нанотранзистора традиционной структуры с $L_k = 25$ нм. Для дырок использовался полуклассический подход, а при описании транспорта применялось ВКБ-приближение. Рассчитывались *C-V*- и *I-V*-характеристики.

Нельзя не остановиться на результатах работы [94]. В ней рассмотрены четыре разновидности МОП-нанотранзисторов на кремниевых квантовых проволоках, а именно: 1) с барьером Шоттки; 2) с легированными областями истока и стока (традиционная структура); 3) с ударной ионизацией; 4) с туннелированием. При анализе использовались как аналитические модели, так и упрощенные численные, в том числе основанная на формализме неравновесных функций Грина. Сильной стороной работы является сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными, полученными самими авторами, для всех разновидностей нанотранзисторов, т.е. выводы не носят чисто теоретический характер. Наиболее интересными выводами работы являются: 1) контакты определяют электрические характеристики первых двух разновидностей нанотранзисторов и даже их нельзя рассматривать как простой набор резисторов, поэтому свойства нанопроволок не могут быть легко определены, исходя из данных для нанотранзисторов; 2) МОП-нанотранзистор с ударной ионизацией с вертикальной структурой может обладать

очень крутыми передаточными характеристиками и эффективным подавлением деградации, связанной с горячими электронами; 3) уменьшение диаметра квантовой проволоки позволяет в МОП-нанотранзисторе с (межзонным) туннелированием достичь подпороговой крутизны лучше, чем 60 мВ/дек; 4) функционирование нанотранзисторов в "пределе квантовой емкости", когда распределение потенциала в канале определяется потенциалом затвора, а не зарядом в канале, – желательно. В результате авторы делают общий вывод о том, что "квантовые проволоки с малым диаметром – главный выбор для будущих применений в наноэлектронике, так как они не только позволяют продолжать масштабирование вследствие улучшенного электростатического контроля, но также обеспечивают дополнительные возможности для альтернативных концепций приборов, которые не допустимы в планарной технологии сегодняшнего дня".

Отмечу также две методические работы [95,96], в которых было показано, что даже такой сложный формализм, как формализм функций Грина, может использоваться для построения относительно простых моделей приборных структур наноэлектроники, включая нанотранзисторы. В рассматриваемых случаях, по-существу, иллюстрируется полезность понятия "грубости модели" [6]. Данный подход особенно эффективен для понимания физики приборов, в учебных целях.

В целом, использование упрощенных моделей нанотранзисторов может быть полезным для анализа базовых физических закономерностей их функционирования, включая масштабирование, особенно если эти исследования подкреплены обоснованием таких моделей с привлечением более

* Мне кажется этот вывод излишне категоричным, несмотря на большую перспективу приборных структур на квантовых проволоках (см. [4]), однако, время покажет (см. также далее).

строгих численных моделей (см., например, [97,98]) либо экспериментальных данных (см., например, [94]).

Сначала остановимся на моделях для расчета C - V -характеристик МОП-структур. Здесь, прежде всего, следует отметить пионерские работы Ф. Стерна с коллегами по моделированию поверхностных инверсионных слоев в кремнии (см. [99,100] и обзор [43]). Основой этих работ является самосогласованное численно решение уравнений Пуассона и Шредингера в приближении эффективной массы в одномерном случае (поперек слоя). При этом были предложены и апробированы несколько итерационных методов, а также критерии завершения итераций. В дальнейшем некоторые аспекты (методы, способы и предположения) этих фундаментальных работ изменялись. Мы не будем делать полный обзор последующих работ, а остановимся на наиболее важных для нас результатах в связи с поставленной в данной главе целью. Кроме того, уже отмечалось, что проблема описания МОП-нанотранзисторов "поперек канала" является менее острой, чем "вдоль канала".

И тем не менее, существует непростой вопрос о применимости понятия емкости для наноструктур, которая, строго говоря, является макроскопической характеристикой. В статье [101] было, однако, показано, что 2D-электронный газ в квантовой яме и инверсионном слое может быть представлен в качестве "квантовой емкости". В дальнейшем это понятие было обобщено для описания емкостных характеристик наноструктур, включающих островки проводников (металла или полупроводника), разделенных диэлектриком, в частности, было выделено три составляющие в элементе матрицы емкостей [102]: классическая; определяемые плотностью состояний и распределением электронного заряда внутри проводника островка. Анализ C - V -характеристики на основе самосогласованного численного решения уравнений Пуассона и Шредингера для кремниевого МОП-транзистора с двойным

затвором с КНИ-структурой (толщина оксида 5 нм) показал [102], что доминирующий относительный вклад вносит классическая составляющая, а две другие, в которых важны квантовые эффекты, – 5,4% и 6,8%, соответственно.

В дальнейшем понятие "квантовая емкость" с успехом использовалось некоторыми авторами для анализа ряда других низкоразмерных систем. Так, в [103] с ее применением был проанализирован полевой транзистор на углеродной нанотрубке, т.е. квази1D системе. Было показано, что квантовая емкость может оказывать значительное влияние на крутизну транзистора. В целом, это понятие может быть полезным при построении компактных моделей приборных структур нанoeлектроники, включая МДП-нанотранзисторы.

В настоящее время предложено большое число моделей, предназначенных для расчета вольт-фарадных характеристик МОП-структур, в том числе с учетом квантовых эффектов. Следуя работам Ф. Стерна с соавторами, *основным здесь является формализм волновых функций*. Интересные исследования описаны в работе [104]. В ней было проведено сравнение пяти пакетов программ (NEMO, UTQuant, CVC и др.), с помощью которых возможен расчет C-V-характеристик МОП-структур с учетом квантовомеханических эффектов в одномерном приближении. Во всех используются различающиеся модели, включая основанную на формализме неравновесных функций Грина (NEMO) и упрощенную (CVC). Моделировались *n*-канальные МОП-конденсаторы с поликремниевым затвором со следующими параметрами: толщины оксида $t_{ox} = 1,0; 2,0; 3,0$ и $10,0$ нм; уровни легирования подложки $N_d = 10^{15}; 10^{17}; 3 \cdot 10^{17}$ и 10^{18} см⁻³ и поликремния $N_{poly} = 10^{19}; 5 \cdot 10^{19}$ и 10^{20} см⁻³. Двумя важными в рассматриваемых случаях факторами являются: квантовое ограничение и конечное падение напряжения на

поликремниевом затворе. Оказалось, что, хотя и имеются количественные различия между результатами (до 20%), они находятся в рамках экспериментальной погрешности. Наибольшее отличие имеет место в области аккумуляции заряда. Неожиданно малое отличие наблюдается в области инверсии. В то же время качественный вид C-V-характеристик во всех случаях одинаков.

Впоследствии программное обеспечение (и соответствующие модели) на основе самосогласованного численного решения уравнений Шредингера и Пуассона продолжали совершенствоваться, как на случай многомерного анализа, так и по пути дальнейшей универсализации, повышения удобства работы и т.п. Так, программа двумерного моделирования [105] использовалась для сравнения различных конструкций МОП-нанотранзисторов с многими затворами. В то же время интересными возможностями программы VSP [106] являются: применимость для моделирования различных структур, учет влияния поверхностного заряда, туннельных токов. При этом одним из самых популярных у западных коллег стал предиктор-корректор итерационный метод последовательного самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона [107], апробированный первоначально авторами при моделировании приборной структуры, включающей квантовую проволоку, в двумерном случае.

В целом, с применением численных самосогласованных моделей удается получить хорошее согласование с экспериментальными данными при расчете вольт-фарадных характеристик МОП-структур. С помощью таких моделей может быть проведена идентификация таких важных параметров как толщина оксида t_{ox} , концентрация примеси в подложке, на границе раздела и др. [108], т.е. решена и обратная задача. Однако ниже $t_{ox} \approx 1,5$ нм уже необходимо учитывать туннельный ток затвора. Хотя и разработаны неплохие квазистационарные модели и для этих

случаев в рамках формализма волновых функций (см., например, [108]), перспективный путь – разработка моделей, включающих кинетические уравнения. Так, в работе [109] была предложена модель, базирующаяся на решении основного уравнения Паули с помощью метода Монте-Карло, которая предназначена для моделирования туннельного тока МОП-структур, РТД и др. (см. также [83]).

Не менее интересные результаты получены с использованием квантовых макроскопических моделей при расчете ВАХ. В соответствии с указанной выше классификацией к ним относятся: квантовые гидродинамические модели, квантовые квазигидродинамические модели, квантовые диффузионно-дрейфовые модели и некоторые комбинированные модели. Модели всех отмеченных классов могут применяться при моделировании кремниевых МДП-нотранзисторов. В литературе приведены неплохие обзоры в статьях по квантовым гидродинамическим, квазигидродинамическим и диффузионно-дрейфовым моделям как с физической [53, 110 – 114], так и с математической точек зрения [112]. Рассмотрим наиболее важные результаты.

Уравнения квантовой гидродинамики могут быть получены разнообразными способами. В настоящее время для полупроводников это было показано в рамках формализмов: волновых функций; матриц плотности; функций распределения Вигнера и функций Грина. Отмечу, что вид основных уравнений соответствует таковым классической гидродинамики [5]. Различия, однако, возникают при получении условий замыкания. И вот тут замыкающие соотношения, включающие квантовые коррекции, могут отличаться в зависимости от способа вывода, а также используемых предположений.

* Ряд бесспорно интересных результатов был получен математиками, однако, к сожалению, мы не имеем возможности их детально рассмотреть ввиду ограниченности объема. Заинтересованный читатель может с ними познакомиться в указанной литературе.

Интересное и достаточно общее рассмотрение с единой позиции применяемых в настоящее время в зарубежной литературе квантовых макроскопических моделей было проведено в [113] в рамках метода неравновесного статистического оператора в сочетании с принципом максимума энтропии (см., например, прекрасный монографический учебник [115]). В статье [113] также дан последовательный вывод уравнений квантовых гидродинамических, квазигидродинамических и диффузионно-дрейфовых моделей.

В то же время в [116] рассмотрены возможные квантовые коррекции к потенциалу в гидродинамических уравнениях. Замечу, что иногда они отличаются лишь значением численного множителя. Как уже отмечалось, различия связаны со способом вывода и сделанными при этом физическими предположениями. В статье была получена достаточно общая форма для квантового потенциала в асимптотическом пределе, а также вид эффективного потенциала в предельном переходе к гидродинамическим уравнениям. Показано, что квантовый потенциал является нелокальной величиной. Отмечается разница между квантовым потенциалом и эффективным потенциалом, входящим в гидродинамические уравнения. Последний включает первый и вводится авторами в рамках фсйнмановских интегралов по траекториям и в связи с этим очень удобен в использовании в сочетании с методом Монте-Карло (см. ранее).

В настоящее время квантовые гидродинамические модели используются не часто при моделировании РТД и МОП-транзисторов. Основными среди квантовых макроскопических моделей являются наиболее простые квантовые диффузионно-дрейфовые модели. Во многом это связано с тем, что они обладают выделенными ранее преимуществами в полном объеме. Поэтому и остановимся на них более подробно.

Прежде всего, отмечу, что основные уравнения известных квантовых диффузионно-дрейфовых моделей могут быть представлены в едином виде (см., например, [114]). Даже поверхностный анализ показывает, что он совпадает с видом уравнений диффузионно-дрейфовой модели для случая учета эффектов сильного легирования. Так, в обозначениях \tilde{A} , $\Delta\tilde{V}_g$ работы [5]:

$$\tilde{A}\Delta\tilde{V}_g = G_n; \quad (1)$$

$$-(1 - \tilde{A})\Delta\tilde{V}_g = G_p, \quad (2)$$

где G_n , G_p – квантовые коррекции к электростатическому потенциалу для электронов и дырок, но уже квантовых диффузионно-дрейфовых моделей. Таким образом, непосредственно изменяются не основные уравнения, а лишь соотношения для G_n , G_p , т.е. \tilde{A} , $\Delta\tilde{V}_g$ в старых обозначениях, а, следовательно, и способы их вычисления. Это и приводит к соответствующим модификациям моделей. Отмеченный факт совпадения имеет большие последствия, а именно: *многие наработки по методам (способам и др.) построения и реализации дискретных диффузионно-дрейфовых моделей (см. [5,6]) должны быть применимы и эффективны и в этом (квантовом) случае.* Дальнейшее рассмотрение во многом подтвердит выделенное утверждение.

Одной из первых* квантовых диффузионно-дрейфовых моделей была модель, предложенная в статье [118], для описания инверсионного слоя МОП-конденсатора. Модель получила неудачное название**, а именно: "модель (метод) градиента

* Уже отмечалось, что к квантовым моделям мы не относим модели с учетом эффектов сильного легирования, включая вырождение. Замечу лишь, что реализация соответствующих дискретных моделей может быть не менее сложной (см., например, [58,117]), чем рассматриваемых далее моделей.

** Не следует путать с разложением по градиенту плотности, например, в теории функционала плотности.

плотности". Уравнение для плотности тока было выведено исходя из кинетического уравнения для одночастичной функции Вигнера в первом приближении [119]. В уравнении, например, для электронов G_n задается с помощью соотношения

$$G_n = 2b_n \left(\frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right), \quad (3)$$

где n – концентрация электронов, b_n – параметр, пропорциональный \hbar^2 . Таким образом, $G_n \rightarrow 0$ при $\hbar \rightarrow 0$, т. е. в этом пределе основные уравнения модели совпадают с фундаментальной системой уравнений (ФСУ) в традиционном виде [5].

Считается, что с помощью данной модели могут быть описаны эффекты квантового ограничения и туннелирования, т.е. чисто квантовые эффекты. Так, применимость модели градиента плотности была проиллюстрирована на примерах моделирования туннелирования в металл-изолятор-металл структурах [120], туннельного тока затвора МОП-структур с толщиной оксида от 1,1 до 4 нм [121], квантового ограничения в МОП-конденсаторах (C-V-характеристики, V_{nop}) [122 – 124], причем было получено хорошее согласование с экспериментальными данными.

При двумерном моделировании МОП-нанотранзисторов с $L_3 = 30$ нм в [122,124] использовалась программа общего назначения PROPNET для решения дифференциальных уравнений в частных производных на основе методов конечных разностей и конечных элементов в одно-, двух- и трехмерном случаях. Для решения нелинейных алгебраических уравнений использовался метод Ньютона. Оказалось, что количество итераций приблизительно в три раза больше, чем при решении уравнений дискретной диффузионно-дрейфовой (полуклассической) модели при изменении шага по напряжению в 0,1 В. Сходимость

при этом всегда линейная и ухудшается с ростом смещений. При моделировании выходных ВАХ было установлено [124], что квантовая модель приводит к значениям тока стока, которые от 20% до 70% ниже по сравнению с полуклассической моделью. В подпороговой области крутизна изменяется менее значительно от 90 – 92 мВ/дек (полуклассическая модель) до 105 – 110 мВ/дек (квантовая модель), т.е. приблизительно на 14 – 16%. В то же время сдвиг по пороговому напряжению составляет около 150 – 200 мВ для приборов с L_g от 100 до 30 нм. При расчете ветви ВАХ для одного из примеров модель градиента плотности оказалась менее экономичной по сравнению с диффузионно-дрейфовой моделью по машинным затратам времени приблизительно в 5,3 раза (обычно в 2 – 10 раз). И в то же время более строгие квантовые модели требуют вычислительных затрат на порядки больше, что делает использование модели градиента плотности оправданной и для инженерных приложений.

Программа PROPNET применялась в работе [125] для двумерного анализа МОП-нотранзистора с двойным поликремниевым затвором ($L_g=25$ нм). В модели градиента плотности коэффициенты b_n , b_p (для дырок) настраивались с помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. В этом плане модель близка к комбинированной модели* [126] (см. далее). Показано, что в исследуемом случае квантовый эффект в поликремниевом затворе приводит к большему усилению короткоканальных эффектов, нежели непосредственно в слое кремния нанотранзистора. Проблематичным является моделирование материала затвора

* Замечу, что иногда грань между комбинированной моделью и моделью соответствующего класса базовой модели бывает очень тонкой. Более того, иногда подобные комбинированные модели интерпретируются как модели класса базовой модели, что, строго говоря, неверно (см. далее).

кремнием (100). Несмотря на эту неточность, авторы считают, что получили качественно правильные результаты.

Интересные данные были получены в [127]. В ней модель градиента плотности сравнивалась с расчетами по методу неравновесных функций Грина для описания туннелирования в стационарном одномерном случае для полупроводник-изолятор-полупроводник структуры. Было получено хорошее согласование при расчте ВАХ. Небольшое отличие может быть устранено путем подгонки всего лишь одного параметра τ (входящего в b_n). По мнению авторов отличие в рассматриваемом случае связано с тем, что модель градиента плотности не описывает интерференционные эффекты и не совсем адекватно квантовое ограничение.

Квантовая диффузионно-дрейфовая модель с отличающейся от [118,119] коррекцией для G_n была предложена в [128]. При построении дискретной модели использовался метод интегрирования на ячейке в рамках метода конечных разностей, что позволяет, в принципе, применить ее к приборным структурам со сложными границами (см., например, [6,39,40]). При аппроксимации уравнения для плотности тока используется формулировка типа Шарфеттера – Гуммеля [6]. Неожиданным по мнению авторов является худшая сходимость итераций метода Ньютона при решении системы нелинейных алгебраических уравнений дискретной модели по сравнению со случаем решения уравнения Шредингера. Самосогласованное решение уравнений Шредингера и Пуассона в одномерном случае применялось для сравнения. Моделировались кремниевые МОП-конденсатор, МОП-транзистор и МОП-нанотранзистор с двойным затвором с КНИ-структурой. Сравнение результатов проведено с использованием пяти моделей, включая диффузионно-дрейфовую модель. В целом, получено хорошее согласование результатов моделирования по предложенной квантовой модели для МОП-конденсатора и

МОП-транзистора с более адекватной моделью, основанной на решении уравнения Шредингера. Следует, однако, заметить, что разработанная модель недооценивает эффект пространственного квантования (см. ранее). Как следствие, при расчете передаточных ВАХ нанотранзистора с $L_k = 50$ нм было получено регулярное небольшое превышение тока стока по сравнению с полученным с применением более адекватной модели.

Другим вариантом квантовых диффузионно-дрейфовых моделей являются модели, в которых квантовая коррекция осуществляется на основе метода эффективного (сглаженного) потенциала, учитывающего "размер электрона", т.е. связанного с ним волнового пакета, [116,129] (см. также ранее). В работах [130,131] проводилось сравнение модели градиента плотности и на основе метода эффективного потенциала при трехмерном расчете порогового напряжения, плотности носителей заряда и ВАХ МОП-нанотранзисторов с L_k от 100 до 30 нм. Проводилось также сопоставление с соответствующими результатами самосогласованной модели, основанной на одномерном решении уравнений Шредингера и Пуассона. В целом, получено хорошее согласование результатов моделирования, однако, более экономичной и адекватной (при расчете распределения концентрации электронов) среди макроскопических моделей оказалась модель градиента плотности. Исследование [131] статистического разброса $V_{пор}$ показало хорошее согласование двух моделей для МОП-нанотранзисторов с L_k от 50 до 20 нм. В последующей работе [132] показано, что флуктуации эффективной длины канала вследствие случайного распределения примесей в истоке и стоке приводят к малым девиациям порогового напряжения при уменьшении L_s с 30 до 10 нм. В то же время токи закрытого и открытого состояний подвержены более значительным флуктуациям, особенно с уменьшением L_k . Для этих целей использовалась модель градиента плотности. Замечу, что проведение подобных

исследований по статистическому разбросу различных электрических параметров в часто требуемом трехмерном случае возможно лишь с помощью подобных достаточно экономичных моделей. Кроме того, было проиллюстрировано, что модель градиента плотности качественно правильно описывает прямое туннелирование в МОП-нанотранзисторе с двойным затвором при уменьшении L_z с 30 до 6 нм.

Метод эффективного потенциала может использоваться и для построения более простых моделей. Так, только одномерное уравнение Пуассона численно решалось с квантовой коррекцией потенциала в рамках данного метода для МОП-транзисторов с одним, двойным и окружающим затворами [133]. Было исследовано поведение электростатического потенциала и заряда, которые подтвердили лучшую контролируемость затвором в МОП-транзисторе с окружающим затвором.

Важно отметить, что в настоящее время применяются и предложены новые конечно-разностные аппроксимации типа Шарфеттера – Гуммеля (см. [6]) для случая использования квантовых диффузионно-дрейфовых моделей [114,128,134,135]. Построены методы решения уравнений соответствующих дискретных моделей [112,114], которые могут быть отнесены к классу одноступенчатых методов [41,58]. Используется [112] и классический метод выбор начального приближения [41,58]. Замечу, что в системе моделирования SIMBA при реализации квантовой гидродинамической модели также применяется одноступенчатый метод последовательной концепции в трехмерном случае [136]. Интерес представляет распространение многоступенчатых методов, предложенных для обобщенной гидродинамической модели [5,6,41], и на рассматриваемый случай модели. Разрабатываются разностные схемы и для нестационарного анализа [112].

В целом, проведенные исследования подтверждают применимость и эффективность многих идей, подходов и

методов, использованных при построении и реализации наиболее надежных и экономичных дискретных диффузионно-дрейфовых моделей, и для квантовых моделей. Это чрезвычайно важно, так как допускает быструю практическую реализацию последних моделей. Таким образом, класс квантовых диффузионно-дрейфовых моделей достойно продолжает "эстафету" полуклассических диффузионно-дрейфовых моделей.

Остановлюсь на некоторых результатах, полученных для последних моделей, использование которых перспективно и для квантового случая.

В работе [137] была предложена высокоэкономичная оптимизационная процедура на основе диффузионно-дрейфовой модели, эквивалентная по затратам нескольким решениям уравнений этой модели. Оптимизация проводится по достижению необходимых значений выходного тока при заданных напряжениях. Оптимизируемой характеристикой является профиль легирования.

Отмечу и методологию автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур [41,138 – 141]. Её применение может быть интересным, прежде всего, в инженерных приложениях, в частности для систем автоматизированного проектирования (САПР).

Интерес также представляет разработка многоступенчатых последовательных методов реализации дискретных моделей [41,58].

Остановимся на комбинированных моделях. Некоторые из них представимы в виде соответствующем квантовым диффузионно-дрейфовым моделям. Так, в работе [114] показано, что модель [126] может быть интерпретирована как квантовая диффузионно-дрейфовая модель, в которой коррекции потенциала G_n и G_p определяются на основе вычисления

плотности состояний в результате самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона в двумерном случае только в выделенной "квантовой области". В соответствии с проводимой в книге систематизацией ее все же правильнее отнести к классу комбинированных моделей. С ее помощью авторами была показана важность учета квантовых эффектов при расчете ВАХ МОП-нанотранзистора с $L_3 = 25$ нм и L_K от 20 до 10 нм, в частности на пороговое напряжение, наклон подпороговой характеристики, ток закрытого состояния.

В работе [114] проводилось сравнение диффузионно-дрейфовой, градиента плотности и отмеченной комбинированной моделей при двумерном моделировании МОП-нанотранзистора с $L_K = 15$ нм. Установлено, что, хотя все модели дают различающиеся результаты, в том числе по ВАХ, две квантовые модели все же ближе по качеству результатов. Показано, что с помощью коэффициента квантовой диффузии модель градиента плотности может быть согласована с комбинированной моделью. Важной в статье является и иллюстрация применимости формулировки типа Шарфеттера – Гуммеля при дискретизации уравнений по методу конечных элементов и разработанного последовательного итерационного метода типа одноступенчатых [41,58] решения дискретных уравнений для двух использованных квантовых моделей. Комбинированная модель, однако, требует приблизительно в 10 раз больше времени ЭВМ по сравнению с моделью градиента плотности (около 5 мин на РС с 700 МГц PСС-G3 процессором на точку ВАХ).

Среди других комбинированных моделей на основе квантовых макроскопических моделей отмечу модели Обухова И.А. с соавторами (их описание дано в [142]), примененные для моделирования ряда приборов на квантовых проволоках и РТД (см. также [4,83]), и нестационарную модель работ [143 – 145], использованную для моделирования РТД. Для последней модели

показано, что при определенных условиях предложенная авторами полунеевая разностная схема сходится к решению дискретных аналогов уравнений Шредингера и Пуассона [144].

Далее рассмотрим сначала более строгие дискретные модели формализма волновых функций.

Модель n -МОП-нанотранзистора с двойным затвором с учетом туннелирования предложена в [146]. Она основана на численном решении двумерного уравнения Пуассона. Важными в модели являются полученные упрощенные соотношения для плотности заряда в канале (легирование отсутствует, баллистический режим, одна подзона), стоке и истоке, а также коэффициента прохождения (ВКБ-приближение). Ток вычисляется по формуле типа Тсу – Есаки. Расчет стоковых и сток-затворных характеристик проведен для транзисторов с $L_k = 12$ нм и $L_k = 8$ нм. Основной вывод – нанотранзисторы с двойным затвором с $L_k = 8$ нм могут использоваться в цифровых схемах. МОП-нанотранзисторы с КНИ-структурой с двойным затвором с тонким слоем кремния также анализировались в баллистическом режиме функционирования в последующих работах [10,147]. Вместо ВКБ-приближения в модифицированной модели самосогласованно численно решаются одномерное уравнение Шредингера (вдоль канала) и двумерное уравнение Пуассона. Ввиду тонкости канала энергия квантового ограничения находится из простого соотношения. Рассчитывались стоковые и сток-затворные характеристики транзисторов с длинами затвора 10; 5 и 2,5 нм ($L_z > L_k$). Оказалось, что основной вывод, полученный ранее, остается в силе, т.е. приборы с длинами канала около 5 нм могут применяться в логических ИС и ИС памяти. Однако пороговое напряжение этих ультракоротких приборов очень чувствительно к девиациям их размеров, в частности, длины канала, толщин оксида и слоя кремния, что приведет к большим сложностям их изготовления. Сравнение двух конструкций МОП-нанотранзисторов с КНИ-структурой с

расширяющимися (ступенчато) областями стока и истока, а также без расширения проводилось с использованием описанной модифицированной модели в [148]. Анализировалось их масштабирование для $2,5 \text{ нм} \leq L_2 \leq 10 \text{ нм}$. Рассчитывались стоковые и сток-затворные характеристики. Важным результатом работы является хорошее согласование расчетов, полученных по разработанной модели, с моделью основанной на формализме неравновесных функций Грина (см. далее) в баллистическом режиме работы, что достаточно обоснованно в рассматриваемых случаях. И в то же время затраты вычислительных ресурсов ЭВМ для модели формализма волновых функций гораздо меньше (см. также далее). Так, расчет стоковой характеристики для типичного транзистора требует около 15 минут для рабочей станции Pentium-3 (933 ГГц). Показано, что более предпочтительной при масштабировании является структура без расширения. Кроме указанной выше проблемы резкого усиления чувствительности важных электрических характеристик к девиациям геометрических размеров транзисторов, второй серьезной проблемой в анализируемой области длин затвора является возрастающая потребляемая мощность. Для анализа второй проблемы использовалась упрощенная модель. Некоторые из полученных ранее результатов уточнены в [149] для кремниевых МОП-нанотранзисторов с двойным затвором с расширяющимися (ступенчато) областями стока и истока с $2,5 \text{ нм} \leq L_2 \leq 10 \text{ нм}$. Вместо одномерного (квазидвумерная модель) решалось двумерное уравнение Шредингера (двумерная модель). С целью повышения экономичности модели применялось смешанное моментно-координатное представление, что позволило свести решение двумерного уравнения Шредингера к численному решению эффективного одномерного уравнения для каждой из подзон. Результаты по квазидвумерной и двумерной моделям хорошо согласуются при расчете передаточных характеристик, однако первая имеет

тенденцию к занижению токов. В то же время при расчете стокowych характеристик различия по току стока могут достигать около 30 %. Однако это не меняет основных качественных выводов предыдущих работ. К другим интересным результатам работы следует отнести: 1) сравнение результатов по зависимости тока закрытого состояния от тока открытого состояния с прогнозами 2003 и 2007 годов [12] показало, что они являются излишне оптимистическими (см. также ранее); 2) хотя материалы с высокой диэлектрической проницаемостью уменьшают токи утечки затвора, их влияние на улучшение коэффициента усиления по напряжению весьма ограничено; 3) подобные полуколичественные результаты получены и при варьировании диэлектрической проницаемости (материала) канала; поведение прибора в основном определяется электростатической контролируемостью транзистора.

Инструментарий численного моделирования приборных структур произвольной конфигурации с подходящими терминалами (выводами) описан в работе [150]. В предложенной модели самосогласованно решаются двумерные уравнения Шредингера и Пуассона. Модифицированная версия метода квантовой передачи на границе (см. [4]) используется для описания открытых граничных условий. В результате на предварительном этапе (до решения двумерных уравнений) самосогласованно решаются одномерные уравнения Шредингера и Пуассона вдоль границ между активной областью прибора и терминалами. Основные предположения модели: отсутствие рассеяния, простая с шестью долинами параболическая аппроксимация зонной структуры Si, дырки не учитываются (возможен учет их влияния в рамках квазиравновесного приближения [151]). При дискретизации применяется метод конечных элементов на единой сетке. Было исследовано четыре метода решения полученных нелинейных алгебраических уравнений: Бройдена; Ньютона; Ньютона и Бройдена; схема простого смешивания. Серьезное внимание

также уделено выбору начального приближения. В целом наилучшие результаты по сходимости достигнуты с помощью метода Ньютона и Бройдена. Иногда, однако, возможны проблемы со сходимостью. Модель реализована в комплексе программ QDAME (первые сообщения и предварительные результаты опубликованы в [151,152]). В качестве примеров моделировались две конструкции РТД (прямая и изогнутая) и три конструкции n -МОП-нанотранзисторов с двойным затвором, а именно: с обычными узкими областями стока и истока; с расширяющимися ступенчато и плавно областями стока и истока. Требуемое время от одной ночи до двух дней на точку ВАХ для высокопроизводительной RISC рабочей станции (~ 1 ГГц) в зависимости от сложности задачи (количества узлов сетки по пространству и т.п.). Рассчитывались стоковые, сток-затворные характеристики трех конструкций n -МОП-нанотранзисторов с $L_k = 7,5$ нм с перекрытием областей стока и истока затвором ($L_s = 27,5$ нм). Установлена важность квантовомеханического отражения в областях стока и истока даже в баллистическом режиме. Так, в открытом состоянии в зависимости от варианта конструкции ток может изменяться до 30 %. Отмечается важность для дальнейших исследований учета влияния рассеяния. Более детально была проанализирована конструкция с плавно расширяющимися областями стока и истока без перекрытия ($L_k = L_s = 7,5$ нм). Причем рассчитывались не только стоковые и сток-затворные характеристики, но и ток затвора, что является явным достоинством разработанной модели. Было также проведено исследование этой конструкции при масштабировании до $L_k = L_s = 5$ нм. Моделировалась также обычная конструкция нанотранзистора с двойным затвором с учетом шероховатостей границ раздела Si – SiO₂. Интересным физическим результатом работы является иллюстрация возможности возникновения "квантовых вихрей" в транзисторах некоторых конструкций

даже в баллистическом режиме функционирования вследствие квантовой интерференции. Они могут оказывать ощутимое влияние на плотности токов подзон, а, как следствие, на уменьшение выходного тока транзистора. В работе [153] учитывалось упругое внутримолекулярное рассеяние на фононах и неупругое междолинное рассеяние при моделировании МОП-нанотранзистора с двойным затвором. В этом случае дополнительно решалось основное кинетическое уравнение Паули с помощью метода Монте-Карло (см. ранее). Анализировался ряд внутренних характеристик транзистора, а именно: кинетическая энергия, дрейфовая скорость, потенциал и др. Допустимо расширение возможностей QDAME на случай произвольной кристаллографической ориентации полупроводника [154].

Подобная [150] модель использовалась в [155] для сравнения n -МОП-нанотранзисторов традиционной планарной структуры и с двойным затвором с $L_g = 15$ нм в баллистическом режиме функционирования. Анализировались структуры с каналами Si (100), Ge (111) и GaAs (111). При этом варьировались эффективная толщина оксида, глубина p - n -перехода и толщина канала. Показано, что эти конструктивные параметры могут оказывать важное влияние на ВАХ. Установлено, что до определенной толщины канала ток, проходящий в структуре с двойным затвором, приблизительно в два раза больше, чем в традиционной. Дальнейшее уменьшение толщины изменяет сильно характеристики эффекта квантового ограничения и транспорта, особенно в зависимости от материала канала и кристаллографической ориентации. В частности, при ультратонком канале на GaAs получаются очень хорошие свойства эффекта квантового ограничения, которые становятся конкурентными с таковыми для канала на Ge, что приводит к превосходству этих материалов над Si в данном случае.

Баллистический транспорт в МОП-нанотранзисторах с КНИ-структурой (полностью обедненные) с одним затвором анализировались в работе [156]. Для этого использовалась трехмерная самосогласованная модель, построенная в рамках формализма волновых функций. Учет третьего измерения целесообразен вследствие возможной важности эффектов узкого канала, например квантования в этом измерении. Главным в модели является учет специального случая кристаллографической ориентации канала Si $\langle 100 \rangle$ в нанотранзисторе, что приводит к диагонализации матрицы Гамильтона уравнения Шредингера в трехмерном случае и упрощению его решения. Так как эта модель уже рассматривалась в [4], то здесь остановимся на основных результатах, полученных с ее применением. Рассчитывались сток-затворные характеристики транзистора с каналом длиной 10 нм, толщиной 6 нм и шириной 8 нм. Исследовалось влияние дискретности распределения заряда примеси в канале p -типа с объемной концентрацией $2 \cdot 10^{18}$ и $5 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$. Оказалось, что отражение от них приводит к интерференции электронных волн, характер которой зависит от места расположения дискретных зарядов, а, как следствие, к различным значениям выходного тока и порогового напряжения $V_{пор}$. В результате увеличения концентрации примеси происходит возрастание девиации $V_{пор}$ вследствие увеличения интерференционных эффектов из-за большего числа дискретных зарядов. Так, при среднем значении $V_{пор} = -0,49$ В максимальная девиация составляет значительную величину: $-0,14$ В. С помощью этой же модели исследовался n -МОП-нанотранзистор с КНИ-структурой с тройным затвором на квантовой проволоке ($6,51 \times 8,1$ нм 2) с $L_k = 10,8$ нм в работе [157]. Изучалось влияние интерференционных эффектов на шероховатостях границ раздела и ионизированных примесях на

* Именно поэтому некоторые модели, описанные в [4], могут использоваться для ряда МОП-нанотранзисторов.

сток-затворных характеристики. Установлено, что совместный учет двух этих факторов приводит к дополнительной квантовой интерференции, что усиливает разброс ВАХ нанотранзисторов. Показано, что путем изменения положения дискретных примесей, в частности, отодвигая их от границы раздела исток-канал, можно улучшить ВАХ элементов, т.е. минимизировать влияние отрицательных в рассматриваемых случаях интерференционных эффектов. Эти результаты подтверждают важность учета флуктуаций распределения заряда примеси в нанотранзисторах, полученных ранее, однако, с применением полуклассических моделей.

Очень интересные результаты были получены в работе [158] для МДП-нанотранзисторов на квантовых проволоках с помощью отмеченной выше модели. Так, было теоретически показано, что баллистический транспорт вследствие сильного рассеяния (малы подвижность и средняя длина свободного пробега) не будет важным для длин затворов кремниевых нанотранзисторов вплоть до 2–5 нм, что похоже, будет хорошо для разработки УБИС новых поколений! В то же время в нанотранзисторе на InAs баллистический транспорт может наблюдаться уже для $L_k \approx 30$ нм, т.е. ситуация здесь хуже.

Передаточные характеристики МОП-нанотранзисторов с КНИ-структурой с двойным затвором с L_3 от 3 до 20 нм исследовались в [159]. Для этого использовались экономичные модели с учетом и без учета самосогласования, построенные в рамках метода матрицы рассеяния (баллистический транспорт, приближения эффективной массы и ряд других предположений) с учетом межподзонных переходов. При этом были получены выражения для токов в рамках данного формализма для 1D и 2D случаев. Исследования с применением эмпирического метода сильной связи показали возможность использования метода эффективной массы для нанотранзисторов с ультратонкими слоями кремния от 1 до 3 нм. Расчеты сток-затворных

характеристик продемонстрировали хорошее согласование результатов, полученных с помощью квантовых моделей с учетом и без учета самосогласования. В то же время комбинированные модели на основе диффузионно-дрейфовых моделей привели к худшему согласованию с более строгими квантовыми моделями в подпороговой области. Показано, что для L_z 3 и 5 нм туннелирование может являться важным механизмом транспорта в этой области. Для приборов же с большими L_z туннелирование может быть важно лишь в глубоко подпороговой области. Высказано предположение о том, что для уменьшения туннельного тока, по-видимому, целесообразно отказаться от традиционной ориентации кремния $\langle 100 \rangle$ вдоль канала для ультракоротких нанотранзисторов.

Экономичная квазитрехмерная модель формализма волновых функций МОП-нанотранзистора с КНИ-структурой была предложена в [160]. С целью упрощения решения уравнения Шредингера использовался метод разделения переменных. В поперечных сечениях (координаты y , z) потенциал предполагается независимым от продольной координаты x . При этом канал считается равномерным с прямоугольным сечением, характеризующимся неограниченным потенциалом на его границах. В результате, в поперечном сечении канала двумерное уравнение Шредингера может быть решено аналитически. Вдоль канала (x) необходимо решать более простое (по сравнению с исходным) одномерное уравнение для амплитуд волновых функций. Для этого используется метод матриц переноса. Далее решается уравнение Пуассона. После получения самосогласованного решения задачи, включая контакты стока и истока, осуществляется вычисление тока на основе рассчитанных коэффициентов прохождения по формуле Ландауэра – Буттикера. В качестве начального приближения используется расчет по более простой одномерной модели. С целью ускорения расчетов в модели не учитывается

туннелирование сквозь потенциальный барьер у истока, а также в рассмотрение включается конечное число мод, которое определяется в процессе практических вычислений. Модель реализована в программе QUASOI. В работе моделировались нанотранзисторы с $L_g = 10$ нм и поперечным сечением канала 2×5 нм². Анализировались коэффициенты прохождения в случае наличия и отсутствия случайных примесей в канале. В последующей работе [161] приведены результаты расчета стоковых и сток-затворных характеристик нанотранзисторов с окружающим с трех сторон канал (тройным) затвором ($L_g = 10$ нм, $L_k = 16$ нм с учетом спейсеров, ширина канала – 10 нм). Оказалось, что при использовании предложенной модели девиации ВАХ для различных случайных распределений зарядов примеси не превышали 10 % для рассмотренных случаев. В итоге, теоретически обосновывается возможность хорошей воспроизводимости стоковых характеристик данного вида нанотранзисторов с технологическими размерами около 10 нм. В статье [162] дополнительно сравнивались результаты расчета, полученные с помощью разработанной квантовой модели и диффузионно-дрейфовой модели, реализованной в коммерческом инструментарии Sentaurus Device компании Synopsys. Установлено, что величины тока стока при расчете по последней модели приблизительно в два раза меньше, чем по первой. Такое различие авторами связывается с учетом рассеяния в диффузионно-дрейфовой модели. В то же время величины подпороговой крутизны сток-затворной характеристики отличаются всего лишь на ~ 4 %.

Интересная комбинированная модель МОП-нанотранзистора с двойным затвором построена в работах [163,164] на основе формализма волновых функций. В ней осуществляется декомпозиция по модам (см. далее). Для этого сначала решаются одномерные уравнения Шредингера в поперечных сечениях канала, а далее – одномерные стационарные уравнения

Шредингера (приближение эффективной массы) с включением электрон-фононного взаимодействия (многочастичный случай) вдоль канала. Инжекция носителей и рассеяние учитываются с помощью метода Монте-Карло. Основными механизмами при этом являются: акустическое и оптическое внутри- и междолинное (внутри- и межподзональное) рассеяние; рассеяние на шероховатостях границ раздела. Далее решается двумерное уравнение Пуассона, а итерации продолжаются до требуемой степени самосогласования. Модель реализована в комплексе программ SEMC-2D. При имитации 1000 инжектированных частиц из истока и столько же из стока требуется приблизительно час на одну итерацию для ПЭВМ (3,2 ГГц) и не менее пяти итераций на точку ВАХ [164]. Рассчитывались стоковые и сток-затворные характеристики нанотранзистора с $L_3 = 10$ нм. В баллистическом режиме проводилось сравнение с результатами расчета по программе nanoMOS (см. далее). Было получено почти совпадение рассчитанных ВАХ. Для идентификации ряда параметров рассеяния осуществлялось согласование с результатами программы MCUT, реализующей полуклассический метод Монте-Карло, для объемного случая. В целом, учет рассеяния приводит к уменьшению тока стока до 40 %, что соответствует данным, полученным другими группами с применением полуклассических методов Монте-Карло.

Распространение этой модели на трехмерный случай проведено в [165]. Для повышения ее экономичности уже не одномерные, а двумерные уравнения Шредингера могут решаться в небольшом числе "критических" поперечных сечений канала, а значения требуемых величин в других сечениях вычисляются с использованием интерполяционной процедуры. Разработанная квазитрехмерная комбинированная модель (реализована в программе SEMC-3D) применялась для моделирования МОП-нанотранзистора с реберной структурой $L_3 = 10$ нм на квантовой проволоке (ширина – 3 нм, высота – 4 нм). Рассматривалось

рассеяние на фонах и шероховатостях границ раздела. Учет последнего механизма увеличивает время расчетов приблизительно в три раза. Показано, что объединенный эффект влияния различных механизмов рассеяния в таких нанотранзисторах более сложный, чем традиционно описываемый с помощью правила Матиссена.

Нельзя все же не остановиться на интересных результатах, полученных ранее с помощью самой простой квазиодномерной модели (программа SEMC; вариант метода для одномерного случая подробно описан в [166]) [168]. С ее помощью моделировались p -МОП-транзисторы с Si/Ge областями стока и истока с длинами канала Si 100; 50 и 10 нм. Потенциал определялся на предварительном этапе на основе расчетов по программе MiniMOS-NT, реализующей диффузионно-дрейфовую модель. Учитывалось рассеяние на неполярных оптических фонах. Установлено, что эффекты квантовой интерференции вдоль канала становятся заметными для $L_k = 10$ нм, однако их влияние менее существенно по сравнению с рассеянием. Поэтому делается вывод, что полуклассические модели с учетом рассеяния могут быть более правдоподобными (достаточными) по сравнению с квантовыми для баллистического случая. Для обычных p -МОП- и n -МОП-нанотранзисторов с $L_k = 10$ нм эффекты квантовой интерференции еще меньше. Поэтому полуклассические модели *вдоль канала*, возможно, могут быть применены еще для меньших L_k , несмотря на в целом квазибаллистический характер транспорта в элементах.

Для часто используемого метода декомпозиции по модам (подзонам) была разработана процедура редуцирования базиса [169]. Проиллюстрирована ее экономичность в рамках формализма волновых функций (двумерное самосогласованное

* Замечу, что программа использовалась и при моделировании квантовых ям, характерных для лазеров [167].

решение уравнений Шредингера и Пуассона) на примере расчета стоковых ВАХ МОП-нотранзистора с двойным затвором с $L_k \approx 9,5$ нм в баллистическом режиме функционирования при $T \approx 300$ К. При этом затраты времени ориентировочно могут уменьшаться до 50 %. Экономичность прогнозируется еще выше для случая приборных структур на квантовых проволоках.

Рассматриваемые далее достаточно строгие модели, по существу, в основном являются комбинированными моделями. Обязательным при этом является использование формализма волновых функций. Сначала остановимся на моделях, в которых в качестве второго применяется формализм функций Грина [2,4,83].

В работе [170] предложена комбинированная модель в рамках приближения эффективной массы. В ней самосогласованно решаются в двумерном случае уравнение Пуассона и уравнения, полученные в рамках формализма неравновесных функций Грина. Для дырок используется диффузионно-дрейфовое приближение. В статье исследовались стационарные электрические характеристики (токи стока, затвора и др.) кремниевых n -МОП-нотранзисторов с поликремниевым затвором длиной $L_g = 25$ нм и $L_g = 50$ нм с полубесконечными контактами стока и истока. Было проведено сравнение с результатами, полученными с помощью программы MEDICI с квантовомеханическими коррекциями. Показана важность анизотропии эффективной массы. Расчеты проводились на многопроцессорной вычислительной системе SGI Origin 2000 machine в Отделении передовых суперкомпьютеров NASA (NAS).

МОП-нотранзисторы с двойным затвором ($L_g = L_k$) длиной 10 и 25 нм с ультратонким слоем кремния $t_{Si} = 1,5$ нм исследовались в [171]. Для этого использовалась двумерная комбинированная модель на основе декомпозиции по модам. В

поперечных сечениях решаются одномерные уравнения Шредингера. Вследствие ультратонкости Si учитываются только три нижних подзоны. В направлении транспорта решаются уравнения для функций Грина. Влияние контактов и рассеяния на фонах учитываются с помощью собственно-энергетических частей. Для получения последних применяются традиционные аппроксимации (самосогласованное борновское приближение, фононная система находится в равновесии и описывается распределением Бозе – Эйнштейна, корреляция между подзонами не учитывается, изотропность рассеяния) и др. Для получения самосогласования далее решается двумерное уравнение Пуассона. Оказалось, что ток стока с учетом рассеяния может составлять не более 53 % от такового для баллистического режима работы. (Меньшее различие на 10 % получено при использовании подобной комбинированной, но уже квазитрехмерной модели, при моделировании МОП-нанотранзистора на квантовой проволоке с диаметром 5 нм и $L_k = 15$ нм в [77]. В то же время для диаметра 4 нм и $L_k = 10$ нм ток стока выходных ВАХ при малых напряжениях на стоке на 20 % ниже в случае учета рассеяния, а при больших напряжениях на стоке – на 15 % [172], т.е. различие характеристик еще меньше.). Увеличение темпа рассеяния приводит к еще большему уменьшению тока. Показано, что в зависимости от темпа рассеяния может быть важно по всему транзистору, а не только у истока как считалось ранее. Установлено, что рассеяние в удлинённых областях стока и истока не всегда может адекватно описываться с помощью последовательных сопротивлений.

МОП-нанотранзисторы с двойным затвором с $L_k = 10$ нм и ультратонким слоем кремния в 2 нм исследовались в [173]. Показано важное влияние поверхностных шероховатостей границ раздела Si/SiO₂ на распределения концентрации электронов и плотности тока в элементах. С этой целью

использовалась новая конечно-разностная аппроксимация основных уравнений двумерной модели [170], базирующаяся на методе интегрирования на ячейке. В то же время девиации токов в нанотранзисторах с различными профилями шероховатостей границ раздела могут достигать 10 %.

МОП-нанотранзисторы с двойным затвором с $L_k = 12$ нм исследовались в [174]. Двумерная модель [170], в которой используется формализм неравновесных функций Грина, распространена на случаи учета влияния дискретных примесей в канале, а также анизотропии эффективной массы. С ее помощью показано, что эти два фактора могут существенным образом влиять на сток-затворные характеристики элементов. Так, учет анизотропии эффективной массы приводит к сдвигу порогового напряжения в 200 мВ. Было рассмотрено влияние трех и четырех отталкивающих примесных центров, расположенных различным образом в канале нанотранзисторов.

Разработанная модель [170] была распространена на трехмерный случай и реализована в программе для параллельных вычислений в [175]. В качестве иллюстративного примера рассмотрено моделирование нанотранзистора на кремниевой квантовой проволоке (2×2 нм²) с длиной канала 6 нм. Исследовалось влияние расположения зарядов примеси и шероховатостей границ раздела на плотность тока и коэффициент прохождения.

В работе [176] предложена оригинальная конструкция МОП-нанотранзистора на квантовой проволоке с окружающим затвором с диэлектрическими вставками, сужающими канал у стока. С использованием трехмерной модели, подобной [175], на примере структуры с $L_s = 7$ нм показано, что вследствие изменения свойств квантового ограничения в структуре с одной вставкой отношение тока открытого и закрытого состояний может быть улучшено на 32 % по сравнению со структурой без

вставки. При этом учитывался эффект проникновения волновой функции в оксид.

n-МОП-нанотранзисторы полностью обедненные с двойным затвором с ультратонким слоем кремния исследовались в баллистическом режиме работы в [177,178]. Предложено две модели для одной зоны в приближении эффективной массы. Первая самосогласованная модель обобщает формализм неравновесных функций Грина (см. [4,83]) на двумерный случай. Для повышения экономичности расчета была разработана комбинированная (вторая) модель, в основе которой лежит декомпозиция задачи по модам (подзонам). С целью определения энергетического спектра канала сначала в поперечных сечениях решаются одномерные уравнения Шредингера. В дальнейшем эта информация используется для моделирования транспорта с помощью модели, основанной на решении полученного в результате разложения одномерного уравнения Шредингера (вдоль канала) с помощью формализма неравновесных функций Грина (см. [4,83]), для каждой из мод. К сожалению, комбинированная модель не предназначена для "объемных приборов" [178] типа рассмотренного в [170]. Сравнение стоковых и сток-затворных характеристик, рассчитанных с помощью двух разработанных моделей, показало очень хорошее согласование соответствующих характеристик для исследуемой структуры с $L_z = L_k = 10$ нм. Было также проведено сравнение с полуклассической моделью на основе КУБ. Оказалось, что полуклассическая модель дает весьма неплохое согласование с квантовыми, особенно в линейной области ВАХ, так как в подпороговой области более важна туннельная составляющая тока. Отмечается, что такое *неплохое соответствие рассчитанных ВАХ – результат самосогласованности полуклассической модели*. В целом, результаты показывают [177], что МОП-нанотранзистор в основном функционирует как обычный МОП-транзистор при

$L_k \geq 10$ нм. Хотя квантовое ограничение поперек канала может приводить к существенному сдвигу порогового напряжения, квантовые эффекты вдоль канала проявляются слабо.

Так, сравнение диффузионно-дрейфовой и квантовой моделей приводит к выводу, что различия в рассчитанных стоковых ВАХ могут достигать 40 % [97]. Сжатие канала нанотранзистора приводит к ухудшению согласования квантовых моделей [178], что связано с усилением взаимодействия между подзонами и в них самих. Отметим, однако, гораздо большую экономичность комбинированной модели [178] по сравнению с более строгой двумерной моделью. Так, характерное время расчета точки ВАХ составляло 40 с для первой модели и 1,5 часа – для второй для одного процессора рабочей станции SUN (300 МГц). Замечу, что эти модели включены в программу nanoMOS 2.0. С ее помощью могут реализовываться параллельные вычисления на Linux кластере "Superman" [179], входившего в список 500 мощнейших суперкомпьютеров мира TOP 500.

С барьером Шоттки МОП-нанотранзисторы с двойным затвором ($L_s = L_k = 12$ нм) анализировались в работе [180]. Области стока и истока в рассматриваемом случае формируются из металла (или силицида). Использовалась двумерная комбинированная модель, основанная на декомпозиции по модам. Рассчитывались стоковые и сток-затворные ВАХ. Показано, что в случае положительной высоты барьера на границе металл-полупроводник ток в открытом состоянии ограничивается туннелированием сквозь барьер у истока. В случае же отрицательного барьера характеристики приближаются к идеальным, свойственным для баллистического МОП-нанотранзистора. Рассмотрены возможности создания элементов с такими отрицательными барьерами. И тем не менее ожидается, что даже в первом случае характеристики могут быть лучше по сравнению с таковыми для обычного МОП-нанотранзистора с уменьшением L_k , так как в элементах с

барьером Шоттки гораздо меньше паразитные сопротивления областей стока и истока.

Сравнение стоковых и сток-затворных характеристик n -МОП- и p -МОП-нанотранзисторов полностью обедненных с КНИ-структурой с двойным затвором ($L_k = L_d = 20$ нм и толщиной Si 1,5 и 5 нм) в баллистическом режиме функционирования проведено в [181]. Для расчетов использовалась другая двумерная комбинированная модель с декомпозицией по модам (в поперечном сечении) и в сочетании с приближенной одномерной полуклассической моделью (вдоль канала). Важным в работе является обоснование целесообразности применения нефиксированных граничных условий (нормальная составляющая напряженности электрического поля равна нулю) на контактах стока и истока при описании баллистического транспорта. Установлено, что в случае тонкого слоя (1,5 нм, направление $\langle 100 \rangle$) ток насыщения p -МОП-нанотранзистора составляет около 60 % от такового n -МОП-нанотранзистора (отличается только тип транзисторов). В то же время для толстого слоя (5 нм, направление $\langle 100 \rangle$) различие в токах уже составляет ~ 25 %. Оказывается также, что ток открытого состояния p -МОП-нанотранзистора приблизительно на 20 % выше для канала с направлением $\langle 110 \rangle$ по сравнению с каналом с направлением $\langle 100 \rangle$. К сожалению, последние данные противоречат экспериментальным, что авторы связывают с упрощенной моделью зонной структуры p -Si (непараболичность учитывается приближенно), учетом межподзонных переходов и рассеяния в модели нанотранзисторов. И тем не менее, подобные исследования чрезвычайно важны ввиду перспективности применения методов зонной инженерии для оптимизации электрических характеристик КМОП-элементов нанoeлектроники.

Комбинированная модель [178] была использована и модифицирована в работе [182]. Замечу, что примененная в

комбинированной модели декомпозиция по модам более последовательная по сравнению с подобными упрощенными подходами ряда других моделей. Для учета процессов рассеяния в модифицированной комбинированной модели используется способ с подключением дополнительных зондов (контактов), предложенный Буттикером (см. [4]). Этот способ трактуется в модели [183] с помощью добавления в гамильтониан системы комплексной составляющей (см. [15]). В работе [182] моделировался n -канальный КНИ-нанотранзистор полностью обедненный с двойным затвором с тонким слоем кремния с $L_3 = L_k = 10$ нм. Параметр рассеяния определялся исходя из подвижности при малых электрических полях. Расчет стоковых и сток-затворных характеристик показал важность учета рассеяния, которое приводит к уменьшению тока в структуре как в закрытом, так и в открытом состояниях. Дополнительное отрицательное влияние оказывают сопротивления областей стока и истока. Это может приводить к тому, что характеристики приборов с двойным затвором будут не лучше, чем с одним затвором, как ожидалось. Исследования проведены для нанотранзисторов вплоть до $L_k = 5$ нм.

В последующей работе [184] исследовались n -МОП-нанотранзисторы с КНИ-структурой с двойным затвором ($L_3 = 10$ нм) следующих конструкций: 1) с обычными узкими областями стока и истока; 2) расширяющимися (ступенчато) областями стока и истока. Для этих целей было проведено распространение описанной модифицированной комбинированной модели (декомпозиция по модам, учет рассеяния) [182] и на случай второй конструкции. Рассчитывались стоковые и сток-затворные характеристики. Оказалось, что учет рассеяния обязателен при комнатной температуре. Так, если рассеяние не учитывать (баллистический транспорт), то различие в стоковых характеристиках между двумя вариантами конструкций может достигать около 250 %, в

противном случае отличие составляет максимум 10 %. Для реализации модели для Linux кластера (45 процессоров (1,2 ГГц)) требуется около 7 часов для расчета точки ВАХ. Поэтому была предложена упрощенная комбинированная модель повышенной экономичности на основе декомпозиции транзистора на активную и пассивную области. Пассивная область моделируется с помощью эквивалентных паразитных сопротивлений. Показано хорошее согласие расчетов ВАХ по упрощенной и более строгой комбинированным моделям. Замечу, что подобная декомпозиция является обычной практикой моделирования элементов ИС на основе полуклассических моделей (см., например, [39,40]).

Особый интерес представляют результаты работы [185]. В ней проанализирован прогноз 2001 года [12] на 2016 год для n -МОП-транзисторов с $L_g = 9$ нм с помощью двумерной комбинированной модели с учетом рассеяния (программа nanoMOS-2.5). С этой целью выбран один из перспективных конструктивно-технологических вариантов n -МОП-нанотранзистора с двойным затвором. При исследовании варьировался ряд конструктивно-технологических параметров элемента, включая характеризующий профиль легирования. Так как проводились многовариантные расчеты (оптимизация), то очень важно было их ускорение с использованием комбинированной модели для собственно внутренней части транзистора по сравнению с более строгой квантовой моделью (ориентировочно в 40 и более раз). Расширяющиеся части контактов моделировались с помощью диффузионно-дрейфовой модели (программа MEDICI). В качестве основных прогнозных электрических параметров были выбраны токи в открытом и закрытом состояниях. Оказалось, что для достижения прогнозных показателей для первого тока будет необходимо или улучшать контакты стока и истока и подвижность в канале одновременно, или использовать диэлектрики с большей диэлектрической проницаемостью. Очень существенно может

помочь увеличению напряжения питания с 0,4 до 0,5 В. Показано, что ток в закрытом состоянии наиболее чувствителен к изменению толщины слоя Si. Принципиально важно отметить, что в данном исследовании были получены конкретные численные значения рекомендуемых (модель все же приближенная) конструктивно-технологических параметров нанотранзистора.

Рассмотренные результаты этой группы получены с помощью программы nanoMOS (известны версии 2.0 и 2.5). В ней возможно, кроме строгой квантовой модели (см. ранее), использование комбинированных моделей, в которых вдоль канала могут применяться [185]: 1) диффузионно-дрейфовая модель; 2) квазигидродинамическая модель; 3) КУБ; 4) формализм неравновесных функций Грина (см. ранее). Наименьшее время требует первая модель, а наибольшее – четвертая в случае учета рассеяния. Комбинированная модель 4 достаточно подробно описана в [183]. Там же приведены эквивалентные формулировки решаемых уравнений как в формализме волновых функций, так и в формализме функций Грина. Последняя реально использовалась в реализуемой на ЭВМ модели для описания транспорта вдоль канала. В качестве начального приближения для электростатического потенциала применяется решение, полученное по диффузионно-дрейфовой модели.

Анализ возможности использования МОП-нанотранзистора с двойным затвором в качестве базового элемента аналоговых ИС был проведен в [186]. Для этого применялся формализм неравновесных функций Грина (баллистический транспорт, программа nanoMOS 2.0) и аналитические модели упрощенной теории рассеяния МОП-нанотранзисторов (на основе модели [85], см. также ранее). Рассчитывались крутизна, выходная

* Результаты проф. М. Лундстрёма и его коллег нами только что рассматривались. Отмеченная программа разработана в этой группе.

проводимость, граничная частота и некоторые связанные с ними параметры транзисторов с длинами затвора ($L_g = L_k$): 10; 15; 20; 25 и 30 нм. Как показали оценки при сравнении с требованиями прогноза 2001 года [12], использование данного вида нанотранзисторов перспективно и в аналоговых приложениях. При этом одна из самых интересных оценок: для транзистора с $L_k = 10$ нм предельная (баллистический режим) граничная частота около $1 \div 4$ ТГц.

Часто моделирование МОП-нанотранзисторов проводится для случая, когда кремниевая полупроводниковая пластина (или слой кремния) ориентирована в кристаллографической плоскости (100), т. е. технологически наиболее важного случая. В этой ситуации использование метода эффективной массы приводит к достаточно простому виду уравнения Шредингера и вытекающим из него уравнениям. Для других ориентаций вследствие того, что эффективная масса является тензором, вид основного транспортного уравнения может существенно усложняться. Этот случай рассмотрен в работе [187], в частности, было получено общее транспортное уравнение по пространству связанных мод. Для МОП-транзисторов с КНИ-структурой с ультратонким слоем кремния допустимо использовать два предположения: 1) постоянная толщина слоя, что позволяет разделить потенциалы, влияющие на квантовое ограничение и транспорт; 2) потенциал вдоль канала изменяется слабо так, что туннелированием Зинера между подзонами можно пренебречь. В результате получается достаточно простого вида уравнение типа уравнения Шредингера для подзоны (декомпозиция по модам), которое можно применять для моделирования нанотранзисторов не только с иной кристаллографической ориентацией кремния, но и для германия. В этом случае, после соответствующей корректировки эффективных масс, модели, разработанные ранее для

* Строго говоря, речь идет об уравнении именно *вида* уравнения Шредингера.

кристаллографической ориентации слоя кремния (100), могут быть адаптированы и для других направлений, а также германия. Так, программа nanoMOS 2.5 после модификации использовалась для моделирования нанотранзистора с двойным затвором ($L_3 = 10$ нм) на ультратонком слое германия.

Комбинированная квазитрехмерная модель типа [188] (была рассмотрена в [4]), основанная на декомпозиции по модам и позволяющая учитывать анизотропию эффективной массы, использовалась в [189] для моделирования МОП-нанотранзистора ($L_k = 9$ нм) с окружающим затвором на квантовой проволоке на Ge с квадратным поперечным сечением. Модель применима и для случая квантовой проволоки на GaAs. Замечу, что использование других материалов по сравнению с Si для подобных каналов может быть полезным для улучшения характеристик МОП-нанотранзисторов (см. ранее). Аналогичная модель применялась в [190] для сравнения МОП-нанотранзисторов с окружающим затвором на квантовых проволоках на основе Si и $3C - SiC$ по передаточным ВАХ и подвижности при малых электрических полях ($L_k = 20$ нм, $T = 300$ К). Несмотря на известные преимущества второго материала по сравнению с первым (более высокие теплопроводность, ширина запрещенной зоны, напряжение пробоя; лучшие химическая и физическая устойчивости), по исследованным характеристикам он не будет иметь преимущества по сравнению с кремнием.

Ток затвора МОП-нанотранзистора с двойным затвором анализировался в двумерном случае в [191]. На первом этапе комбинированная модель, основанная на декомпозиции по модам и типа рассмотренной ранее [178], использовалась для определения самосогласованного потенциала. На втором этапе этот потенциал применяется для решения в двумерном случае квантового уравнения транспорта в рамках формализма функций Грина. Для вычисления тока затвора используется формула

Ландауэра. В статье приведены результаты расчета этого тока транзисторов с L_3 3; 6 и 12 нм. Затвор считался поликремниевым. Показано, что ток затвора осциллирует при изменении напряжения стока в условиях слабой инверсии, причем амплитуда осцилляций сильно зависит от L_3 . Основной тенденцией является уменьшение тока затвора с ростом напряжения стока, что легко объясняется в результате анализа распределения перпендикулярной составляющей плотности тока вдоль затвора. Подтверждены выводы, полученные ранее на более простых моделях (в основном одномерных), о зависимости тока затвора от напряжения на затворе, которые качественно согласуются с экспериментальными данными.

Основные механизмы утечки в МОП-нанотранзисторах с двойным затвором: прямое туннелирование затвор-канал; подпороговый и зона-зона туннельный ток. С целью уменьшения последней составляющей в [192] предложено (на основе результатов моделирования) изготавливать затвор, состоящий из трех частей на различных материалах. Для оценки величин составляющих тока утечки использовались упрощенные модели. Для расчета тока стока в баллистическом режиме применялась модель, подобная [183]. Исследовались нанотранзисторы с длиной канала от 10 до 5 нм. Сравнение результатов расчета с полученными с помощью комплекса программ ATLAS показало их хорошее согласование.

Интересные результаты были получены в [193] при моделировании МОП-нанотранзисторов с двойным затвором с $L_3 = 9$ нм ($L_K > L_3$) с толщинами слоя кремния 4; 3 и 2 нм. Использовались два комплекса программ МОСА и папоMOS. В МОСА реализован метод Монте-Карло в двумерном случае с достаточно детальным описанием зонной структуры с учетом рассеяния на акустических и оптических фононах, носителях и шероховатостях границ раздела, а также эффекта ударной ионизации. В данной инструментарию проведена квантовая

коррекция потенциала. Двумерная квантовая модель, включенная в nanoMOS, была рассмотрена ранее. Поводилось сравнение расчетов внутренних переменных, в частности, потенциала и двумерной плотности заряда. Оказалось, что более полный учет квантовых эффектов может быть важным с уменьшением толщины канала при малых прикладываемых смещениях. С ростом смещений различие результатов становится незначительным. В то же время при расчете средней скорости в канале с помощью nanoMOS получается существенно больший эффект всплеска скорости. Последнее авторы статьи во многом связывают не с квантовыми эффектами, а с более простой (по сравнению с МОСА) параболической аппроксимацией зонной структуры в квантовой модели.

В работе [194] исследовано влияние часто не учитываемого при моделировании эффекта проникновения волновой функции в диэлектрик на электрические характеристики МДП-нанотранзисторов с двойным затвором на кремнии (100). В качестве подзатворного диэлектрика брался столбик из HfO_2 на SiO_2 . Электростатика определялась на основе самосогласованного решения двумерных уравнений Шредингера и Пуассона с разложением по модам. Для описания баллистического транспорта применялась программа nanoMOS-2.5. Оказалось, что рассматриваемый эффект увеличивает ток стока, причем ток закрытого состояния более чувствителен, чем ток открытого состояния. Эффект уменьшает пороговое напряжение и увеличивает крутизну. Он более сильно проявляется с уменьшением толщины кремния t_{Si} ($2 \text{ нм} < t_{\text{Si}} \leq 4 \text{ нм}$), чем с падением L_3 ($6 \text{ нм} \leq L_3 \leq 15 \text{ нм}$). В то же время при одновременном уменьшении t_{Si} и L_3 наблюдается наиболее сильное проявление эффекта на электрические параметры.

Комбинированная квазитрехмерная численная модель для баллистического режима функционирования МОП-нанотранзистора с одним ребром подробно описана в [195]. Для

ее построения трехмерное уравнение Шредингера (метод эффективной массы) разбивается на двумерные уравнения Шредингера в поперечных сечениях и одномерные уравнения Шредингера вдоль канала (предполагается направление $[100]$). При этом используется ВКБ-приближение и представление волновой функции в виде плоской волны, распространяющейся от истока к стоку по подзонам. Для решения одномерного уравнения Шредингера вдоль канала с открытыми граничными условиями (в подзоне) применяется формализм неравновесных функций Грина. После нахождения плотности электронов решается трехмерное уравнение Пуассона. Для дискретизации используется метод конечных разностей. Уравнения модели решаются самосогласованно до требуемой сходимости. Рассчитывались стоковые и сток-затворные характеристики нанотранзисторов с L_3 5 и 10 нм. Показано, что туннельная составляющая тока стока может быть существенной в подпороговой области ($L_3 = 5$ нм), что подтверждает известные результаты других авторов. Отмечается, что для лучшего качественного согласования с экспериментом необходимо более полное знание информации о профиле легирования областей стока и истока. Моделировались приборы с ультрамалыми поперечными сечениями*: 2×2 нм² и 3×3 нм². Проводилось сравнение с характеристиками обычного нанотранзистора с двойным затвором (применялась программа nanoMOS 2.0), т.е. с большой шириной в третьем измерении. Показано, что эти транзисторы более чувствительны к существенному для данной области размеров транзисторов короткоканальному эффекту понижения барьера истока, индуцированного стоком, по сравнению с реберными нанотранзисторами, которые могут работать хорошо и для $L_3 < 5$ нм.

* Фактически это приборы на квантовых проволоках. Подобная описанной модель была рассмотрена в [4].

МОП-нанотранзистор с реберной структурой с $L_3 = 9$ нм исследовался в [196]. При этом использовалась квазитрехмерная комбинированная модель, при построении которой применяется метод разложения по модам. В поперечных сечениях решаются двумерные уравнения Шредингера. В направлении переноса используется метод неравновесных функций Грина, а также учитывается внутриволновое рассеяние на фононах и влияние шероховатостей границ раздела Si/SiO₂. Далее решается трехмерное уравнение Пуассона. В работе анализировались сток-затворные характеристики. Оказалось, что рассеяние на фононах понижает ток стока в открытом состоянии по сравнению с баллистическим режимом (до 20%), а шероховатости границ раздела влияют не только на ток в открытом, но и в закрытом состояниях, т.е. также уменьшают ток. В результате, последний фактор может приводить к флуктуациям $V_{пор}$ до 110 мВ.

Как уже отмечалось, при реализации методов формализма неравновесных функций Грина требуется инвертирование матриц огромных размеров, особенно в двумерном случае, что является их серьезным недостатком. Так, при моделировании нанотранзисторов характерное число элементов матриц только по пространству (x , y) составляет около миллиона. Для смягчения этого недостатка в работе [197] был предложен алгоритм более эффективный по сравнению с используемыми, например [170], инвертирования таких матриц типа "разделяй и властвуй", основанный на декомпозиции исходных матриц на более простые, меньших размеров. Экономичность алгоритма (по объемам памяти и времени расчетов) возрастает при параллельных вычислениях с ростом числа процессоров. В качестве примеров проводилось моделирование кремниевых квантовых проволок и МОП-нанотранзисторов.

Эффективный метод исключения контактного блока в рамках формализма функций Грина для вычисления коэффициента

прохождения в мезоскопических приборных структурах произвольной двумерной (трехмерной) формы с многими терминалами в баллистическом режиме функционирования был предложен в [198]. Показано, что с его помощью расчет коэффициента прохождения может быть проведен после нахождения стационарных состояний изолированного прибора и инвертирования небольшой матрицы, зависящей от энергии и определяемой граничной областью между внутренней частью прибора и контактами. Причем допустимо нахождение лишь ограниченного числа собственных состояний, что дополнительно повышает эффективность метода. Вычисление токов проводится в рамках формализма Ландауэра – Буттикера. В последующих работах [199,200] предложенный метод был распространен и для расчета плотностей состояний и носителей заряда в одно- и многозонных случаях. Показано [200], что в однозонном случае допустимо дальнейшее повышение эффективности метода путем представления функций Грина и собственно-энергетической части в пространстве мод. Применимость метода проиллюстрирована на примерах моделирования [198,200]: приборов с тремя контактами, включающих двухбарьерную структуру, T -переход, сформированный в двух пересекающихся квантовых ямах; РТД на двух квантовых точках. Этот же метод использовался для самосогласованного решения двумерных уравнений Шредингера и Пуассона при моделировании n -МОП-нанотранзистора с реберной структурой с $L_3 = 10$ нм [201,202]. При этом применялась предиктор-корректор итерационная схема типа описанной ранее. Ширина ребра варьировалась от 12 до 6 нм. Профиль аппроксимировался гауссианой. Влияние верхнего затвора не учитывалось. Расчет сток-затворных характеристик показал, что они могут контролироваться шириной ребра, от которого зависит формирование канала (каналов) прохождения токов в открытом состоянии. Установлено, что с уменьшением ширины ребра важное влияние на крутизну начинают оказывать

шероховатости границ раздела [202]. Осуществлено сравнение рассчитанных передаточных характеристик с экспериментальными данными. Отличное согласование получено в подпороговой области. В открытом состоянии согласование гораздо хуже, что авторы связывают с учетом других механизмов рассеяния (в работе [201] учитывалось рассеяние на фонах в рамках приближения времени релаксации) и влияния случайных и дискретных зарядов примеси. Проведена оптимизация конструктивно-технологических параметров транзистора [202]. Показано, что изгиб передаточной характеристики для этого нанотранзистора при очень малых напряжениях на затворе обусловлен не только токами утечки затвора, а скорее прямым туннельным током исток-сток. Более детально влияние шероховатостей границ раздела Si/SiO₂ на электрические характеристики нанотранзистора было исследовано в [203]. В целом, их влияние на ток стока важно при малых напряжениях на затворе и в открытом состоянии. Оно может быть также важно и на увеличение тока затвора, на ухудшение частотных характеристик нанотранзистора. В работе [201] изучалось также влияние кристаллографической ориентации подложки Si на передаточные характеристики и ток затвора транзистора. Проиллюстрировано, что передаточные характеристики ухудшаются с возрастанием температуры с 300 до 400 К.

В работе [204] предложен не менее эффективный по затратам вычислительных ресурсов ЭВМ метод для квазибаллистического режима функционирования, основанный на спектральном разложении функции Грина с применением формализма R -матрицы, хорошо известного в ядерной физике. При этом гамильтониан приборной структуры разбивается на блоки. Предложенный метод подобен методу исключения контактного блока, однако, в нем не используется обычная дискретизация и, следовательно, сетка, характерная для методов конечных разностей и конечных элементов. Прибор в этом

случае разбивается на элементы, с помощью которых в процессе применения формализма R -матрицы (распространения) одновременно как бы "выращивается" и сам прибор. Метод реализован в рамках самосогласованной модели совместно с решением уравнения Пуассона. В качестве примера рассмотрено трехмерное моделирование баллистического транспорта МОП-нанотранзисторов с двойным и окружающим затворами с $L_z = 10$ нм и шириной L_y от 1,8 до 20 нм. Рассчитывались передаточные ВАХ при $T = 300$ К. Оказалось, что при $L_y = 2$ нм нанотранзистор с окружающим затвором обладает лучшим электростатическим контролем, что приводит к более эффективному подавлению туннельной компоненты тока стока. В результате достигается значение подпороговой крутизны, близкое к идеальному $S = 60$ мВ/дек. В то же время при $L_y = 10$ нм у обоих приборов это значение хуже – $S \approx 70$ мВ/дек, т. е. влияние затвора ослабляется.

Интересные результаты получены в последующей работе [205], в которой исследовалось влияние одного донорного иона в канале МОП-нанотранзистора на квантовой проволоке с окружающим затвором с $L_z = 10$ нм при $T = 300$ К. Показано, что на сток-затворных ВАХ может возникать область бистабильности в зависимости от расположения атома. Эффект связывается с двумя различными механизмами экранирования иона и может быть качественно объяснен в рамках модели резонансного туннелирования. Учитывая современные технологические возможности прецизионного размещения отдельных ионов примеси, работа иллюстрирует хороший потенциал развития так называемой однопримесной электроники.

Формализм R -матрицы со случая непрерывного представления среды был распространен в [206] на случай дискретного, т. е. может применяться и для моделирования приборных структур

на атомарном уровне. В качестве примеров рассмотрены на кремниевых квантовых проволоках T -переход и p -Si МОП-нанотранзистор с окружающим затвором с $L_3 = 10$ нм (состоит из 7040 атомов Si) в баллистическом режиме функционирования. Рассчитывались сток-затворные ВАХ нанотранзистора, а также статистический разброс тока стока при напряжении затвора $V_g = -0,22$ В для 180 транзисторов вследствие шероховатостей границ раздела Si. Последнее свидетельствует о достаточно высокой эффективности применения данного формализма.

В работе [207] проиллюстрирована применимость формализма неравновесных функций Грина для малосигнального анализа проводимости полевого нанотранзистора на углеродной нанотрубке с $L_k = 30$ и 90 нм при подаче гармонического сигнала на затвор при $T = 300$ К. При этом показана важность собственной индуктивности нанотрубки в высокочастотной области.

Остановимся на комбинированных моделях, в основе которых в качестве второго используется формализм функций Вигнера.

В статье [208] анализировались n -МОП-нанотранзисторы с КНИ-структурой с одним затвором и тонким слоем кремния. Была разработана комбинированная модель на основе самосогласованного решения уравнений Пуассона, Шредингера (одномерное в поперечном сечении, приближение эффективной массы) и квантового кинетического уравнения (ККУ) для функции Вигнера (одночастичный случай). ККУ получено из уравнения Лиувилля – фон Неймана с применением ряда аппроксимаций. При этом включалось рассеяние электронов на ионизированных примесях, акустических фононах и шероховатостях границы раздела Si/SiO₂. Восемь нижних подзон учитывалось при моделировании. При конечно-разностной аппроксимации использовались рекомендации

работы [209] для РТД (см. также [83]). Расчет стоковых характеристик проводился для транзисторов с длинами канала 20; 30 и 40 нм. Было установлено, что баллистическая компонента возрастает с уменьшением L_K , причем рассеяние имеет особо важную роль для малых напряжений на стоке и его влияние падает с уменьшением напряжения затвора. В то же время в целом рассеяние приводит к падению баллистической компоненты в транспорте и, как следствие, – тока стока. В последующей статье [210] эта комбинированная модель была модифицирована на случай моделирования МОП-нотранзисторов с КНИ-структурой с двойным затвором. Были получены ККУ для функций Вигнера в одночастичном стационарном случае в приближении эффективной массы для каждой из подзон. Предполагалось, что границы раздела Si/SiO₂ параллельны плоскости (100). Для разложения по модам решается уравнение Шредингера в двумерном случае в адиабатическом приближении. При этом волновые функции представляются рядами Фурье. Далее решаются одномерные (по пространству) ККУ и двумерное уравнение Пуассона. В модели не учитывались междолинное и внутридолинное рассеяние, а также туннелирование через оксид. Рассчитывались стоковые характеристики транзисторов с длинами канала 10; 20 и 30 нм, толщинами слоя кремния 6; 8; 10 и 12 нм и легированием канала 10^{18} см⁻³. В целом, учет отмеченных ранее механизмов рассеяния (см. [208]) приводит к более плавным ВАХ, а уменьшение толщины кремния к падению токов насыщения вследствие уменьшения числа подзон, по которым проходит ток. Сравнение с нотранзистором с одним затвором показывает, что наличие второго затвора значительно снижает влияние короткоканальных эффектов и допускает возможность прохождения существенно больших токов насыщения.

МОП-нотранзисторы с двойным затвором и нелегированным каналом вдоль направления <100> моделировались в [211]. Для

этих целей использовалась комбинированная модель. Двумерные уравнения Шредингера выводятся (в поперечных сечениях) в рамках метода эффективной массы. В работе показано, что взаимодействиями между подзонами можно пренебречь, т. е. адиабатическое приближение при декомпозиции выполняется очень хорошо. Одномерное ККУ для функции Вигнера для подзоны решается с помощью метода Монте-Карло. Самосогласованный потенциал находится с помощью комплекса программ MINIMOS-NT. При этом учитываются электрон-фононное рассеяние и только нижняя подзона, что выполняется для толщин кремния менее 5 нм. Преимущество такого подхода на основе формализма функций Вигнера заключается в том, что можно легко сравнить результаты по полуклассическому методу Монте-Карло и методу Монте-Карло для квантового случая с использованием одного и того же инструментария. Для ускорения расчетов квантовая модель применялась только в канале транзистора, т. е. для построения комбинированной модели использовалась декомпозиция и по пространству. Рассчитывались стоковые характеристики нанотранзисторов с длинами затвора 10; 15; 25 и 60 нм. Установлено, что квантовые эффекты приводят к увеличению тока стока для $L_g = 10$ нм (вследствие туннелирования) приблизительно на 30 % (согласно приведенным результатам расчетов).

Комбинированная модель, основанная на самосогласованном решении с помощью многочастичного метода Монте-Карло одномерного ККУ для функции Вигнера (неявное решение вдоль канала), одномерных уравнений Шредингера в поперечных сечениях канала и двумерного уравнения Пуассона, была предложена в [212]. С помощью модели можно учитывать различные механизмы рассеяния и, в принципе, моделировать нестационарные процессы. Модель развивает отмеченный ранее подход [70]. В работе моделировались МОП-нанотранзисторы с

двойным затвором с $L_3 = 6$ нм с эквивалентными толщинами оксида 1 и 0,5 нм с учетом рассеяния. Сток-затворные характеристики рассчитывались с помощью трех моделей: комбинированной и основанных на неявном решении КУБ с помощью метода Монте-Карло и метода неравновесных функций Грина для баллистического случая. Расчеты по первой и третьей моделям очень близки, что свидетельствует о слабом влиянии рассеяния. В то же время ток выше, чем полученный по полуклассической модели, основанной на КУБ, что свидетельствует о важности туннелирования. При расчете стоковых ВАХ включение квантовых эффектов приводит к небольшому уменьшению (ориентировочно до 8 %) тока насыщения. В то же время учет рассеяния уменьшает ток открытого состояния приблизительно на 14 %. Расчеты средней скорости электронов вдоль канала по комбинированной и полуклассическим моделям согласуются хорошо. Показано, что будет сложно достигнуть плана прогноза 2005 года [12] по электрическим параметрам нанотранзисторов с предельно малыми L_3 . Характеристики будут, судя по всему, хуже прогнозируемых вследствие рассеяния и квантовых эффектов.

Проведенное рассмотрение моделей МДП-нанотранзисторов позволяет сделать следующие основные выводы:

- 1) при расчете вольт-фарадных характеристик базовым является формализм волновых функций; для сверхтонких диэлектриков требуется разработка моделей, учитывающих туннельные токи и включающих, например, кинетические уравнения (комбинированные модели);
- 2) наиболее удачные компромиссные решения AP-проблемы при моделировании вольт-амперных характеристик достигаются с помощью полуклассических моделей, в том числе с квантовомеханическими коррекциями, квантовых диффузионно-

* По-видимому, речь идет о прогнозе 2005 или 2006 годов.

дрейфовых моделей и комбинированных моделей; учитывая при этом относительно высокую экономичность некоторых из них, такие модели могут с успехом использоваться и в инженерных приложениях, включая САПР;

3) наиболее адекватные квантовые модели в настоящее время строятся в рамках формализмов волновых функций, функций Грина и функций Вигнера (для последних двух это часто комбинированные модели с декомпозицией по модам); учитывая, как правило, большие затраты вычислительных ресурсов ЭВМ, их целесообразно использовать, прежде всего, в научно-исследовательских целях. Весьма актуальной является задача повышения экономичности таких моделей;

4) обращает на себя внимание то, что наиболее адекватные квантовые модели очень редко сравниваются с экспериментом, поэтому для них чрезвычайно актуальна разработка соответствующих методик идентификации их параметров по экспериментальным данным. В противном случае даже самые высокоадекватные модели становятся в значительной степени просто бесполезными;

5) так как многие модели ориентированы на конкретные конструктивно-технологические разновидности МДП-нанотранзисторов, а в некоторых не учитываются важные механизмы рассеяния, детали зонной структуры, границ раздела и свойств материалов приборной структуры, то актуальны разработка более универсальных, адекватных и в то же время относительно экономичных моделей и проведение комплексных исследований с учетом влияния многих факторов.

Необходимо заметить, что некоторые положения предыдущих глав монографии могут быть также полезны и здесь.

В целом, думаю, что приведенная в главе информация убедит читателя в том, что *серьезная работа в декананометровом диапазоне проектных норм ИС без глубокого понимания физики*

функционирования соответствующих элементов и инструментария их моделирования невозможна. Без этого там делать просто нечего.

8.3. Заключение

А что же дальше?

Прежде всего, отметим, что подразумевалось в монографии под термином "нанозлектроника". *Нанозлектроника – область электроники, в которой разрабатываются, создаются, исследуются, применяются приборные структуры с характеристическими размерами в диапазоне от 100 до 1 нм, а также более сложные системы, например, схемы, их включающие и поведение которых (систем) они, как правило, определяют.* Доминирующее влияние каких-то особенных квантовомеханических эффектов, как это понимается некоторыми специалистами, в данном определении не является обязательным*. Приведем дополнительные аргументы к ранее изложенным [3]. Во-первых, учет квантовомеханических закономерностей фактически проводился ранее для обычных полупроводниковых приборов и элементов микроэлектроники, так как при построении полуклассического подхода к описанию явлений переноса в полупроводниках использование квантовой механики обязательно (зонная теория и т. п., см. также [2,5,6,15]). Другого просто не дано. Во-вторых, в элементах микроэлектроники важное влияние могут оказывать вырождение носителей заряда, пространственное квантование. Это что, не квантовые эффекты? В-третьих, ситуация крайне "экстравагантно" (иначе не скажешь) складывается с рассмотренным в этой главе типом приборной структуры. Куда

* Иногда вместо этого требуется обязательное наличие некоторого нового качества. Но что это такое и с какой стороны смотреть? Это часто не поясняется. Еще более странным выглядит то, когда во главу угла ставятся не свойства изучаемого объекта (приборной структуры или схемы), а способ его изготовления.

ее тогда отнести? И когда? К микро- или наноэлектронике? Ведь важное влияние даже других квантовомеханических явлений (усиление их воздействия) по сравнению с отмеченными выше здесь будет обязательно! А вот при каких характеристических размерах? Автор не берется на это однозначно ответить. Да, и в свете изложенного в данной главе на это вряд ли кто-то способен ответить. И, наконец, последнее, по-видимому, не следует мудрствовать и усложнять, так как такие подходы обычно приводят к противоречиям типа отмеченных выше. Слово "наноэлектроника" состоит из двух частей: "нано" и "электроника". Первая часть характеризует размер, а вторая – не требует комментариев. Таким образом, *в определении сохранен только главный признак. И только.*

И тем не менее, ввиду реально сложившегося положения и в определенных целях (упрощения изложения материала, учебных, методических и т. п.), по-видимому, все же допустимо говорить о *"наноэлектронике в широком смысле"*, как, например, определено выше, и о *"наноэлектронике в узком смысле"*. В последнем случае для избежания недоразумений все же желательно, чтобы автор (авторы) пояснили, что при этом имеется в виду. Замечу, что в [2] мною фактически использовались оба понятия**.

Итак, что нас ожидает после окончания так называемой "эры" МДП-нанотранзисторов? Во-первых, согласно прогнозу 2009 года [12] к другим перспективным приборным структурам, кроме рассмотренной в этой главе, относят: приборы спинтроники, одноэлектронные транзисторы, наноэлектромеханические переключатели, ферромагнитные элементы, атомные переключатели, молекулярные приборы и

* Замечу, что оно хорошо согласуется с определением термина "нанонаука" работы [213] и многими другими определениями в этой объединяющей области науки.

**В качестве ориентира был выбран уровень интеграции ИС 10^{10} элементов на кристалле, приблизительно соответствующий числу нейронов в мозгу человека.

ряд других. Некоторые из выделенных в прогнозе приборных структур вряд ли составят серьезную конкуренцию МДП-нанотранзисторам при создании сверхинтегрированных систем [2], и, как мне кажется, выделены под впечатлением самых последних научных исследований*. Во-вторых, на настоящий момент времени не совсем ясен ответ даже на более простой вопрос: когда закончится "эра" кремниевых МОП-нанотранзисторов (см. ранее)? Думается, что здесь рационален более осторожный прогноз. По-видимому, все же следует ожидать еще большего замедления относительно закона Мура, чем указано в прогнозе 2009 года [12] (см. также [215]). Особенно серьезные проблемы, вероятно, встретятся при $L_k \leq 10$ нм, т. е. приблизительно меньше длины волны де Бройля в кремнии. Причем они, по-видимому, будут все более сильно нарастать по мере приближения к пределу 1,5 – 2 нм (см. ранее). В то же время не исключена возможность, что на нанотранзисторах с МДП-структурой удастся "пройти" всю наноэлектронику, т. е. до $L_k \approx 1$ нм. Особую перспективу здесь, как мне кажется, будут представлять приборные структуры на квантовых проволоках (см. также [4]), но не обязательно на кремнии (см. ранее).

А что же будет после 1 нм? Пикоэлектроника? А почему бы и нет. Можно выделить две электроники – одну, естественную, созданную Природой, а другую – искусственную, создаваемую Человеком. Уже отмечалось, что мозг человека может интерпретироваться как объект органической гибридной наноэлектроники** [15]. Более того, биологи в настоящее время допускают другие, гипотетические варианты "жизни". Кроме

* В то же время хороший обзор экспериментальных достижений в области кремниевой наноэлектроники дан в добротной коллективной монографии [214].

** Эта интерпретация указывает на необходимость в данном случае интеграции, по крайней мере, пяти наук (физики, химии, биологии, математики и информатики) на наноуровне.

реализованного Природой на основе углерода, возможно, другой вариант мы пытаемся воплотить на основе кремния.

А сейчас о пикоэлектронике. Отмечу, что атом с электроном, движущимся по орбите, по существу, является объектом естественной пикоэлектроники. Т. е. она существовала всегда! Или, по крайней мере, очень давно. В связи с этим осознанная работа Человека в искусственной пикоэлектронике будет захватывающе интересна с весьма оригинальными результатами. *Не исключена возможность, что именно с применением пикоэлектроники будет реализован другой вариант "жизни", например, на основе кремния.*

В целом, этот взгляд не противоречит изложенным в легендарной лекции Ричарда Фейнмана "Внизу полным-полно места" и не менее интересной последующей лекции "Инфинитезимальные машины". Разумно закончить книгу его же словами [216]: "...мы, физики, могли бы решать такие задачи просто ради интереса или забавы. Давайте начнем с забавы!"

Список литературы к главе 8

1. Goldhaber-Gordon D., Montemerlo M.S., Love J.C., Opiteck G.J., Ellenbogen J.C. Overview of nanoelectronic devices // Proc. IEEE. 1997. V. 85. N 4. P. 521 – 540.
2. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. IV. Квантовомеханические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24 – 32.
3. Абрамов И.И. Термин "элемент" в микро- и наноэлектронике // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 6. С. 2 – 4.
4. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники.

VII. Структуры на квантовых проволоках // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 7. С. 14 – 29; № 8. С. 7 – 23.

5. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26 – 36.

6. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. III. Численное моделирование в рамках полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 1. С. 36 – 47.

7. Ferry D.K. Nanowires in nanoelectronics // Science. 2008. V. 319. P. 579 – 580.

8. Шахнович И. Технология уровня 45 нм: 45, 32, далее везде? // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. 2008. № 2. С. 102 – 109.

9. Майская В. Транзисторы компании Intel с тройным затвором. Закон Мура по-прежнему справедлив // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. 2006. № 7. С. 50 – 52.

10. Likharev K. Electronics below 10 nm. In: Nano and Giga Challenges in Microelectronics / Ed. by J. Greer, A. Korkin, J. Labanowski. Amsterdam: Elsevier. 2003. P. 27 – 68.

11. Валиев К.А., Орликовский А.А. От микро- и нанoeлектроники к твердотельным квантовым компьютерам // Успехи современной радиоэлектроники. 2004. № 5 – 6. С. 106 – 117.

12. International Technology Roadmap for Semiconductors: 1999 edition. Austin, TX: International SEMATECH, 1999; 2001 edition; 2003 edition; 2005 edition; 2007 edition; 2009 edition.

13. Hadley P. Bottom-up nanoelectronics // Proc. 34th European Microwave Conference, 2004, Amsterdam. P. 141 – 145.

14. Zhirnov V.V., Cavin III R.K., Hutchby J.A., Bourianoff G.I. Limits to binary logic switch scaling – A Gedanken model // Proc. IEEE. 2003. V. 91. N 11. P. 1934 – 1939.
15. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34 – 37.
16. Chang T.H.P., Kern D.P., Kratschmer E., Lee K.Y., Luhn H.E., McCord M.A., Rishton S.A., Vladimirsky Y. Nanostructure technology // IBM J. Res. Develop. 1988. V.32. N 4. P. 462 – 493.
17. Taur Y., Mii Y.-J., Frank D.J., Wong H.-S., Buchanan D.A., Wind S.J., Rishton S.A., Sai-Halasz G.A., Nowak E. J. CMOS scaling into the 21st century: 0.1 μm and beyond // IBM J. Res. Develop. 1995. V.39. N 1/2. P. 245 – 260.
18. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов. Часть I. М.: Техносфера. 2002. 416 с.
19. Sai-Halasz G.A., Wordeman M.R., Kern D.P., Ganin E., Rishton S., Zicherman D.S., Schmid H., Polcari M.R., Ng H.Y., Restle P.J., Chang T.H.P., Dennard R.H. Design and experimental technology for 0.1- μm gate-length low-temperature operation FET's // IEEE Electron Device Letters. 1987. V. EDL-8. N 10. P. 463 – 466.
20. Sai-Halasz G.A., Wordeman M.R., Kern D.P. Rishton S., Ganin E. High transconductance and velocity overshoot in NMOS devices at the 0.1- μm gate-length level // IEEE Electron Device Letters. 1988. V. 9. N 9. P. 464 – 466.
21. Shahidi G.G., Antoniadis D.A., Smith H.I. Electron velocity overshoot at room and liquid nitrogen temperatures in silicon inversion layers // IEEE Electron Device Letters. 1988. V. 9. N 2. P. 94 – 96.

22. Shahidi G.G., Antoniadis D.A., Smith H.I. Reduction of channel hot-electron-generated substrate current in sub-150-nm channel length Si MOSFET's // IEEE Electron Device Letters. 1988. V. 9. N 10. P. 497 – 499.
23. Laux S.E. Fischetti M.V. Monte-Carlo simulation of submicrometer Si n-MOSFET's at 77 and 300 K // IEEE Electron Device Letters. 1988. V. 9. N 9. P. 467 – 469.
24. Fischetti M.V., Laux S.E. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 14. P. 9721 – 9745.
25. Laux S.E. Fischetti M.V., Frank D.J. Monte Carlo analysis of semiconductor devices: The DAMOCLES program // IBM J. Res. Develop. 1990. V. 34. N 4. P. 466 – 494.
26. Fischetti M.V., Laux S.E. Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures. Part II. Submicrometer MOSFET's // IEEE Trans. on Electron Devices. 1991. V. 38. N 3. P. 650 – 660.
27. Fischetti M.V. Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures. Part I. Homogeneous transport // IEEE Trans. on Electron Devices. 1991. V. 38. N 3. P. 634 – 649.
28. Lee W., Laux S.E. Fischetti M.V., Baccarani G., Gnudi A., Storck J.M.C., Mandelman J.A., Crabbè E.F., Wordeman M.R., Odeh F. Numerical modeling of advanced semiconductor devices // IBM J. Res. Develop. 1992. V. 36. N 2. P. 208 – 232.
29. Kumar A., Fischetti M.V., Laux S.E. Monte-Carlo simulations of performance scaling in strained-Si nMOSFETs // Proc. Int. Conf. Simul. Semicond. Process. Devices. 2005. P. 299 – 302.
30. Gross W.J., Vasileska D., Ferry D.K. Three-dimensional simulations of ultrasmall metal-oxide-semiconductor field-effect

transistors: The role of the discrete impurities on the device terminal characteristics // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 91. N6. P. 3737 – 3740.

31. Gross W.J., Vasileska D., Ferry D.K. A novel approach for introducing the electron-electron and electron-impurity interactions in particle-based simulations // *IEEE Electron Device Letters.* 1999. V. 20. N 9. P. 463 – 465.

32. Kawaura H., Sakamoto T., Baba T., Ochiai Y., Fujita J., Matsui S., Sone J. Proposal of pseudo source and drain MOSFETs for evaluating 10-nm gate MOSFETs // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1997. V. 36. Part 1. N 3 B. P. 1569 – 1573.

33. Shimatani T., Pidini S., Koyanagi M. New electrically thinned intrinsic-channel SOI MOSFET with 0.01 μm channel length // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1997. V. 36. Part 1. N 3 B. P. 1659 – 1662.

34. Yanagi S.-I., Nakakubo A., Omura Y. Proposal of a partial-ground-plane (PGP) silicon-on-insulator (SOI) MOSFET for deep sub-0.1- μm channel regime // *IEEE Electron Device Letters.* 2001. V. 22. N 6. P. 278 – 280.

35. Вьюрков В.В., Орликовский А.А., Сидоров А.А. Моделирование характеристик полевого баллистического нанотранзистора в тонком кремнии на изоляторе // *Микроэлектроника.* 2003. Т. 32. № 4. С. 283 – 293.

36. Сидоров А.А., Вьюрков В.В., Орликовский А.А. Применение метода Монте-Карло для моделирования кремниевых полевых нанотранзисторов // *Микроэлектроника.* 2004. Т. 33. № 4. С. 243 – 255.

37. Navid R., Jungemann C., Lee T. H., Dutton R.W. High-frequency noise in nanoscale metal oxide semiconductor field effect transistors // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 101. N 12. P. 124501-1 – 8.

38. Granzner R., Polyakov V.M., Schwierz F., Kittler M., Doll T. On the suitability of DD and HD models for the simulation of nanometer double-gate MOSFETs // *Physica E.* 2003. V. 19. P. 33 – 38.

39. Абрамов И.И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем". Учеб. пособие. Минск: БГУ. 1999. 92 с.
40. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва – Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика". 2005. 152 с.
41. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Минск: БГУ. 1999. 189 с.
42. Коноплев Б.Г., Рындин Е.А. Интегральная наноэлектроника на основе связанных квантовых областей. Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ. 2008. 230 с.
43. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир. 1985. 415 с.
44. Ferry D.K. Transport of hot carriers in semiconductor quantized inversion layers // *Solid-State Electron*. 1978. V.21. P. 115 –121.
45. Janik T., Majkusiak B. Quantum effects in MOS transistors // *Electron Technology*. 1994. V. 27. N 2. P. 3 – 27.
46. Yu Z., Dutton R.W., Kiehl R.A. Circuit/device modeling at the quantum level // *IEEE Trans. on Electron Devices*. 2000. V. 47. N 10. P. 1819 – 1825.
47. Yan R.-H., Ourmazd A., Lee K.F. Scaling the Si MOSFET: From bulk to SOI to bulk // *IEEE Trans. on Electron. Devices*. 1992. V. 39. N 7. P. 1704 – 1710.
48. Suzuki K., Tanaka T., Tosaka Y., Horie H., Arimoto Y. Scaling theory of double-gate SOI MOSFET's // *IEEE Trans. on Electron Devices*. 1993. V. 40. N 12. P. 2326 – 2329.
49. Auth C.P., Plummer J.D. Scaling theory for cylindrical fully-depleted, surrounding-gate MOSFET's // *IEEE Electron Device Letters*. 1997. V. 18. N 2. P. 74 – 76.

50. Frank D.J., Taur Y., Wong H.-S.P. Generalized scale length for two-dimensional effects in MOSFET's // IEEE Electron Device Letters. 1998. V. 19. N 10. P. 385 – 387.
51. Wang J., Solomon P., Lundstrom M. A general approach for the performance assessment of nanoscale silicon field effect transistors // IEEE Trans. on Electron Devices. 2004. V. 51. N 9. P. 1366 – 1370.
52. Chen Q., Meindl J.D. Nanoscale metal-oxide-semiconductor field-effect transistors: scaling limits and opportunities // Nanotechnology. 2004. V. 15. P. S549 –S555.
53. Ringhofer C., Gardner C., Vasileska D. Effective potentials and quantum fluid models: A thermodynamic approach // Inter. J. High Speed Electr. Syst. 2003. V. 13. P. 771 – 802.
54. Frank D.J., Laux S.E., Fischetti M.V. Monte Carlo simulations of p- and n-channel dual-gate Si MOSFET's at the limits of scaling // IEEE Trans. on Electron Devices. 1993. V. 40. N 11. P. 2103.
55. Fischetti M.V., Laux S.E. Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. N 4. P. 2244 – 2274.
56. Saint-Martin J., Boumel A., Monsef F., Chassat C., Dollfus P. Multi sub-band Monte Carlo simulation of an ultra-thin double gate MOSFET with 2D electron gas // Semicond. Sci. Technol. 2006. V. 21. P. L29 – L31.
57. Fischetti M.V., Laux S.E., Crabbè E. Understanding hot-electron transport in silicon devices: Is there a shortcut? // J. Appl. Phys. 1995. V. 78. N 2. P. 1058 – 1087.
58. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Численное моделирование элементов интегральных схем. Минск: Вышэйшая школа. 1990. 224 с.
59. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер.3. Микроэлектроника. 1991. Вып. 5. С. 3 – 9.

60. Tsuchiya H., Horino M., Miyoshi T. Quantum Monte Carlo device simulation of nano-scaled SOI-MOSFETs // *J. Comput. Electron.* 2003. V. 2. N 2 – 4. P. 91 – 95.
61. Tsuchiya H., Fujii K., Mori T., Miyoshi T. A quantum-corrected Monte Carlo study on quasi-ballistic transport in nanoscale MOSFETs // *IEEE Trans. on Electron Devices.* 2006. V. 53. N 12. P. 2965 – 2971.
62. Wang W., Tsuchiya H., Ogawa M. Enhancement of ballistic efficiency due to source to channel heterojunction barrier in Si metal oxide semiconductor field effect transistors // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 106. N 2. P. 024515-1 – 6.
63. Heitzinger C., Ringhofer C., Ahmed S., Vasileska D. 3D Monte-Carlo device simulations using an effective quantum potential including electron-electron interactions // *J. Comput. Electron.* 2007. V. 6. P. 15 – 18.
64. Vasileska D., Knezevic I., Akis R., Ferry D.K. The role of quantization effects on the operation of 50 nm MOSFET and 250 nm FIBMOS device // *Techn. Proc. Int. Conf. on Modeling and Simul. of Microsyst. Nanotech.* 2002. V. 1. P. 556 – 559.
65. Ahmed S., Ringhofer C., Vasileska D. An effective potential approach to modeling 25 nm MOSFET devices // *J. Comput. Electron.* 2003. V. 2. P. 113 – 117.
66. Sampedro C., Gámiz F., Godoy A., Jiménez-Molinos F. Quantum ensemble Monte Carlo simulation of silicon-based nanodevices // *J. Comput. Electron.* 2007. V. 6. P. 41 – 44.
67. Tanabe R., Yamasaki T., Ashizawa Y., Oka H. Analysis of nano-scale MOSFET including uniaxial and biaxial strain // *J. Comput. Electron.* 2007. V. 6. P. 49 – 53.
68. Oriols X., Fernández-Díaz E. Electron injection model for the particle simulation of 3D, 2D and 1D nanoscale FETs // *J. Comput. Electron.* 2007. V. 6. P. 7 – 10.

69. Oriols X., Fernández-Díaz E., Álvarez A., Alarcón A. An electron injection model for time-dependent simulators of nanoscale devices with electron confinement: Application to the comparison of the intrinsic noise of 3D-, 2D- and 1D-ballistic transistors // *Solid-State Electron*. 2007. V. 51. P. 306 – 319.
70. Shifren L., Ringhofer C., Ferry D.K. A Wigner function-based quantum ensemble Monte Carlo study of a resonant tunneling diode // *IEEE Trans. on Electron Devices*. 2003. V. 50. N 3. P. 769 – 773.
71. Querlioz D., Saint-Martin J., Boumel A., Dollfus P. Wigner Monte Carlo simulation of phonon-induced electron decoherence in semiconductor nanodevices // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 78. N 16. P. 165306-1 – 10.
72. Rhew J.-H., Lundstrom M.S. Drift-diffusion equation for ballistic transport in nanoscale metal-oxide-semiconductor field effect transistors // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 92. N 9. P. 5196 – 5202.
73. Rhew J.-H., Ren Z., Lundstrom M.S. A numerical study of ballistic transport in a nanoscale MOSFET // *Solid-State Electron*. 2002. V. 46. P. 1899 – 1906.
74. Fiori G., Iannaccone G. Modeling of ballistic nanoscale metal-oxide-semiconductor field effect transistors // *Appl. Phys. Letters*. 2002. V. 81. N 19. P. 3672 – 3674.
75. Kim K., Kwon O., Seo J., Won T. Nanoscale device modeling and simulation: Fin field-effect transistor (FinFET) // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2004. V. 43. N 6 B. P. 3784 – 3789.
76. Jin S., Tang T.-W., Fischetti M.V. Simulation of silicon nanowire transistors using Boltzmann transport equation under relaxation time approximation // *IEEE Trans. on Electron Devices*. 2008. V. 55. N 3. P. 727 – 736.
77. Jin S., Park Y.J., Min H.S. A three-dimensional simulation of quantum transport in silicon nanowire transistor in the presence of

electron-phonon interactions // J. Appl. Phys. 2006. V. 99. N 12. P. 123719-1 – 10.

78. Jin S., Fischetti M.V., Tang T.-w. Differential conductance fluctuations in silicon nanowire transistors caused by quasiballistic transport and scattering induced intersubband transitions // Appl. Phys. Letters. 2008. V. 92. N 8. P. 082103-1 – 3.

79. Andrei P., Mayergoyz I. Analysis of fluctuations in semiconductor devices through self-consistent Poisson – Schrödinger computations // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. N 4. P. 2071 – 2079.

80. Banoo K., Lundstrom M., Smith R.K. Direct solution of the Boltzmann transport equation in nanoscale Si devices // Proc. Int. Conf. Simul. Semicond. Process. Devices. 2000. P. 50 – 53.

81. Jungemann C., Pham A.T., Meinerzhagen B., Ringhofer C., Bollhöfer M. Stable discretization of the Boltzmann equation based on spherical harmonics, box integration, and a maximum entropy dissipation principle // J. Appl. Phys. 2006. V. 100. N 2. P. 024502-1 – 13.

82. Kosina H., Nedjalkov M., Selberherr S. Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation // IEEE Trans. on Electron Devices. 2000. V. 47. N 10. P. 1898 – 1908.

83. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 3. С. 57 – 70.

84. Natori K. Ballistic metal-oxide-semiconductor field effect transistor // J. Appl. Phys. 1994. V. 76. N 8. P. 4879 – 4890.

85. Lundstrom M. Elementary scattering theory of the Si MOSFET // IEEE Electron Device Letters. 1997. V. 18. N 7. P. 361 – 363.

86. Ren Z., Lundstrom M.S. Simulation of nanoscale MOSFETs: A scattering theory interpretation // Superlatt. Microstruct. 2000. V. 27. P. 179 – 189.

87. Lundstrom M.S. On the mobility versus drain current relation for a nanoscale MOSFET // *IEEE Electron Device Letters*. 2001. V. 22. N 6. P. 293 – 295.
88. Pikus F.G., Likharev K.K. Nanoscale field-effect transistors: An ultimate size analysis // *Appl. Phys. Lett.* 1997. V. 71. N 25. P. 3661 – 3663.
89. Jiménez D., Sáenz J.J., Iñiguez B., Suñe J., Marsal L.F., Pallarès J. Unified compact model for the ballistic quantum wire and quantum well metal-oxide-semiconductor field-effect-transistor // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. N 2. P. 1061 – 1068.
90. Assad F., Ren Z., Vasileska D., Datta S., Lundstrom M. On the performance limits for Si MOSFET's: A theoretical study // *IEEE Trans. Electron Devices*. 2000. V. 47. P. 232 – 240.
91. Guo J., Lundstrom M., Datta S. Performance projections for ballistic carbon nanotube field-effect transistors // *Appl. Phys. Lett.* 2002. V. 80. N 17. P. 3192 – 3194.
92. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Наука. 1976. 664 с.
93. Luo J.-W., Li S.-S., Xia J.-B., Wang L.-W. Quantum mechanical effects in nanometer field effect transistors // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 90. N 14. P. 143108-1 – 3.
94. Appenzeller J., Knoch J., Björk M.T., Riel H., Schmid H., Riess W. Toward nanowire electronics // *IEEE Trans. on Electron Devices*. 2008. V. 55. N 11. P. 2827 – 2845.
95. Datta S. Nanoscale device modeling: the Green's function method // *Superlatt. Microstruct.* 2000. V. 28. N 4. P. 253 – 278.
96. Datta S. Electrical resistance: an atomistic view // *Nanotechnology*. 2004. V. 15. P. S433 – S451.
97. Lundstrom M., Ren Z. Essential physics of carrier transport in nanoscale MOSFET's // *IEEE Trans. Electron Devices*. 2002. V. 49. N 1. P. 133 – 141.

98. Rahman A., Guo J., Datta S., Lundstrom M. Theory of ballistic nanotransistors // IEEE Trans. Electron Devices. 2003. V. 50. N 9. P. 1853 – 1864.
99. Stern F. Iteration methods for calculating self-consistent fields in semiconductor inversion layers // J. of Comput. Physics. 1970. V. 6. P. 56 – 67.
100. Stern F. Self-consistent results for n-type Si inversion layers // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. N 12. P. 4891 – 4899.
101. Luryi S. Quantum capacitance devices // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 6. P. 501 – 503.
102. Ohba T., Natori K. Capacitance of nanostructures // Jpn. J. Appl. Phys. 1996. V. 35. Part 1. N 2 B. P. 1366 – 1369.
103. John D.L., Castro L.C., Pulfrey D.L. Quantum capacitance in nanoscale device modeling // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. N 9. P. 5180 – 5184.
104. Richter C.A., Hefner A.R., Vogel E.M. A comparison of quantum-mechanical capacitance-voltage simulators // IEEE Electron Device Letters. 2001. V. 22. N 1. P. 35 – 37.
105. Godoy A., Ruiz-Gallardo A., Sampedro C., Gámiz F. Quantum-mechanical effects in multiple-gate MOSFETs // J. Comput. Electron. 2007. V. 6. P. 145 – 148.
106. Karner M., Gehring A., Holzer S., Pourfath M., Wagner M., Goes W., Vasicek M., Baumgartner O., Kernstock C., Schnass K., Zeiler G., Grasser T., Kosina H., Selberherr S. A multi-purpose Schrödinger – Poisson solver for TCAD applications // J. Comput. Electron. 2007. V. 6. P. 179 – 182.
107. Trellakis A., Galick A.T., Pacelli A., Ravaioli U. Iteration scheme for the solution of the two-dimensional Schrödinger – Poisson equations in quantum structures // J. Appl. Phys. 1997. V. 81. N 12. P. 7880 – 7884.

108. Simonetti O., Maurel T., Jourdain M. Characterization of ultrathin metal-oxide-semiconductor structures using coupled current and capacitance-voltage models based on quantum calculation // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 92. N 8. P. 4449 – 4458.
109. Fischetti M.V. Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli master equation // *J. Appl. Phys.* 1998. V. 83. N 1. P. 270 – 291.
110. Gardner C.L. The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices // *SIAM J. on Appl. Mathem.* 1994. V. 54. N 2. P. 409 – 427.
111. Gardner C.L., Ringhofer C. The Chapman–Enskog expansion and the quantum hydrodynamic model for semiconductor devices // *VLSI Design.* 2000. V. 10. P. 415 – 435.
112. Pinnau R. A review on the quantum drift diffusion model // *Transport Theory and Statist. Physics.* 2002. V. 31. N 4 – 6. P. 367 – 395.
113. Degond P., Méhats F., Ringhofer C. Quantum hydrodynamic models derived from the entropy principle // *Contemporary Math.* 2005. V. 371. P. 107 – 131.
114. de Falco C., Gatti E., Lacaita A.L., Sacco R. Quantum-corrected drift-diffusion models for transport in semiconductor devices // *J. of Comput. Physics.* 2005. V. 204. P. 533 – 561.
115. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Рёпке Г. Статистическая механика неравновесных процессов. М.: Физматлит. 2002. Т. 1. 432 с. Т. 2. 296 с.
116. Ferry D.K., Zhou J.-R. Form of the quantum potential for use in hydrodynamic equations for semiconductor device modeling // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 48. N 11. P. 7944 – 7950.
117. Польский Б.С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. Рига: Зинатне. 1986. 168 с.

118. Ancona M.G., Tiersten H.F. Macroscopic physics of the silicon inversion layer // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 35. N 15. P. 7959 – 7965.

119. Ancona M.G., Iafrate G.I. Quantum correction to the equation of state of an electron gas in a semiconductor // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39. N 13. P. 9536 – 9540.

120. Ancona M.G. Macroscopic description of quantum-mechanical tunneling // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 42. N 2. P. 1222 – 1233.

121. Ancona M.G., Yu Z., Dutton R.W., Vande Voorde P.J., Cao M., Vook D. Density-gradient analysis of tunneling in MOS structures with ultra-thin oxides // *Proc. Int. Conf. Simul. Semicond. Process. Devices*. 1999. P. 235 – 238.

122. Rafferty C.S., Biegel B., Yu Z., Ancona M.G., Bude J., Dutton R.W. Multi-dimensional quantum effect simulation using a density-gradient model and script-level programming techniques // *Proc. Int. Conf. Simul. Semicond. Process. Devices*. 1998. P. 137 – 140.

123. Ancona M.G., Yu Z., Lee W.-C., Dutton R.W., Voorde P.V. Simulation of quantum confinement effects in ultra-thin-oxide MOS structures // *J. of Technology Comp. Aided Design*. 1998. N 11. 17 p.

124. Biegel B.A., Ancona M.G., Rafferty C.S., Yu Z. Efficient multi-dimensional simulation of quantum confinement effects in advanced MOS devices // *NAS Technical Report NAS-04-008*. 2004. 11 p.

125. Park J.-S., Shin H., Connelly D., Yergeau D., Yu Z., Dutton R.W. Analysis of 2-D quantum effects in the poly-gate and their impact on the short-channel effects in double-gate MOSFETs via the density-gradient method // *Solid-State Electron*. 2004. V. 48. P. 1163 – 1168.

126. Pirovano A., Lacaita A.L., Spinelli A.S. Fully 2D quantum-mechanical simulation of nanoscale MOSFETs // *Proc. Int. Conf. Simul. Semicond. Process. Devices*. 2001. P. 94 – 97.

127. Ancona M.G., Svizhenko A. Density-gradient theory of tunneling: Physics and verification in one dimension // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 104. N. 7. P. 073726-1 – 13.
128. Wettstein A., Schenk A., Fichtner W. Quantum device-simulation with the density-gradient model on unstructured grids // *IEEE Trans. on Electron Devices.* 2001. V. ED-48. P. 279 – 284.
129. Gardner C.L., Ringhofer C. Smooth quantum potential for the hydrodynamic model // *Phys. Rev. E.* 1996. V. 53. N 1. P. 157 – 167.
130. Watling J. R., Brown A.R., Asenov A., Ferry D.K. Quantum correction in 3-D drift diffusion simulations of decanano MOSFETs using an effective potential // *Proc. Int. Conf. Simul. Semicond. Process. Devices.* 2001. P. 82 – 85.
131. Asenov A., Brown A.R., Watling J.R. The use of quantum potentials for confinement in semiconductor devices // *Techn. Proc. Int. Conf. on Modeling and Simul. of Microsyst. Nanotech.* 2002. V. 1. P. 490 – 493.
132. Asenov A., Brown A.R., Watling J.R. Quantum corrections in the simulation of decanano MOSFETs // *Solid-State Electron.* 2003. V. 47. N 7. P. 1141 – 1145.
133. Tang C.-S., Li Y., Chao T.-S. Numerical simulation of nanoscale double-gate and gate-all-around metal-oxide-semiconductor devices // *WSEAS Trans. on Electron.* 2004. V. 1. N 1. P. 102 – 107.
134. Pinnau R. Uniform convergence of an exponentially fitted scheme for the quantum drift diffusion model // *SIAM J. Numer. Anal.* 2004. V. 42. N 4. P. 1648 – 1668.
135. Pinnau R., Ruiz V J. M. Convergent finite element discretizations of the density gradient equation for quantum semiconductors // *J. Comput. and Appl. Mathem.* 2009. V. 223. N 2. P. 790 – 800.

136. Stenzel R., Müller L, Herrmann T., Klix W. Numerical simulation of nanoscale double-gate MOSFETS // Proc. 5th Int. Conf. on Adv. Engin. Design, E 205 Acta Polytechnica. 2006. V. 46. N 5. P. 35 – 39.
137. Burger M., Pinnau R. Fast optimal design of semiconductor devices // SIAM J. Appl. Math. 2003. V. 64. N 1. P. 108 – 126.
138. Абрамов И.И. Метод синтеза эквивалентных схем полупроводниковых приборов и структур // Изв. вузов СССР. Радиоэлектроника. 1985. Т. 28. № 11. С. 63 – 69.
139. Абрамов И.И., Харитонов В.В. Метод автоматического синтеза эквивалентных схем полупроводниковых приборов с учетом тепловых эффектов // Весці АН БССР. Сер. фіз-энерг. навук. 1987. № 3. С. 78 – 84.
- 140*. Абрамов И.И. Методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем полупроводниковых приборов и структур // Микросистемная техника. 2002. № 6. С. 18 – 23.
141. Abramov I.I. An automatic synthesis method of compact models of integrated circuit devices based on equivalent circuits // Proc. of SPIE. 2006. V. 6260. P. 626011-1 – 8.
142. Обухов И.А. Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах. Севастополь: Вебер. 2005. 226 с.
143. Gallego S., Méhats F. Numerical approximation of a quantum drift-diffusion model // Comptes Rendus Mathem. 2004. V. 339. N.7. P. 519 – 524.
144. Gallego S., Méhats F. Entropic discretization of a quantum drift-diffusion model // SIAM J. Numer. Anal. 2005. V. 43. N 5. P. 1828 – 1849.
145. Degond P., Gallego S., Méhats F. Simulation of a resonant tunneling diode using an entropic quantum drift-diffusion model // J. Comput. Electron. 2007. V. 6. P. 133 – 136.

146. Naveh Y., Likharev K.K. Modeling of 10-nm-scale ballistic MOSFET's // IEEE Electron Device Letters. 2000. V. 21. N 5. P. 242 – 244.
147. Walls T.J., Sverdlov V.A., Likharev K.K. MOSFETs below 10 nm: quantum theory // Physica E. 2003. V. 19. P. 23 – 27.
148. Walls T.J., Sverdlov V.A., Likharev K.K. Nanoscale SOI MOSFETs: a comparison of two options // Solid-State Electron. 2004. V.48. P. 857 – 865.
149. Walls T.J., Likharev K.K. Two-dimensional quantum effects in "ultimate" nanoscale metal-oxide-semiconductor field-effect transistors // J. Appl. Phys. 2008. V. 104. N 12. P. 124307-1 – 15.
150. Laux S.E., Kumar A., Fischetti M.V. Analysis of quantum ballistic electron transport in ultrascale silicon devices including space-charge and geometric effects // J. Appl. Phys. 2004. V. 95. N 10. P. 5545 – 5582.
151. Laux S.E., Kumar A., Fischetti M.V. QDAME simulation of 7.5 nm double-gate Si nFETs with differing access geometries // IEEE Int. Electron Devices Meet. 2002. P. 715 – 718.
152. Laux S.E., Kumar A., Fischetti M.V. Ballistic FET modeling using QDAME: Quantum Device Analysis by Modal Evaluation // IEEE Trans. on Nanotechnology. 2002. V. 1. N 4. P. 255 – 259.
153. Fischetti M.V., Laux S.E., Kumar A. Simulation of quantum electronic transport in small devices: A Master equation approach // IEEE Int. Electron Devices Meet. 2003. P. 19.3.1 – 19.3.4.
154. Laux S.E. Arbitrary crystallographic orientation in QDAME with Ge 7.5 nm DGFET examples // J. of Comput. Electron. 2004. V. 3. P. 379 – 385.
155. Pourghaderi M.A., Magnus W., Sorée B., Meuris M., De Meyer K., Heyns M. Ballistic current in metal-oxide-semiconductor field-effect transistors: The role of device topology // J. Appl. Phys. 2009. V. 106. N 5. P. 053702-1 – 8.

156. Gilbert M.J., Ferry D.K. Efficient quantum three-dimensional modeling of fully depleted ballistic silicon-on-insulator metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 95. N 12. P. 7954 – 7960.
157. Basu D., Gilbert M.J., Banerjee S.K. Effect of elastic process and ballistic recovery in silicon nanowire transistors // *J. Comput. Electron.* 2007. V. 6. P. 113 – 116.
158. Ferry D.K., Akis R., Gilbert M.J. Semiconductor device scaling: The role of ballistic transport // *J. Comput. Theor. Nanosci.* 2007. V. 4. P. 1149 – 1152.
159. Heinz F.O., Schenk A. Self-consistent modeling of longitudinal quantum effects in nanoscale double-gate metal oxide semiconductor field effect transistors // *J. Appl. Phys.* 2006. V. 100. N 8. P. 084314-1 – 8.
160. Orlikovsky A., Vyurkov V., Lukichev V., Semenikhin I., Khomyakov A. All quantum simulation of ultrathin SOI MOSFET. In: *Nanoscaled Semiconductor-on-Insulator Structures and Devices.* 2007. Springer. P. 323 – 340.
161. Вьюрков В.В., Лукичев В.Ф., Орликовский А.А., Семинихин И.А., Хомяков А.Н. Квантовое моделирование кремниевых полевых нанотранзисторов // *Труды ФТИАН.* 2008. Т. 19. С. 195 – 216.
162. Vyurkov V., Semenikhin I., Lukichev V., Burenkov A., Orlikovsky A. All-quantum simulation of an ultra-small SOI MOSFET // *Proc. SPIE.* 2008. V. 7025. P. 70251K-1 – 12.
163. Chen W., Register L.F., Banerjee S.K. Two-dimensional quantum mechanical simulation of electron transport in nano-scaled Si-based MOSFETs // *Physica E.* 2003. V. 19. P. 28 – 32.
164. Chen W., Register L.F., Banerjee S.K. Schrödinger equation Monte Carlo in two dimensions for simulation of nanoscale metal-

oxide-semiconductor field effect transistors // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103. N 2. P. 024508-1 – 15.

165. Liu K.-M., Chen W., Register L.F., Banerjee S.K. Schrödinger equation Monte Carlo in three dimensions for simulation of carrier transport in three-dimensional nanoscale metal oxide semiconductor field-effect transistors // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 104. N 11. P. 114515-1 – 7.

166. Register L.F. Schrödinger equation Monte Carlo: Bridging the gap from quantum to classical transport // *Int. J. of High Speed Electron. and Systems.* 1998. V. 9. N 1. P. 251 – 279.

167. Register L.F., Hess K. Simulation of carrier capture in semiconductor quantum wells: Bridging the gap from quantum to classical transport // *Appl. Phys. Lett.* 1997. V. 71. N 9. P. 1222 – 1224.

168. Chen W., Register L.F., Banerjee S.K. Simulation of quantum effects along the channel of ultrascaled Si-based MOSFETs // *IEEE Trans. on Electron Devices.* 2002. V. 49. N 4. P. 652 – 657.

169. Pau G.S.H. Reduced basis method for simulation of nanodevices // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 78. N 15. P. 155425-1 – 15.

170. Svizhenko A., Anantram M.P., Govindan T.R., Biegel B., Venugopal R. Two-dimensional quantum mechanical modeling of nanotransistors // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 91. N 4. P. 2343 – 2354.

171. Svizhenko A., Anantram M.P. Role of scattering in nanotransistors // *IEEE Trans. on Electron Devices.* 2003. V. 50. N 6. P. 1459 – 1466.

172. Park H.-H., Jin S., Park Y.J., Min H.S. Quantum simulation of noise in silicon nanowire transistors with electron-phonon interactions // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 105. N 2. P. 023712-1 – 6.

173. Martinez A., Svizhenko A., Anantram M.P., Barker J.R., Asenov A. A NEGF study of the effect of surface roughness on

CMOS nanotransistors // *J. of Physics: Conf. Ser.* 2006. V. 35. P. 269 – 274.

174. Barker J.R., Martinez A., Svizhenko A., Anantram M.P., Asenov A. Green function study of quantum transport in ultra-small devices with embedded atomistic clusters // *J. of Physics: Conf. Ser.* 2006. V. 35. P. 233 – 246.

175. Martinez A., Barker J.R., Asenov A., Svizhenko A., Anantram M.P. Developing a full 3D NEGF simulator with random dopant and interface roughness // *J. Comput. Electron.* 2007. V. 6. P. 215 – 218.

176. Pons N., Cavassilas N., Michelini F., Raymond L., Bescond M. Original shaped nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistor with enhanced current characteristics based on three-dimensional modeling // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 106. N 5. P. 053711-1 – 4.

177. Ren Z., Venugopal R., Datta S., Lundstrom M., Jovanovic D. The ballistic nanotransistor: A simulation study // *IEEE Int. Electron. Devices Meet.* 2000. P. 715 – 718.

178. Venugopal R., Ren Z., Datta S., Lundstrom M.S., Jovanovic D. Simulating quantum transport in nanoscale transistors: Real versus mode-space approaches // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 92. N 7. P. 3730 – 3739.

179. Goasguen S., Butt A.R., Colby K.D., Lundstrom M.S. Parallelization of the nanoscale device simulator nanoMOS 2.0 using a 100 nodes Linux cluster // *Proc. IEEE Nanotechnology Conf.* 2002. P. 409 – 412.

180. Guo J., Lundstrom M. A computational study of thin-body, double-gate, Shottky barrier MOSFETs // *IEEE Trans. on Electron Devices.* 2002. V. 49. N 11. P. 1897 – 1902.

181. Venugopal R., Ren Z., Lundstrom M.S. Simulating quantum transport in nanoscale MOSFETs: Ballistic hole transport, subband

engineering and boundary conditions // IEEE Trans. on Nanotechnology. 2003. V. 2. N 3. P. 135 – 143.

182. Venugopal R., Paulsson M., Goasguen S., Datta S., Lundstrom M.S. A simple quantum mechanical treatment of scattering in nanoscale transistors // J. Appl. Phys. 2003. V. 93. N 9. P. 5613 – 5625.

183. Ren Z., Venugopal R., Goasguen S., Datta S., Lundstrom M.S. nanoMOS 2.5: A two-dimensional simulator for quantum transport in double-gate MOSFETs // IEEE Trans. on Electron Devices. 2003. V. 50. P. 1914 – 1925.

184. Venugopal R., Goasguen S., Datta S., Lundstrom M.S. Quantum mechanical analysis of channel access geometry and series resistance in nanoscale transistors // J. Appl. Phys. 2004. V. 95. N 1. P. 292 – 305.

185. Hasan S., Wang., Lundstrom M. Device design and manufacturing issues for 10 nm-scale MOSFETs: A computational study // Solid-State Electron. 2004. V. 48. N 6. P. 867 – 875.

186. Jimenez D., Iñiguez B., Suñé J., Sáenz J.J. Analog performance of the nanoscale double-gate metal-oxide-semiconductor field-effect-transistor near the ultimate scaling limits // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. N 9. P. 5271 – 5276.

187. Rahman A., Lundstrom M.S., Ghosh A.W. Generalized effective-mass approach for n-type metal-oxide-semiconductor field-effect transistors on arbitrarily oriented wafers // J. Appl. Phys. 2005. V. 97. N 5. P. 053702-1 – 12.

188. Wang J., Polizzi E., Lundstrom M.S. A three-dimensional quantum simulation of silicon nanowire transistors with the effective-mass approximation // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. N 4. P. 2192 – 2203.

189. Bescond M., Cavassilas N., Lannoo M. Effective-mass approach for n-type semiconductor nanowire MOSFETs arbitrarily oriented // *Nanotechnology*. 2007. V. 18. N 25. P. 255201-1 – 6.
190. Rogdakis K., Poli S., Bano E., Zekentes K., Pala M.G. Phonon- and surface-roughness-limited mobility of gate-all-around 3C-SiC and Si nanowire FETs // *Nanotechnology*. 2009. V. 20. N 29. P. 295202-1 – 6.
191. Nam Do V., Dollfus P. Oscillation of gate leakage current in double-gate metal-oxide-semiconductor field-effect transistors // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 101. N 7. P. 073709-1 – 6.
192. Datta D., Ganguly S., Dasgupta S. Low band-to-band tunnelling and gate tunnelling current in novel nanoscale double-gate architecture: simulations and investigation // *Nanotechnology*. 2007. V. 18. N 21. P. 215201-1 – 9.
193. Ravishankar R., Kathawala G., Ravaioli U., Hasan S., Lundstrom M. Comparison of Monte Carlo and NEGF simulations of double gate MOSFETs // *J. of Comput. Electron.* 2005. V. 4. P. 39 – 43.
194. Khan A.I., Ashraf Md.K., Haque A. Wave function penetration effects in double gate metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors: impact on ballistic drain current with device scaling // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 105. N 6. P. 064505-1 – 5.
195. Shao X., Yu Z. Nanoscale FinFET simulation: A quasi-3D quantum mechanical model using NEGF // *Solid-State Electron.* 2005. V. 49. P. 1435 –1445.
196. Takeda H., Mori N. Three-dimensional quantum transport simulation of ultra-small FinFETs // *J. of Comput. Electron.* 2005. V. 4. P. 31 – 34.
197. Cauley S., Jain J., Koh C.-K., Balakrishnan V. A scalable distributed method for quantum-scale device simulation // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 101. N 12. P. 123715-1 – 12.

198. Mamaluy D., Sabathil M., Vogl P. Efficient method for the calculation of ballistic quantum transport // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 93. N 8. P. 4628 – 4633.
199. Mamaluy D., Mannargudi A., Vasileska D. Electron density calculation using the contact block reduction method // *J. of Comput. Electron.* 2004. V. 3. P. 45 – 50.
200. Mamaluy D., Vasileska D., Sabathil M., Zibold V., Vogl P. Contact block reduction method for ballistic transport and carrier densities of open nanostructures // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. N 24. P. 245321-1 – 14.
201. Khan H.R., Mamaluy D., Vasileska D. Quantum transport simulation of experimentally fabricated nano-FinFET // *IEEE Trans. on Electron Devices.* 2007. V. 54. N 4. P. 784 – 796.
202. Khan H., Mamaluy D., Vasileska D. Self-consistent treatment of quantum transport in 10 nm FinFET using Contact Block Reduction (CBR) method // *J. Comput. Electron.* 2007. V. 6. P. 77 – 80.
203. Khan H., Mamaluy D., Vasileska D. Influence of interface roughness on quantum transport in nanoscale FinFET // *J. Vac. Sci. Technol. B.* 2007. V. 25. N 4. P. 1437 – 1440.
204. Mil'nikov G., Mori N., Kamakura Y., Ezaki T. R-matrix theory of quantum transport and recursive propagation method for device simulations // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 104. N 4. P. 044506-1 – 14.
205. Mil'nikov G., Mori N., Kamakura Y., Ezaki T. Dopant-induced intrinsic bistability in a biased nanowire // *Phys. Rev. Letters.* 2009. V. 102. N 3. P. 036801-1 – 4.
206. Mil'nikov G., Mori N., Kamakura Y. R-matrix method for quantum transport simulations in discrete systems // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 79. N 23. P. 235337-1 – 5.
207. Kienle D., Léonard F. Terahertz response of carbon nanotube transistors // *Phys. Rev. Letters.* 2009. V. 103. N 2. P. 026601-1 – 4.

208. Croitoru M.D., Gladilin V.N., Fomin V.M., Devreese J.T., Magnus W., Schoenmaker W., Sorée B. Quantum transport in a nanosize silicon-on-insulator metal-oxide-semiconductor field-effect transistor // J. Appl. Phys. 2003. V. 93. N 2. P. 1230 – 1240.

209. Frensley W.R. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium // Rev. of Modern Physics. 1990. V. 62. P. 745 – 791.

210. Croitoy M.D., Gladilin V.N., Fomin V.M., Devreese J.T., Magnus W., Schoenmaker W., Sorée B. Quantum transport in a nanosize double-gate metal-oxide-semiconductor field-effect transistor // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. N 4. P. 2305 – 2310.

211. Sverdlov V., Gehring A., Kosina H., Selberherr S. Quantum transport in ultra-scaled double-gate MOSFETs: A Wigner function-based Monte Carlo approach // Solid-State Electron. 2005. V. 49. P. 1510 – 1515.

212. Querlioz D., Saint-Martin J., Do V.-N., Bournel A., Dollfus P. Fully quantum self-consistent study of ultimate DG-MOSFETs including realistic scattering using a Wigner Monte-Carlo approach // IEEE Int. Electron Devices Meet. 2006. P. 941 – 944.

213. Патнер М., Патнер Д. Нанотехнология: простое объяснение очередной гениальной идеи. М.: Изд. дом "Вильямс". 2004. 240 с.

214. Silicon nanoelectronics / Ed. by S. Oda and D. Ferry. Boca Raton: Taylor & Francis. 2006. 304 p.

215. Haensch W., Nowak E.J., Dennard R.H., Solomon P.M., Bryant A., Dokumaci O.H., Kumar A., Wang X., Johnson J.B., Fischetti M.V. Silicon CMOS devices beyond scaling // IBM J. Res. and Develop. 2006. V. 50. N 4/5. P. 339 – 361.

216. Фейнман Р. Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир // Химия и жизнь – XXI век. 2002. № 12. С. 20 – 26.

Работы, помеченные *, приведены в Приложении.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Библиотека БГУИР

И.И. Абрамов

Термин "элемент" в микро- и наноэлектронике*

Рассматривается термин "элемент" интегральной схемы в области микро- и наноэлектроники.

В связи с интенсивным развитием нанонаук в настоящее время чрезвычайно актуальной становится задача формирования терминологии в самых различных ее областях. Это важно для развития науки и техники, в учебном процессе, а также для разработки соответствующих стандартов. Последние значительные работы в области нанонаук (см., например, [1]) свидетельствуют о важности такой терминологии, так как, к сожалению, нередко под одним и тем же термином разные специалисты подразумевают достаточно различающиеся понятия. Большая и плодотворная работа проведена рядом ученых, опубликовавших статьи в журнале "Нано- и микросистемная техника". Отмечу лишь следующие публикации журнала по формированию терминологии в области микро- и наносистемной техники [2 – 8]. В целом, работы в этом направлении продолжают лучшие традиции советских школ в области науки, техники и высшего образования, всегда уделявших серьезное внимание терминологии, ее чистоте.

В данной статье рассматривается один из терминов в области микро- и наноэлектроники – *элемент интегральной схемы*. Этот выбор не случаен. Во-первых, главным объектом разработки и исследования в области наноэлектроники, как и микроэлектроники, должна стать интегральная схема (ИС) или в более широком смысле – интегрированная информационная система. Качество таких высокоинтегрированных систем во многом определяется именно активным элементом. Во всяком

* Статья опубликована в журнале "Нано- и микросистемная техника", 2008, № 6, С. 2 – 4.

случае об этом свидетельствует вся история развития микроэлектроники. Во-вторых, мой опыт преподавания дисциплин: "Моделирование технологических процессов и элементов интегральных микросхем", "Системы автоматизированного проектирования интегральных микросхем", "Моделирование элементов и приборов микроэлектроники и наноэлектроники" (для магистрантов) подтверждает особую важность терминологии в учебном процессе. Без нее нормальный (качественный) учебный процесс фактически невозможен. Бесспорно важным в указанных дисциплинах является рассматриваемый термин. Замечу, что применительно к математическому моделированию элементов ИС необходимый спектр определений основных терминов был сформулирован в учебных пособиях [9,10]. В-третьих, дискуссии последних лет в литературе по поводу развития наноэлектроники требуют определиться с термином "элемент" и в этой области, так как от его понимания зависит многое (см., например, [11,12]).

Микроэлектроника

Проанализируем сначала ситуацию с термином "элемент интегральной микросхемы". Здесь казалось бы все более или менее ясно.

Обратимся к классике.

"Компоненты, которые входят в состав ИС и тем самым не могут быть выделены из нее в качестве самостоятельных изделий, называются *элементами ИС* или *интегральными элементами*. Они обладают некоторыми особенностями по сравнению с "обычными" транзисторами, резисторами и т.д., которые изготавливаются в виде конструктивно обособленных единиц и соединяются в схему путем пайки" [13]. Так определил Игорь Павлович Степаненко в своем классическом учебнике

термин "элемент ИС". Им были также выделены "... *активные* элементы типа транзисторов ..." и "... *пассивные элементы* (резисторы, конденсаторы и т.п.)".

Сделаю одно замечание. Коллеги и ученики И.П. Степаненко, подготавливая второе издание учебника [14], исключили всего лишь два подчеркнутых слова из определения Игоря Павловича с учетом прошедшего времени. Согласитесь, – неплохо.

Анализ других учебных пособий в области микроэлектроники приводит к выводу, что авторы либо просто избегают введения этого термина, либо делают незначительные правки по отношению к стандарту [15]:

"Элемент интегральной микросхемы – часть интегральной микросхемы, реализующая функцию какого-либо электрорадиоэлемента, которая выполнена нераздельно от кристалла или подложки и не может быть выделена как самостоятельное изделие с точки зрения требований к испытаниям, приемке, поставке и эксплуатации.

Примечание. Под электрорадиоэлементом понимают транзистор, диод, резистор, конденсатор и др."

Отмечу два недостатка приведенных определений. Во-первых, это некоторая расплывчатость формулировки, что, однако, является вполне естественным (оправданным) для развивающейся области науки и техники, которой является микроэлектроника (менее существенный недостаток). Во-вторых, в определениях отсутствует размерный фактор (наиболее существенный недостаток). Отмечу, что ни в одном термине стандарта [15] нет *явного* указания на размеры.

Так, в соответствии со стандартом [15]:

"Интегральная микросхема – микросхема, ряд элементов которой нераздельно выполнен и электрически соединен между собой таким образом, что с точки зрения технических

требований, испытаний, торговли и эксплуатации устройство рассматривается как целое.

Примечание. Под микросхемой понимают микроэлектронное устройство, рассматриваемое как единое изделие, имеющее высокую плотность расположения элементов и (или) компонентов, эквивалентных элементам обычной схемы".

Возникшая ситуация, впрочем, и понятна, так как в те времена о нанозлектронике речь не шла. Правда, замечу, что она не изменилась и в энциклопедиях* и энциклопедических словарях, например [16]:

"Интегральная схема (ИС, интегральная микросхема), микроминиатюрное электронное устройство, элементы которого неразрывно связаны конструктивно, технологически и электрически. Делятся на малые, средние, большие и сверхбольшие". Следовательно и здесь приставка "микро-" понимается в том же смысле, что и в словах: "микроскопический", "микроорганизм", т.е. от греческого "mikros" – "малый".

Таким образом, анализ показывает, что, хотя и имеются в целом удовлетворительные определения термина "элемент" интегральной схемы в микроэлектронике, наиболее существенный их недостаток – отсутствие явной привязки к пространственному размеру. Именно с этим можно во многом связать возникающие "жаркие" дискуссии специалистов и недоразумения в литературе по поводу нанозлектроники.

Нанозлектроника

Сложившаяся ситуация наиболее сложна именно для этой области, в которой мы фактически только начинаем по-

* Определения, приведенные в "Большой советской энциклопедии", "Физической энциклопедии", хотя и отличаются, однако, также обладают отмеченным недостатком.

серьезному работать, т.е. мы и здесь получаем "эстафету" от микроэлектроники.

Для того чтобы разобраться с этим попытаемся ответить на следующий важный вопрос: "Существуют ли нанозлектронные интегральные схемы?" Мой ответ – да! И здесь я мог бы просто сослаться на цикл моих статей [17]. Однако все же сделаю несколько комментариев.

Во-первых, я согласен с мнением академика Орликовского А.А. о том, что *"еще в 1999 году микроэлектроника стала нанозлектроникой, преодолев рубеж технологического разрешения 100 нм"* [11]. Замечу, что в такой постановке вопроса нет и намек на "революцию". Речь идет об "эволюции", т.е. плавном, "эстафетном" переходе к новому качеству. Во-вторых, даже если не согласиться с данным мнением, то нанозлектронные интегральные схемы на приборных структурах, в которых принципиально важны квантовые эффекты, также создаются еще с прошлого века [17]. Достаточно отметить, что в США изготовление ИС на резонансно-туннельных структурах находится в серийном производстве с конца 90-х годов. Действительно, поспорить можно, если не учитывать факты и во главу угла ставить *вопрос о принципиальной важности квантовых эффектов*. Но причем здесь они? Ведь *в микроэлектронике* мы никогда "не привязывались" к каким-либо физическим эффектам. Мы всегда неявно (приставка "микро-") и явно (первый закон Мура[•]) ориентировались на *пространственные размеры* (топологические нормы, минимальный топологический размер, минимальный размер области элемента: длина затвора, длина канала и т.п.). Почему в нанозлектронике надо менять "правила игры"? Автор не видит к этому веских оснований. Конечно,

[•] По аналогии с микроэлектроникой их можно было бы назвать интегральные наносхемы, но, как мне кажется, этого лучше не делать в свете изложенного выше.

^{**} В США, как известно, это вообще один из основных законов развития микроэлектроники страны.

когда размеры (длина канала L_k) кремниевых нанотранзисторов с МДП-структурой составят несколько длин волн де Бройля λ_B в кремнии ($\lambda_B(\text{Si}) \approx 12$ нм при $T=300\text{K}$) влияние квантовых эффектов на их электрические характеристики будет важно, но это произойдет при L_k около 20 нм. Здесь, по-видимому, и следует ожидать наиболее существенных, качественных изменений [17].

Исходя из принципа эволюционного развития, преобразования микроэлектроники в нанoeлектронику, сформулируем определение термина "элемент нанoeлектронной интегральной схемы", основываясь на приведенных ранее определениях и комментариях, а именно:

"Элемент нанoeлектронной интегральной схемы – это часть нанoeлектронной интегральной схемы, реализующая функцию какого-либо электрорадиоэлемента (транзистор, диод, резистор, конденсатор и др.) с характеристическими размерами в диапазоне от 1 до 100 нанометров, которая не может быть выделена как самостоятельное изделие.

Примечание. Под характеристическим размером могут пониматься минимальный топологический размер, размер активной области элемента, например, длина канала, и др."

Аналогичным образом может быть модернизирован термин интегральная схема в области нанoeлектроники. Думаю, что введение более «жестких» определений, по крайней мере, пока нецелесообразно. Время покажет.

Список литературы

1. Nanoscience. Nanotechnologies and Nanophysics / Eds. by C. Dupas, P. Houdy, M. Lahmani. Berlin–Heidelberg–New York: Springer–Verlag, 2007. 823 p.

2. Мальцев П.П., Кузин А.Ю., Телец В.А. О терминах в микросистемной технике // Микросистемная техника. 2002. №10. С. 35–37.
3. Алферов Ж.И., Асеев А.Л., Гапонов С.В., Копьев П.С., Панов В.И., Полторацкий Э.А., Сибельдин Н.Н., Сурис Р.А. Наноматериалы и нанотехнологии // Микросистемная техника. 2003. №8. С. 3–13.
4. Лучинин В.В. Введение в индустрию наносистем // Нано- и микросистемная техника. 2005. №5. С. 2–7;8.
5. Мальцев П.П. О терминологии в области микро- и наносистемной техники // Нано- и микросистемная техника. 2005. №9. С. 2–4;4,5.
6. Вернер В.Д. О терминологии в микросистемной технике // Нано- и микросистемная техника. 2005. №9. С. 6–7.
7. Иванов А.А., Мальцев П.П., Телец В.А. О направлениях развития микросистемной техники // Нано- и микросистемная техника. 2006. №1. С.2–12.
8. Вернер В.Д., Иванов А.А., Коломенская Н.Г., Лучинин В.В., Мальцев П.П., Попов И.В., Сауров А.Н., Телец В.А. Изделия микросистемной техники – основные понятия и термины // Нано- и микросистемная техника. 2007. №12. С. 2–5.
9. Абрамов И.И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем": Учеб. пособие. Мн.: БГУ, 1999. 92 с.
10. Абрамов И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва–Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
11. Наноэлектроника, квантовые компьютеры и электронная отрасль России. Рассказывает директор ФТИАН академик А.А. Орликовский // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. 2007. №5. С. 4–10.

12. Носов Ю., Сметанов А. На пути в наноэлектронику. Исторические параллели и сопоставления // *Электроника: Наука, Технология, Бизнес*. 2007. №5. С. 11–16.
13. Степаненко И.П. Основы микроэлектроники: Учеб. пособие. М.: Сов. радио, 1980. 424 с.
14. Степаненко И.П. Основы микроэлектроники: Учеб. пособие. 2-е издание. М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2004. 488 с.
15. ГОСТ 17021–88 (СТ СЭВ 1623–79). Микросхемы интегральные. Термины и определения. М.: Издательство стандартов, 1988. 11 с.
16. Большой энциклопедический словарь. М.: ООО "Издательство АСТ"; ООО "Издательство Астрель", 2003. 1247 с.
17. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники // *Нано- и микросистемная техника*. 2006, ч.1, №8, С.34–37; ч.II, №9, С. 26–36; 2007, ч.III, №1, С. 36–47; ч.IV, №2, С. 24–32; ч.V, №3, С. 57–70; ч.VI, №7, С.10–24; №12, С.73.

И.И. Абрамов

Методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем полупроводниковых приборов и структур*

Предложена методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур. Она основывается на трех подходах к синтезу моделей в рамках физики открытых систем. Рассмотрен ряд примеров ее применимости для построения эквивалентных схем приборов на кремнии.

Введение

Современные сверхбольшие (СБИС) и ультрабольшие (УБИС) интегральные схемы (ИС) микроэлектроники являются чрезвычайно сложными высокоинтегрированными полупроводниковыми структурами. Ожидается, что степень интеграции схем нанoeлектроники будет еще выше (по крайней мере на несколько порядков) и составит $10^9 - 10^{12}$ элементов на кристалле [1]. Учитывая возможный уровень интеграции, речь по сути дела идет о создании качественно новых искусственных интеллектуальных систем, по многим показателям сравнимых и даже превосходящих мозг человека, но на твердом теле. Сверхсложной важной задачей будет исследование физических процессов в таких твердотельных структурах, поэтому их разработка невозможна без соответствующих систем моделирования. Создание же систем, по-видимому, станет одной из ключевых проблем нанoeлектроники [1].

* Статья опубликована в журнале "Микросистемная техника", 2002, № 6, С. 18 – 23.

Анализ методов разработки и проектирования СБИС и УБИС показывает, что эти методы основываются на иерархическом подходе к рассмотрению схем с привлечением принципа декомпозиции [2, 3]. В целом подход неплохо согласуется с основными положениями физики открытых систем [4 – 6]. Однако очевидно, что современная схема рассмотрения СБИС и УБИС еще далека от совершенства. Один из ее главных недостатков – возможность неучета ряда принципиально важных коллективных эффектов, многочисленные примеры которых приведены в монографии [7]. Обычно они называются "паразитными эффектами". В то же время с уменьшением размеров элементов и увеличением степени интеграции важность таких специфических коллективных эффектов будет все более возрастать, и как их идентифицировать в общем случае неясно.

По изложенным причинам необходимы эффективные подходы, позволяющие моделировать физические процессы в достаточно сложных полупроводниковых структурах как едином целом без существенных упрощений, а следовательно, без потери точности и адекватности. Один из таких подходов предложен и реализован на основе численных диффузионно-дрейфовых моделей для СБИС и УБИС на кремнии [8]. Однако, к сожалению, анализ возможен лишь для не очень сложных фрагментов ИС, включающих несколько элементов и содержащих до нескольких десятков p - n -переходов в одном из трех измерений. Подход требует больших затрат вычислительных ресурсов ЭВМ. Кроме того, проблемы возникают при обработке информации для перехода на следующий иерархический уровень моделирования, в частности, схемотехнический. Анализ же СБИС и УБИС полностью на уровне численных диффузионно-дрейфовых моделей, к сожалению, невозможен на современных ЭВМ.

Цель данной статьи – описание методологии автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур. С помощью таких эквивалентных схем учитываются принципиально важные коллективные эффекты.

Методология

Анализ известных моделей полупроводниковых приборов и элементов ИС физического типа позволил выделить три подхода к их синтезу [8, 9], в основе которых лежат: первого – физические допущения с огрублениями по пространству, времени и в результате статистического усреднения; второго – использование различных модельных зависимостей для параметров моделей; третьего – аппроксимации о характере поведения искомым функций. Первый подход является наиболее кардинальным и лежит в основе построения иерархии уравнений статистической физики открытых систем [5]. В работе [10] было показано, что в сочетании с двумя другими подходами он приводит к синтезу практически всех известных моделей элементов кремниевых ИС физического типа, т. е. не формальных.

Предлагаемая методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем произвольных полупроводниковых приборов и структур также базируется на указанных трех подходах. Она состоит из следующих основных этапов: 1) выбор исходных уравнений; 2) редукция к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), имеющих схемную интерпретацию; 3) процесс синтеза эквивалентной схемы на грубой сетке, покрывающей структуру; 4) процесс идентификации параметров аналитических моделей элементов эквивалентной схемы.

Рассмотрим каждый из этапов. На первом этапе осуществляется выбор исходной степени детализации описания процессов переноса в исследуемой полупроводниковой структуре, т. е. по существу применяется первый подход к синтезу моделей. Для этих целей может, в частности, использоваться одна из систем уравнений иерархии классов моделей, отмеченных в [8, 9], например, гидродинамические модели. В общем случае это может быть одна из систем уравнений иерархии соответствующих уравнений статистической физики открытых систем [5]. Так, достаточно строгая модель СБИС, УБИС, а также нанoeлектронных структур включает уравнение Лиувилля – фон Неймана для матрицы плотности совместно с уравнениями Лоренца для микрополей. К счастью, в большинстве практически важных случаев такая исходная степень детализации не нужна, например, для кремниевых СБИС и УБИС, как правило, достаточно использовать уравнения диффузионно-дрейфовой модели. Данный случай рассмотрен в следующей части статьи. Для нанoeлектронных структур, однако, необходимо использовать на первом этапе один из известных квантово-механических формализмов, например, отмеченный для матрицы плотности.

На втором этапе осуществляется редукция выбранной исходной системы уравнений к системе ОДУ, имеющей схемную интерпретацию. Для этих целей должны использоваться второй и третий подходы к синтезу моделей. Рассмотрим достаточно общий случай, когда исходной является система дифференциальных уравнений в частных производных. В данном случае при редукции необходимо использовать интегро-интерполяционный подход Тихонова – Самарского [11] при аппроксимации по пространству в рамках методов конечных разностей или конечных элементов. Именно при аппроксимации интегралов по пространству необходимо использовать второй и третий подходы к синтезу моделей. В результате может быть

получена система ОДУ на сетке пространственной дискретизации, имеющая схемную интерпретацию.

На третьем этапе осуществляется синтез вида эквивалентной схемы приборной структуры. В частности, определяются вид компактной эквивалентной схемы всей структуры и аналитические модели ее элементов для каждой ячейки сетки пространственной дискретизации. С этой целью синтез осуществляется на грубой сетке, покрывающей полупроводниковую структуру. При аппроксимации производных по времени в системе в общем случае нелинейных ОДУ целесообразно использование А-устойчивых методов [12]. При решении системы нелинейных алгебраических уравнений в дальнейшем применяются итерационные численные методы.

Ключевой вопрос на втором и третьем этапах – вопрос об устойчивости разностной схемы, аппроксимирующей исходную модель, выбранную на первом этапе. В противном случае не может быть синтезирована компактная эквивалентная схема приборной структуры, т. е. получено решение разностной схемы на грубой сетке дискретизации как по пространству, так и по времени. Сохранение разностной схемой устойчивости означает, что она отражает основные физические свойства, характерные для исследуемой приборной структуры в соответствующих режимах функционирования, включая отмеченные коллективные эффекты. Вопрос о точности модели хотя и важен, но здесь не имеет принципиального значения, так как во многом связан с процессом идентификации ее параметров.

На четвертом этапе осуществляется процесс идентификации параметров аналитических моделей элементов компактной эквивалентной схемы, синтезированной после выполнения второго и третьего этапов. Для этих целей могут использоваться две различные процедуры: 1) оптимизационные методы при идентификации параметров по экспериментальным данным [10], например по выходным характеристикам полупроводниковой

структуры; 2) на основе сравнения с результатами расчета по более точным моделям, например по модели, синтезированной на более мелкой сетке дискретизации.

Вопросами, связанными с отмеченным ключевым вопросом и наиболее важными в данной методологии, являются: вопрос о степени детализации на первом этапе; используемые аппроксимации в рамках второго и третьего подходов к синтезу моделей. Заметим, что первая проблема хорошо известна из статистической теории макроскопических открытых систем и связана с выбором характерных масштабов, так как он, к сожалению, не может быть универсальным [5].

Рассмотрим как могут решаться отмеченные вопросы для приборных структур на кремнии, включая фрагменты СБИС и УБИС.

Примеры

В настоящее время показано [8], что диффузионно-дрейфовые модели обеспечивают приемлемую адекватность и точность моделирования приборов и структур на кремнии с характерными размерами активных областей, по крайней мере, более 100 нм. Такой диапазон характерен и для элементов современных СБИС и УБИС. В связи с этим на первом этапе методологии выбираем основные уравнения диффузионно-дрейфовой модели [13]:

$$q \frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \bar{J}_p - qR; \quad (1)$$

$$q \frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \bar{J}_n - qR; \quad (2)$$

$$\bar{J}_T = \bar{J}_p + \bar{J}_n - \varepsilon \frac{\partial \nabla \varphi}{\partial t}; \quad (3)$$

$$\vec{J}_p = -q\mu_p p \nabla \phi^p; \quad (4)$$

$$\vec{J}_n = -q\mu_n n \nabla \phi^n; \quad (5)$$

$$\nabla \varepsilon \nabla \varphi = -q(p - n + N_d^+ - N_a^-), \quad (6)$$

с дополнительными соотношениями

$$n = n_{i0} \exp[(\varphi - \phi^n)/\varphi_T], \quad p = n_{i0} \exp[(\phi^p - \varphi)/\varphi_T]. \quad (7)$$

Здесь n , p – концентрации подвижных электронов и дырок соответственно; t – время; \vec{J}_T , \vec{J}_n , \vec{J}_p – векторы полной, электронной и дырочной плотностей токов; q – заряд электронов; R – превышение скорости рекомбинации над скоростью генерации; ε – диэлектрическая проницаемость материала; φ – электростатический потенциал; N_d^+ , N_a^- – концентрации ионизированных доноров и акцепторов; μ_n , μ_p – подвижности электронов и дырок; φ_T – температурный потенциал, равный $k_B T / q$; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; n_{i0} – собственная концентрация; ϕ^n , ϕ^p – квазипотенциалы Ферми электронов и дырок.

Для простоты рассмотрим одномерный случай без учета эффектов сильного легирования. Иллюстрация применимости методологии в многомерном случае с учетом эффектов сильного легирования затруднений не вызывает.

На втором этапе методологии осуществляется редукция (1) – (6) к системе ОДУ, имеющей схемную интерпретацию. Для конечно-разностной аппроксимации основных уравнений используем интегро-интерполяционный подход Тихонова – Самарского [11], в частности, метод интегрального тождества Марчука [14] или метод интегрирования на ячейке [15]. В

результате для элементарного объема $\Delta V_k = \Delta x_k A$ (A – площадь поперечного сечения структуры) для области сетки рис. 1 получается следующая аппроксимация уравнения Пуассона:

$$Q_{k+1/2}^c - Q_{k-1/2}^c = Q_k^n - Q_k^d - Q_k^p + Q_k^a, \quad (8)$$

где заряды и емкости задаются соотношениями

$$Q_{k+1/2}^c = C_{k+1/2}(\varphi_{k+1} - \varphi_k);$$

$$Q_{k-1/2}^c = C_{k-1/2}(\varphi_k - \varphi_{k-1});$$

$$C_{k+1/2} = \frac{A}{\int_{x_k}^{x_{k+1}} \varepsilon^{-1} dx}; \quad C_{k-1/2} = \frac{A}{\int_{x_{k-1}}^{x_k} \varepsilon^{-1} dx};$$

$$Q_k^d = q A \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} N_d^+ dx; \quad Q_k^a = q A \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} N_a^- dx;$$

$$Q_k^n = q A n_{i0} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \exp[(\varphi - \varphi^n)/\varphi_T] dx;$$

$$Q_k^p = q A n_{i0} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \exp[(\varphi^p - \varphi)/\varphi_T] dx.$$

Уравнение (8) – закон сохранения заряда для объема ΔV_k .

Дифференцируя по времени и учитывая, что

$\partial N_d^+ / \partial t = \partial N_a^- / \partial t = 0$, получаем

$$\frac{dQ_{k+1/2}^c}{dt} - \frac{dQ_{k-1/2}^c}{dt} = \frac{dQ_k^n}{dt} - \frac{dQ_k^p}{dt}. \quad (9)$$

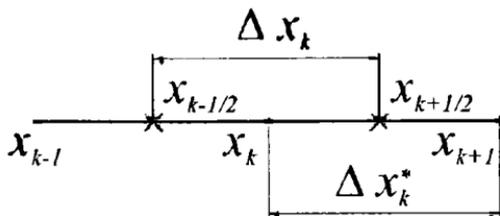


Рис.1. Область сетки пространственной дискретизации в одномерном случае

Для уравнения непрерывности электронов (2) выводим следующую аппроксимацию:

$$\frac{dQ_k^n}{dt} = I_{k+1/2}^n - I_{k-1/2}^n - I_k^R. \quad (10)$$

где токи $I_{k-1/2}^n$, I_k^R выражаются с помощью формулы

$$I_{k-1/2}^n = qn_{i0}\varphi_T A \frac{\exp(-\phi^n / \varphi_T)_k - \exp(-\phi^n / \varphi_T)_{k-1}}{\int_{x_{k-1}}^{x_k} \mu_n^{-1} \exp(-\phi / \varphi_T) dx}, \quad (11)$$

$$I_k^R = qA \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} R dx. \quad (12)$$

Аналогичная аппроксимация получается для уравнения непрерывности дырок (1), а именно:

$$\frac{dQ_k^p}{dt} = -I_{k+1/2}^p + I_{k-1/2}^p - I_k^R, \quad (13)$$

где $I_{k-1/2}^p$ имеет вид

$$I_{k-1/2}^P = -qn_{i0}\varphi_T A \frac{\exp(\phi^P/\varphi_T)_k - \exp(\phi^P/\varphi_T)_{k-1}}{\int_{x_{k-1}}^{x_k} \mu_p^{-1} \exp(\phi/\varphi_T) dx}$$

Таким образом, после данных преобразований необходимо решать другую систему уравнений, которая имеет простую схемную интерпретацию.

Эквивалентная схема для случая большого сигнала для элемента объема получается из уравнений (8), (10) и (13), и ее вид приведен в [16]. Для случая малого сигнала эквивалентная схема показана на рис. 2.

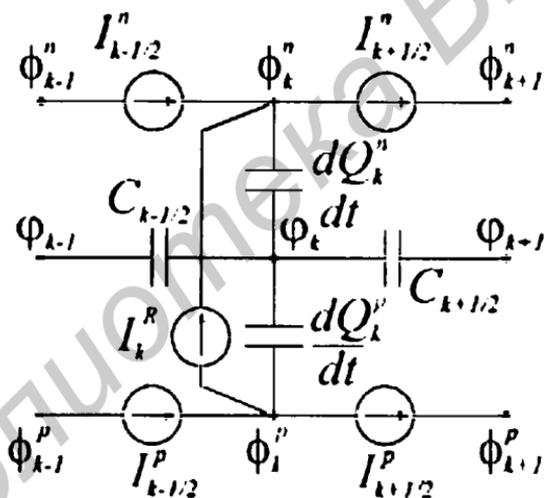


Рис.2. Малосигнальная эквивалентная схема

В этом случае уравнения (9), (10) и (13) могут рассматриваться как уравнения Кирхгофа для данной схемы. Здесь сразу же отметим принципиальное отличие от подходов [17, 18] на описываемом этапе. В них применяется локальная конечно-разностная аппроксимация основных уравнений. В предлагаемой методологии используется интегральная формулировка, что позволяет более плодотворно применять второй и третий подходы к синтезу моделей, и в конечном итоге получить компактные эквивалентные схемы *полупроводниковых* структур на грубых сетках пространственной дискретизации, т. е. добиться большей устойчивости разностной схемы.

Рассмотрим, как выводятся аналитические выражения для элементов схемы рис. 2. Во-первых, для иллюстрации этого достаточно рассмотреть аппроксимации интегралов:

$$J_1^n = \int_{x_k}^{x_{k+1/2}} \exp[(\varphi - \varphi^n)/\varphi_T] dx; \quad (14)$$

$$J^\varphi = \int_{x_k}^{x_{k+1}} \mu_n^{-1} \exp(-\varphi/\varphi_T) dx; \quad (15)$$

$$J^R = \int_{x_k}^{x_{k+1/2}} R dx. \quad (16)$$

Отметим, что интегралы от N_d^+ , N_d^- , ε могут быть вычислены достаточно точно, например с использованием более мелкой сетки $\{x_i\}$, так как эти функции известны.

Во-вторых, для аппроксимации интегралов (14) – (16) и других, входящих в (9), (10) и (13), на каждой области сетки рис. 1 должна привлекаться иерархия различных физических предположений [8, 16]. Так, используя только три предположения о постоянстве концентрации электронов и

рекомбинации на $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$, а также линейности изменения электростатического потенциала на $[x_k, x_{k+1}]$, получим следующие аналитические модели для интегралов:

1) когда $|\varphi_k - \varphi_{k+1}| \leq \varepsilon^\varphi$,

$$J^\varphi = \mu_n^{-1} \Delta x_k^* \exp(-\varphi_k / \varphi_T); \quad (17)$$

2) когда $|\varphi_k - \varphi_{k+1}| > \varepsilon^\varphi$,

$$J^\varphi = -\frac{\bar{\mu}_n^{-1} \varphi_T \Delta x_k^* [\exp(-\varphi_k / \varphi_T)_{k+1} - \exp(-\varphi_k / \varphi_T)_k]}{\varphi_{k+1} - \varphi_k}; \quad (18)$$

$$3) J_1^n = 0,5 \Delta x_k^* \exp[(\varphi_k - \phi_k^n) / \varphi_T]; \quad (19)$$

$$4) J^R = 0,5 \Delta x_k^* R_k, \quad (20)$$

где $\bar{\mu}_n$ – среднее значение подвижности на $[x_k, x_{k+1}]$ ($\bar{\mu}_n = (\mu_{nk} + \mu_{nk+1})/2$); ε^φ – параметр автоматического синтеза. Аппроксимация (17) является локальной конечно-разностной аппроксимацией, которая приводит к построению неустойчивых разностных схем на грубой сетке пространственной дискретизации [8]. Именно поэтому известные подходы [17, 18] не могут использоваться для построения компактных эквивалентных схем полупроводниковых структур. Модель (18) является более общей и соответствует аппроксимации Шарфеттера – Гуммеля [19], которая характеризуется требуемой устойчивостью на грубых сетках пространственной дискретизации [8]. Таким образом, получаются аналитические модели для интегралов и следовательно, набор моделей для элементов схемы каждой ячейки сетки пространственной дискретизации. Видно, что при выводе выражений (17) – (20) использовались второй и третий подходы к синтезу моделей.

На третьем этапе на грубой сетке $\{x_k\}$ в результате решения системы ОДУ, которая включает (8), (10), (13) для случая большого сигнала [(9), (10), (13) – для малого сигнала], синтезируется вид компактной эквивалентной схемы всего прибора, при этом устанавливаются и соответствующие аналитические модели ее элементов. Например, если в результате решения $|\varphi_k - \varphi_{k+1}| \leq \varepsilon^{\varphi}$, то используется модель (17) для J^{φ} и соответствующая модель элемента схемы. С целью применения и большого временного шага целесообразно использовать при аппроксимации по времени неявный метод Эйлера, характеризующийся максимальной устойчивостью. Заметим, что, вообще говоря, на каждом временном слое может быть синтезирована своя компактная эквивалентная схема, если осуществляется оценка ошибки усечения и перераспределение узлов сетки пространственной дискретизации. Для решения систем нелинейных алгебраических уравнений, возникающих на каждом временном шаге, целесообразно использование итерационных численных методов, в общем случае многоступенчатых [8].

На четвертом этапе идентификации параметров возможно применение двух отмеченных ранее процедур. Так, в случае расчета на более мелкой сетке как по времени, так и по пространству $\{x_m\}$ определяются коэффициенты в моделях элементов. Например, в моделях интегралов (17) – (20) – это коэффициенты, явно не зависящие от основных переменных, т.е. φ, φ^n .

Важными частными случаями в рамках предложенной методологии являются эквивалентные схемы физических процессов полупроводниковых приборов [17, 18]. Они соответствуют случаю, когда $\varepsilon^{\varphi} \rightarrow \infty$ (используются только аппроксимации вида (17)); мелкая сетка $\{x_m\}$ применяется на третьем этапе, а четвертый этап не проводится. В результате

компактная эквивалентная схема не может быть синтезирована, так как требуется более 80 ячеек на один $p-n$ -переход [20]. В то же время с помощью описанной методологии возможен и синтез компактных эквивалентных схем на сетках с числом узлов, меньшим десяти. Так, известная модель Гуммеля [21] для биполярного транзистора автоматически синтезируется всего лишь на одной ячейке сетки пространственной дискретизации в стационарном случае [16]. Недавно был предложен эффективный метод экстракции малосигнальных эквивалентных схем из результатов численного моделирования полупроводниковых приборов [22], и он также может интерпретироваться как частный случай предложенной методологии. Так, в методе, приведенном в [22], значительно упрощены этапы 2 и 3. Метод с успехом применялся для генерации компактных малосигнальных эквивалентных схем диода, $n-p-n$ биполярного транзистора и $n-p-n$ фототранзистора.

Разработанная методология применима и при необходимости учета тепловых эффектов. В данном случае аналоги уравнений Пуассона (8), непрерывности электронов (10) и дырок (13) дополняются, например, аналогом уравнения теплопроводности [23].

Заключение

Предложена методология автоматического синтеза компактных эквивалентных схем практически произвольных полупроводниковых приборов и структур, состоящая из четырех этапов. Методология основывается на трех выделенных подходах к синтезу моделей в рамках физики открытых систем. Рассмотрен ряд примеров применимости методологии для синтеза эквивалентных схем кремниевых приборов и структур. Показано, что важным компонентом для автоматического синтеза компактных эквивалентных схем является использование свойства устойчивости разностных схем,

аппроксимирующих исходные уравнения, которые описывают с достаточной степенью адекватности и точности физические процессы в исследуемых структурах. Значительный интерес представляет иллюстрация применимости методологии для синтеза эквивалентных схем нанозлектронных приборов и структур. Наиболее сложным вопросом здесь будет являться выбор аппроксимаций для построения устойчивых разностных схем на грубых сетках пространственной дискретизации. Ситуация здесь, к сожалению, далека от достигнутой для кремниевых приборов и структур [8], и будет являться предметом для дальнейших исследований.

Автор считает своим приятным долгом выразить признательность проф. Serge Luryi* и проф. Andrea Paccelli за любезно предоставленные отписки своих работ в обмен на отписки моих работ [16, 23].

Список литературы

1. Averin D. V., Likharev K. K. Possible application of the single charge tunneling. In: Single Charge Tunneling: Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures, ed. by H. Grabert, M. H. Devoret [NATO ASI Series B: Physics (N. Y., Plenum, 1992) v. 294]. P. 311 – 332.
2. Крон Г. Исследование сложных систем по частям (диакоптика). М.: Наука, 1972. 544 с.
3. Казеннов Г. Г., Соколов А. Г. Принципы и методология построения САПР БИС. М.: Высшая школа, 1990. 142 с.
4. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 512 с.

* До эмиграции Serge Luryi проживал в СССР.

5. Климонтович Ю. Л. Критерии относительной степени упорядоченности открытых систем // УФН, 1996, 166 (11). С. 1231 – 1243.
6. Хакен Г. Синергетика: Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985. 423 с.
7. Ферри Д., Эйкерс Л., Гринич Э. Электроника ультрабольших интегральных схем. М.: Мир, 1991. 327 с.
8. Абрамов И. И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Минск: БГУ, 1999. 189 с.
9. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Проблемы моделирования элементов кремниевых интегральных схем // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника, 1991, вып. 5. С. 3 – 9.
10. Абрамов И. И. Курс лекций "Моделирование элементов интегральных схем". Минск БГУ, 1999. 92 с.
11. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
12. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла, Дж. Уатта. М.: Мир, 1979. 312 с.
13. Van Roosbroeck W. Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors // Bell System Techn. J., 1950. 29. P. 560 – 607.
14. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977. 456 с.
15. Varga R. S. Matrix Iterative Analysis. Prentice – Hall, Englewood Cliffs, 1962. 505 p.
16. Абрамов И. И. Метод синтеза эквивалентных схем полупроводниковых приборов и структур // Известия вузов СССР. Радиоэлектроника, 1985, 28 (11). С. 63 – 69.

17. Sah C.-T. The equivalent circuit model in solid-state electronics // Proc. IEEE, 1967, 55 (5). P. 654 – 684.
18. Ohtsuki T., Kani K. A unified modeling scheme for semiconductor devices with applications of state-variable analysis // IEEE Trans., 1970. CT-17 (1). P. 26 – 32.
19. Scharfetter D. L., Gummel H. K. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator // IEEE Trans., 1969. ED-16 (1). P. 64 – 77.
20. Maes H. E., Sah C. T. Application of the equivalent circuit model for semiconductors to the study of Au-doped p-n junctions under forward bias // IEEE Trans., 1976. ED-23 (10). P. 1131 – 1143.
21. Gummel H. K. A charge control relation for bipolar transistors // Bell System Techn. J., 1970. 49(1). P. 115 – 120.
22. Pacelli A., Mastrapasqua M., Luryi S. Generation of equivalent circuits from physics-based device simulation // IEEE Trans., 2000, CAD-19 (11). P. 1241 – 1250.
23. Абрамов И. И., Харитонов В. В. Метод автоматического синтеза эквивалентных схем полупроводниковых приборов с учетом тепловых эффектов // Вестні АН БССР. Сер. фіз.-енерг. наук, 1987, 3. С. 78 – 84.