

MÔ PHỎNG TRANSISTOR MỘT ĐIỆN TỬ TRONG MÔ HÌNH NHIỀU MỨC SỬ DỤNG PHƯƠNG PHÁP HÀM GREEN KHÔNG CÂN BẰNG

SIMULATION OF SINGLE ELECTRON TRANSISTOR IN MULTI-LEVEL MODE USING NON-EQUILIBRIUM GREEN FUNCTION METHOD

**Huỳnh Hoàng Trung,
Lê Hoàng Minh.**
ĐH Sư phạm Kỹ thuật TP. HCM

Đinh Sỹ Hiền .
ĐH Khoa học Tự nhiên, ĐHQG TP. HCM

TÓM TẮT

Transistor một điện tử (SET) là một yếu tố quan trọng trong lĩnh vực nghiên cứu của chúng tôi, hoạt động của linh kiện dựa trên sự vận chuyển từng điện tử một qua kênh dẫn sử dụng hiệu ứng khóa Coulomb. Trong bài báo này, chúng tôi cung cấp một cái nhìn tổng quan về những phát triển trong nghiên cứu của SET. Chúng tôi sử dụng phương pháp hàm Green không cân bằng (NEGF) để tính toán hàm truyền, dao động Coulomb và những đặc trưng dòng-thế của SET. Chương trình mô phỏng được viết nhờ giao diện đồ họa người sử dụng (GUI) trong MatLab. Những ảnh hưởng của điện dung, thiên áp và nhiệt độ lên những đặc trưng dòng-thế của SET cũng được trình bày.

ABSTRACT

Single electron transistor (SET) is a key element in our research field where device operation is based on one-by-one electron through the channel utilizing the Coulomb blockade effect. In this paper, we provide an overview of research developments of SET. This is achieved in this model by using Non-Equilibrium Green Function (NEGF) method to compute transport function, Coulomb oscillation, and ultimately the current-voltage characteristics. The simulation program is written by using graphic user guide (GUI) in MatLab. The effects of capacitance, bias, and temperature on current-voltage characteristics of SET are also presented.

1. GIỚI THIỆU

Công nghệ COMS là công nghệ chính của công nghiệp chế tạo vi mạch (IC). Ngày nay, khoảng 95% IC được chế tạo dựa trên công nghệ CMOS. Kích thước của MOSFET trong IC là 32nm vào năm 2009, và theo dự báo kích thước MOSFET giảm tới giới hạn vật lý của nó là 10nm vào năm 2013. Những ứng cử viên thay thế MOSFET trong tương lai có thể là: Transistor đường hầm cộng hưởng (Resonant Tunneling Transistor, RTT), Transistor trường ống nano carbon (Carbon NanoTube Filed Effect Transistor, CNTFET), Transistor nguyên tử (Single Atom Transistor), Transistor một điện tử (Single Electron Transistor, SET), ... Những

transistor SET thu hút sự chú ý của cộng đồng nghiên cứu gần đây do chúng có thể chế tạo bằng công nghệ CMOS, tốc độ cao, kích thước nano và công suất tiêu thụ thấp và đặc biệt hơn là hoạt động của SET dựa trên sự vận chuyển từng điện tử một qua kênh dẫn sử dụng hiệu ứng dao động Coulomb và khóa Coulomb.

Gần đây, nhiều nhóm nghiên cứu đạt được thành công nhất định trong việc theo đuổi xây dựng mô hình và mô phỏng cho SET [1, 2] như những mô phỏng Monte Carlo SIMON [3], MOSES [4], KOSEC [5] và phương pháp phương trình chính (Master Equation-ME) [6]. Hơn thế,

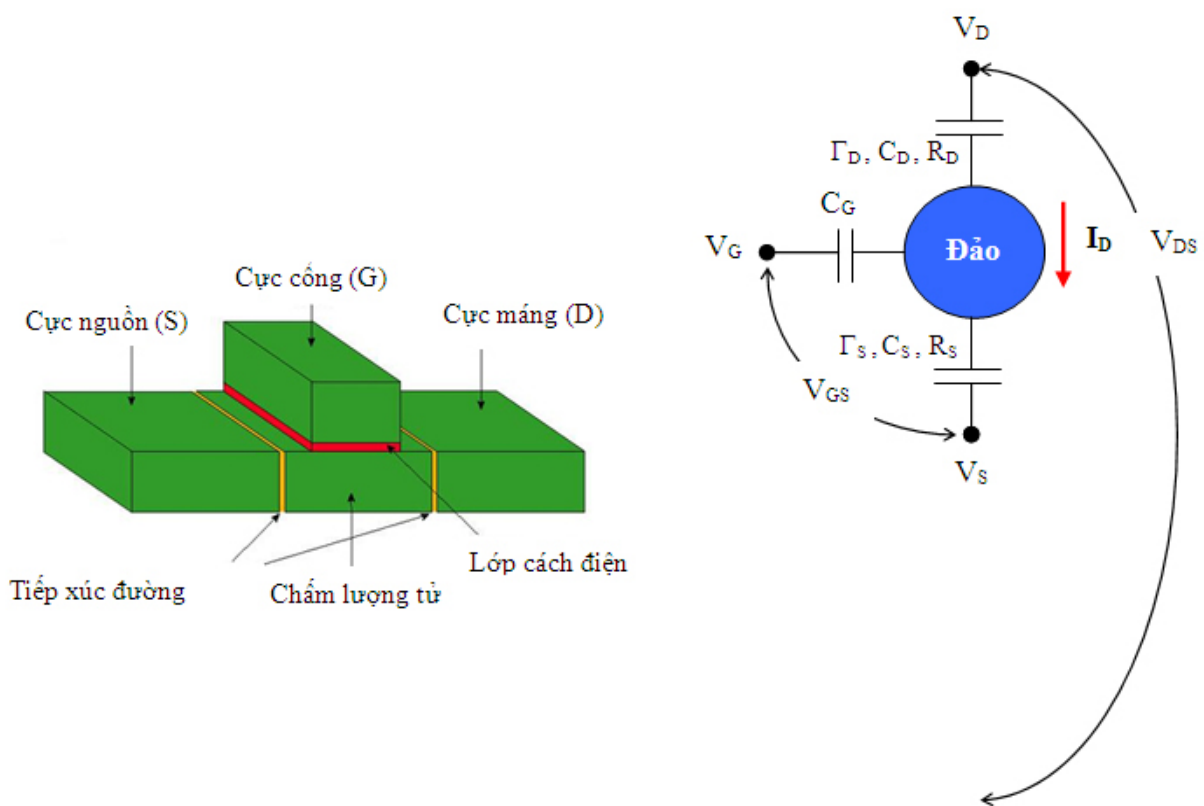
trong nghiên cứu này chúng tôi sử dụng phương pháp hàm Green không cân bằng (NEGF) [7] để tính toán hàm truyền, dao động Coulomb, hiệu ứng khóa Coulomb và những đặc trưng dòng-thế của SET. Chương trình mô phỏng được viết nhờ giao diện đồ họa người sử dụng (GUI) trong MatLab. Những ảnh hưởng của điện dung, thiên áp và nhiệt độ lên những đặc trưng dòng-thế của SET cũng được trình bày.

2. CẤU TRÚC CỦA SET

SET là linh kiện chuyển mạch ba cực, có thể truyền điện tử từ cực nguồn đến cực máng từng

điện tử một.

Cấu tạo của SET gồm có chấm lượng tử kích thước thang nanomet bị bao quanh bởi ba cực: cực cổng (G), cực nguồn (S) và cực máng (D). Trong đó cực nguồn và cực máng được ghép với chấm lượng tử thông qua tiếp xúc đường hầm. Cực cổng ghép với chấm lượng tử thông qua lớp cách điện ngăn không cho điện tử đi vào chấm lượng tử bằng xuyên hầm lượng tử. Do đó, điện tử chỉ có thể đi vào chấm lượng tử qua lớp tiếp xúc đường hầm.



Hình 1. Cấu trúc và mạch tương đương của SET.

3. PHƯƠNG PHÁP NEGF

Thuật toán hàm Green không cân bằng (Non-Equilibrium Green Function, NEGF) được Supriyo Datta đưa ra vào năm 2000 và được nhiều tác giả sử dụng để tính dòng truyền qua các linh kiện điện tử có kích thước nano [2]. Thuật toán hàm NEGF ứng dụng giải phương trình Schrödinger-Poisson và kết hợp tính xác suất truyền của điện tử. Trong thuật toán, sự “không cân bằng” thể hiện độ chênh lệch về năng lượng

giữa hai mức Fermi ở hai tiếp xúc cực nguồn S và cực máng D. Nhờ hiện tượng không cân bằng này mà các điện tử di chuyển qua kênh dẫn. Việc giải phương trình Schrödinger một chiều và kết hợp giải phương trình Poisson cho phép tìm được thế cho SET. Phương pháp NEGF có mối liên hệ với phương pháp Landauer và năng lượng cho sự vận chuyển điện tử qua kênh đối với những linh kiện điện tử kích thước nano đã

được chứng minh.

Chúng tôi xây dựng mô hình SET với chấm nhiều mức năng lượng lượng tử được mô tả bằng ma trận toán tử Hamilton $[H]$ và hiệu ứng của sự ghép nối chấm lượng tử đến những tiếp xúc được tính toán chính xác bởi những ma trận self-energy $[\Sigma_1(E)]$ và $[\Sigma_2(E)]$. Những ma trận self-energy có kích thước bằng kích thước của ma trận toán tử Hamilton của chấm lượng tử (hình 2).

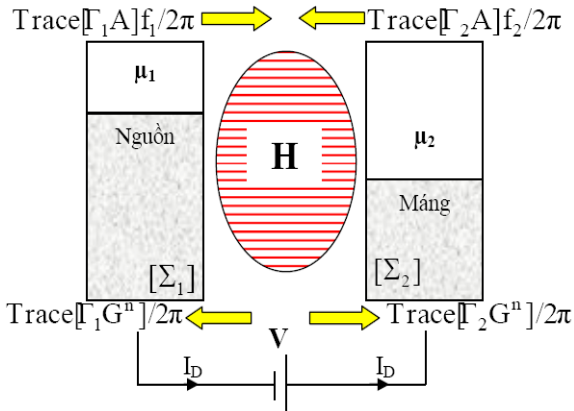
Hàm phân bố ứng với mức Fermi được xây dựng tại những tiếp xúc cực nguồn và cực máng:

$$f_1(E) \equiv f_0(E - \mu_1) = \frac{1}{\exp[(E - \mu_1)/k_B T] + 1} \quad (1)$$

$$f_2(E) \equiv f_0(E - \mu_2) = \frac{1}{\exp[(E - \mu_2)/k_B T] + 1} \quad (2)$$

bởi điện thế áp V : $\mu_1 - \mu_2 = qV$.

Trong đó, E - năng lượng, k_B - hằng số Boltzmann và T - nhiệt độ.



Hình 2. Mô hình SET với chấm lượng tử nhiều mức năng lượng được mô tả bằng ma trận toán tử Hamilton $[H]$, ma trận self-energy $[\Sigma_1(E)]$, $[\Sigma_2(E)]$ mô tả sự ghép nối đến tiếp xúc cực nguồn và cực máng.

Hàm ma trận mật độ điện tử được cho bởi:

$$\rho = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} [A_1(E)f_1(E) + A_2(E)f_2(E)] dE \quad (3)$$

Dòng điện I_{DS} chạy trong mạch ngoài được xác định:

$$I_D = \frac{q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E)[f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (4)$$

Phương trình (4) là phương trình Landauer.

Hàm $T(E)$ xuất hiện trong phương trình (4) là hàm số truyền. Trong phương thức chuyển dời đơn đạo của điện tử, hàm số truyền $T(E)$ được tính toán từ phương pháp NEGF sử dụng mối tương quan như sau:

$$T(E) = \text{Trace}[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^+] = \text{Trace}[\Gamma_2 G \Gamma_1 G^+] \quad (5)$$

Ma trận toán tử Hamilton $[H]$ mô tả cho chấm lượng tử nhiều mức năng lượng:

$$H = \begin{bmatrix} & 1 & 2 & \dots & N-1 & N \\ 1 & 2t_0 & -t_0 & & 0 & 0 \\ 2 & -t_0 & 2t_0 & & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ N-1 & 0 & 0 & & 2t_0 & -t_0 \\ N & 0 & 0 & & -t_0 & 2t_0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

Trong đó, $t_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$: khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai mức năng lượng, a : độ rộng của rào thế.

Ma trận self-energy tại tiếp xúc cực nguồn và cực máng lần lượt là:

$$\Sigma_1(E) = \begin{bmatrix} & 1 & 2 & \dots & N-1 & N \\ 1 & -\frac{i\gamma_1}{2} & 0 & & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ N-1 & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ N & 0 & 0 & & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$\Sigma_2(E) = \begin{bmatrix} & 1 & 2 & \dots & N-1 & N \\ 1 & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ N-1 & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ N & 0 & 0 & & 0 & -\frac{i\gamma_1}{2} \end{bmatrix}$$

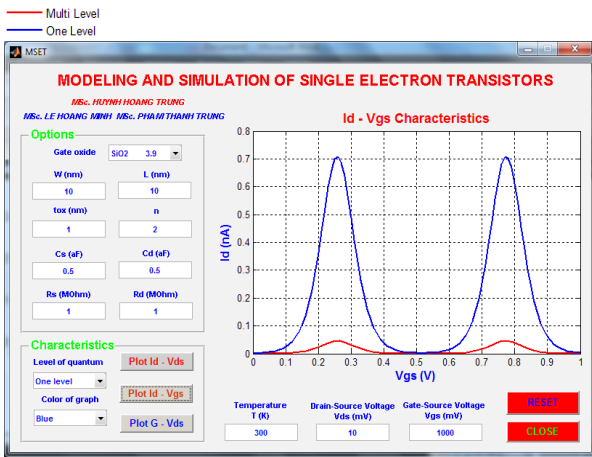
Những phương trình tương quan NEGF thu được:

$$\begin{aligned} G &= [EI - H - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \\ \Gamma_{1,2} &= i[\Sigma_{1,2} - \Sigma_{1,2}^+] \\ A_1(E) &= G\Gamma_1 G^+ \\ A_2(E) &= G\Gamma_2 G^+ \\ G^n &= [A_1]f(E) + [A_2]f(E) \\ A &\equiv i[G - G^+] = [A_1] + [A_2] \end{aligned} \quad (8)$$

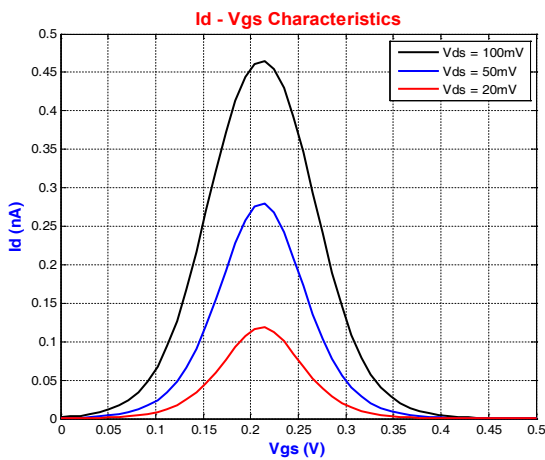
Trong đó, I - ma trận đơn vị, H - ma trận toán tử Hamilton, Σ_1 và Σ_2 - ma trận self-energy, Γ_1 và Γ_2 - ma trận mở rộng là phần ảo của ma trận self-energy, A_1 và A_2 - hàm phổ thành phần, A - hàm phổ là phần ảo của hàm Green G cho chấm lượng tử.

4. KẾT QUẢ MÔ PHỎNG SET

Sử dụng công cụ GUI trong MatLab kết hợp với thuật toán NEGF, chúng tôi đã mô phỏng được những đặc trưng dòng-thế ($I_d - V_{gs}$, $I_d - V_{ds}$, $G - V_{ds}$) của SET với chấm lượng tử nhiều mức và khảo sát ảnh hưởng của điện dung, thiên áp và nhiệt độ.

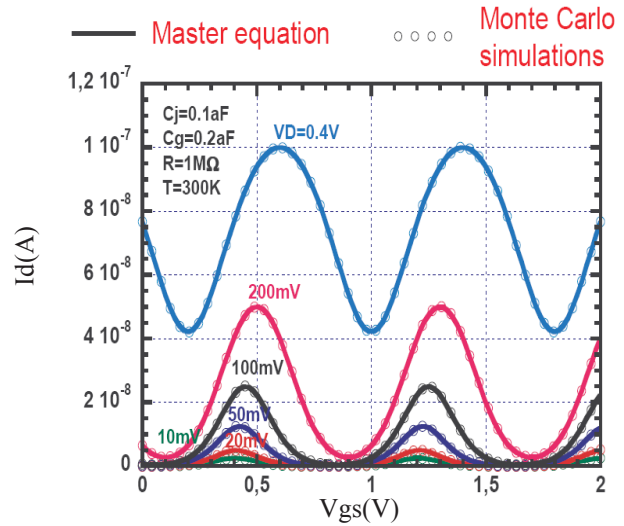


Hình 3. Giao diện chương trình mô phỏng SET. Đặc trưng $I_d - V_{gs}$ (dao động Coulomb) của SET được mô phỏng cho $V_{ds} = 10mV$ tại nhiệt độ $T = 300K$. Những thông số của SET $L = W = 10nm$, $\epsilon = 3.9$, $t_{ox} = 1nm$, $C_S = C_D = 0.5aF$ và $R_S = R_D = 1M\Omega$.



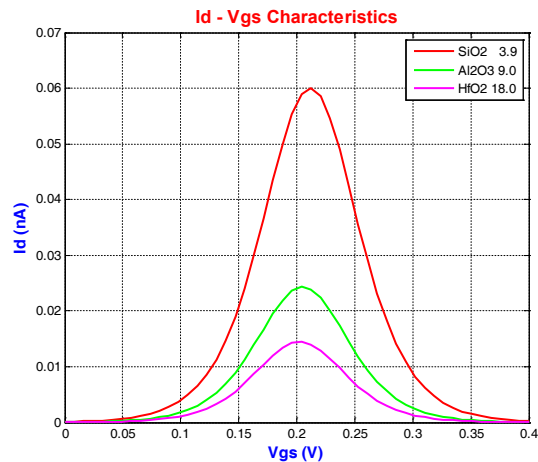
Hình 4. Đặc trưng $I_d - V_{gs}$ của SET với chấm lượng tử có nhiều mức năng lượng được mô phỏng cho $V_{ds} = 100mV$, $V_{ds} = 50mV$ và $V_{ds} = 20mV$ tại nhiệt độ $T = 300K$, $L = W = 10nm$, $\epsilon = 3.9$, $t_{ox} = 1nm$, $C_S = C_D = 0.1aF$ và $R_S = R_D = 1M\Omega$.

Hình 3 cho thấy dòng điện (đỉnh dao động Coulomb) qua chấm lượng tử với nhiều mức năng lượng (màu đỏ) thấp dòng điện qua chấm một mức năng lượng. Hình 4, sự thay đổi theo chiều tăng điện thế áp V_{ds} thì dòng điện I_d qua chấm cũng tăng và ngược lại.



Hình 5. Đặc trưng $I_d - V_{gs}$ của SET với chấm lượng tử có nhiều mức năng lượng được mô phỏng cho V_{ds} thay đổi tại nhiệt độ $T = 300K$ theo phương pháp Phương trình chính-ME và phương pháp Monte Carlo-MC [3-6,8].

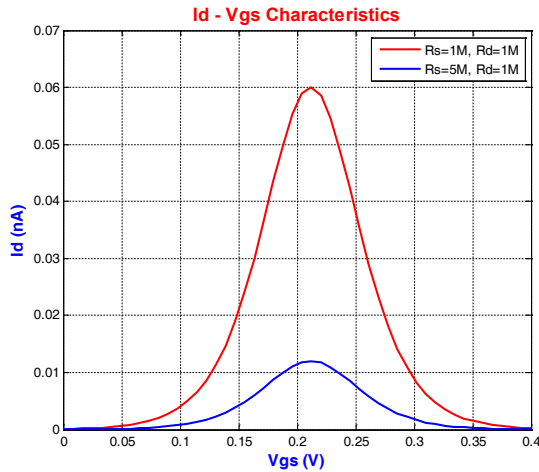
Trong nghiên cứu này, chúng tôi mô phỏng đặc trưng $V_d - V_{gs}$ của SET với chấm lượng tử có nhiều mức năng lượng theo phương pháp NEGF. So sánh hình 4 và hình 5, chúng tôi nhận thấy có sự tương đồng trong mô phỏng theo phương pháp NEGF và phương pháp ME, MC [3-6, 8].



Hình 6. Đặc trưng $I_d - V_{gs}$ của SET được mô phỏng cho $V_{ds} = 10mV$ tại nhiệt độ $T = 300K$ khi thay đổi vật liệu cách điện cực cổng.

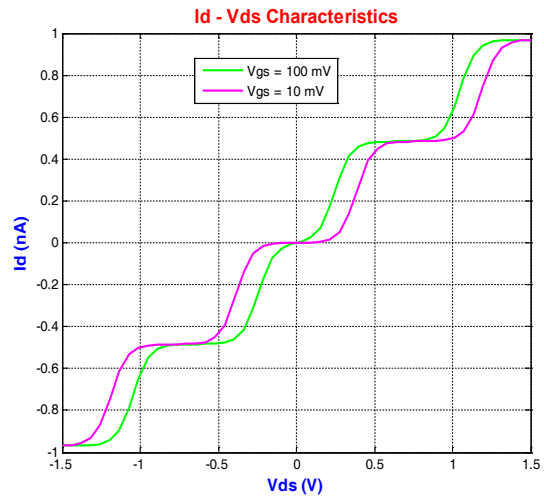
Hình 6, thay đổi vật liệu ôxít cách điện của cực cổng có hằng số điện môi tăng thì điện dung C_G tăng làm cho dòng điện đỉnh I_d qua chám lượng tử giảm.

Hình 7 cho chúng ta thấy SET bất đối xứng thì cho dòng nhỏ hơn SET đối xứng vì R_S và R_D ảnh hưởng đến tần số xuyên hầm của điện tử tại tiếp xúc cực nguồn.



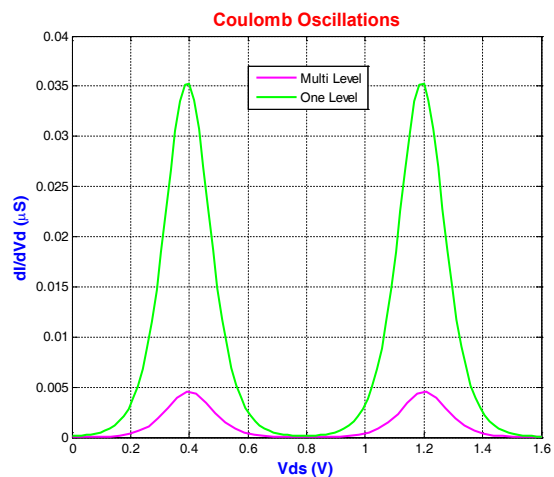
Hình 7. Đặc trưng $I_d - V_{gs}$ của SET được mô phỏng cho $V_{ds}=10mV$ tại nhiệt độ $T=300K$ với $R_S=1M\Omega$, $R_D=1M\Omega$ và $R_S=5M\Omega$, $R_D=1M\Omega$.

Khi áp vào cực nguồn và cực máng một điện thế V_{DS} sẽ tạo nên sự chênh lệch mức Fermi tại tiếp xúc cực nguồn, cực máng $\mu_1 - \mu_2 = eV_{ds}$. Điện thế áp cực cổng thay đổi $V_{gs} = 10mV$ và $V_{gs} = 100mV$ thì cho kết quả như hình 8. Vì điện thế V_{gs} làm dịch chuyển các mức năng lượng trong chám lên hoặc xuống đến khi mức năng lượng nằm vào khoảng giữa của sự chênh lệch mức Fermi tại tiếp xúc cực nguồn và cực máng, khi đó có dòng điện chạy từ tiếp xúc cực nguồn xuyên qua chám lượng tử đến tiếp xúc cực máng và tạo ra dòng điện I_d .

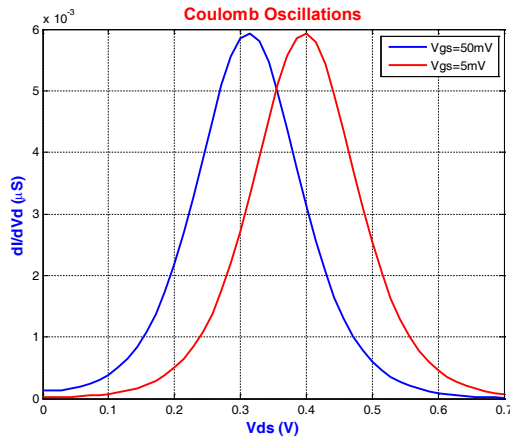


Hình 8. Đặc trưng $I_d - V_{ds}$ của SET được mô phỏng cho $V_{gs}=10mV$ (màu tím) và $V_{gs}=100mV$ (màu xanh) và tại nhiệt độ $T=300K$. Những thông số của SET $L=W=10nm$, SiO_2 ($\epsilon=3.9$) $t_{ox}=1nm$, $C_S=C_D=0.5aF$ và $R_S=R_D=1M\Omega$.

Kết quả thể qua hình 8 cho ta thấy độ rộng của vùng khóa Coulomb phụ thuộc vào điện thế áp cực cổng V_{gs} , khi thế cổng V_{gs} càng tăng thì độ rộng của vùng khóa Coulomb càng giảm.



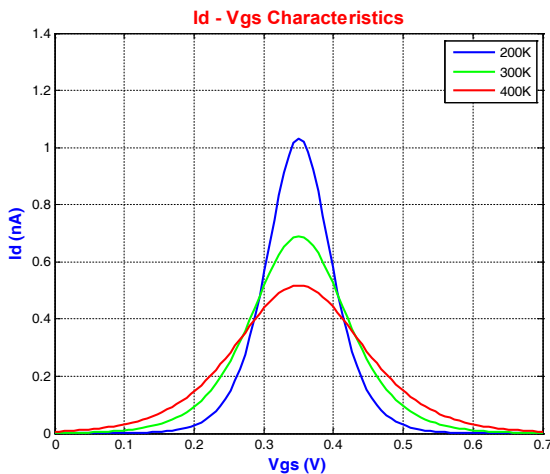
Hình 9. Đặc trưng $G - V_{ds}$ của SET được mô phỏng cho $V_{gs}=10mV$ tại nhiệt độ $T=300K$. Những thông số của SET $L=W=10nm$, SiO_2 ($\epsilon=3.9$), $t_{ox}=1nm$, $C_S=C_D=0.5aF$ và $R_S=R_D=1M\Omega$.



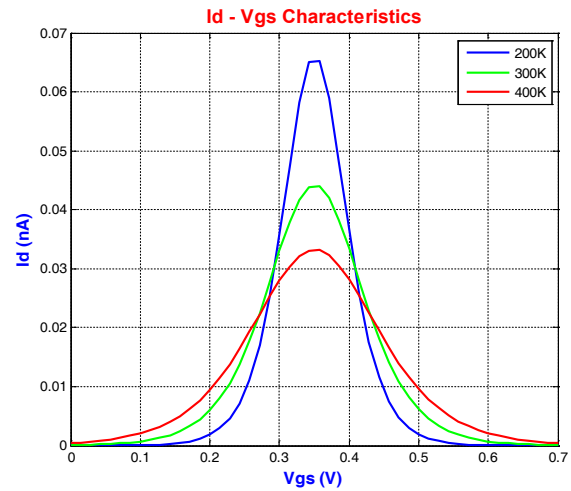
Hình 10. Đặc trưng $G - V_{ds}$ của SET được mô phỏng cho $V_{gs}=50mV$ và $V_{gs}=5mV$ tại nhiệt độ $T=300K$.

Độ dẫn G trong trường hợp SET với chấm lượng tử nhiều mức năng lượng thì thấp hơn so với SET với chấm lượng tử một mức năng lượng (hình 9). Khi V_{gs} tăng thì đỉnh độ dẫn G dịch về phía bên trái và ngược lại nhưng giá trị đỉnh thì bằng nhau (hình 10).

Khi thay đổi nhiệt độ hoạt động của SET với các giá trị 200K, 300K và 400K chúng ta có kết quả được thể hiện trên hình 11 và hình 12. Nhiệt độ càng tăng thì độ rộng của vùng dẫn càng được mở rộng nhưng dòng đỉnh lại giảm. Dòng đỉnh trong mô hình SET có nhiều mức thấp hơn dòng đỉnh trong mô hình SET có một mức.



Hình 11. Đặc trưng $I_d - V_{gs}$ của SET với chấm lượng tử có một mức năng lượng được mô phỏng cho $V_{ds}=10mV$, $L=W=10nm$, $\epsilon=3.9$, $t_{ox}=1.3nm$, $C_S=C_D=1aF$ và $R_S=R_D=1M\Omega$ và tại nhiệt độ $T=200K$, $300K$ và $400K$.



Hình 12. Đặc trưng $I_d - V_{gs}$ của SET với chấm lượng tử có nhiều mức năng lượng được mô phỏng cho $V_{ds}=10mV$, $L=W=10nm$, $\epsilon=3.9$, $t_{ox}=1.3nm$, $C_S=C_D=1aF$ và $R_S=R_D=1M\Omega$ và tại nhiệt độ $T=200K$, $300K$ và $400K$.

5. KẾT LUẬN

Dựa vào mô hình SET, chúng tôi sử dụng thuật toán NEGF tính hàm phân bố, mật độ trạng thái, mật độ điện tử, hàm số truyền điện tử và những đặc trưng dòng-thế, độ dẫn-thế của SET với chấm lượng tử nhiều mức. Chương trình mô phỏng được viết nhờ giao diện đồ họa người sử dụng (GUI) trong MatLab. Những ảnh hưởng của điện dung, thiên áp và nhiệt độ lên những đặc trưng dòng-thế của SET cũng được trình bày. Những kết quả mô phỏng khá phù hợp với những kết quả mô phỏng được công bố dựa trên phương pháp ME và MC [8, 9, 10] trong thời gian gần đây trên thế giới.

6. GHI NHẬN VÀ CẢM ƠN

Báo cáo này là một phần nghiên cứu của đề tài NCKH trọng điểm ĐH SPKT TP. HCM năm 2011 (T2011-22 TĐ). Nhóm nghiên cứu cảm ơn sự thảo luận của nhóm nghiên cứu linh kiện điện tử nano ĐH KHTN Tp.HCM. Xin cảm ơn các đóng góp hữu ích từ các giáo sư phản biện nhằm hoàn chỉnh bài báo cáo này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. K. Uchida, R. Matsuzawa, J. Koga, R. Ohba, S. Takagi and A. Toriumi, *Jpn. J. Appl. Phys.* 3, 4B, p. 2321-2324 (2000).
- [2]. S. Mahapatra, A. M. Ionescu and K.

- Banerjee, *IEEE Electron Device Lett.*, 23, p.366-368 (2002).
- [3]. C. Wasshuber, *Computational Electronics*, Springer-Verlag, New York, 2002.
- [4]. R. H. Chen, A. N. Karotkov, and K. K. Likharev, *Proceedings of Device Res. Conf.* 1995, p. 44-45.
- [5]. Y. S. Yu et al., *Proceedings of Asia Pacific Workshop: Fundamental Application Advanced Semiconductor Device*, 2000, p. 85-90.
- [6]. K. K. Likharev, SETTRAN – “A simulator for single electron transistor.” Available: <http://hana.physics.sunysb.edu/set/software>.
- [7]. S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press, 2005.
- [8]. Benjamin Pruvost, Hiroshi Mizuta, and Shunri Oda, “Voltage – Limitation - Free Compact SET Model Incorporating the Effects of Spin - Degenerate Discrete Energy States”. *IEEE Silicon Nanoelectronics Workshop*, pp. 51 – 52, 2007.
- [9]. S. Mahapatra, V. Vaish, C. Wasshuber, K. Banerjee, and A. M. Ionescu, *IEEE Trans. on Electron Devices*, 51, 11, p. 1772-1782 (2004).
- [10]. B. Pruvost, H. Mizuta, and S. Oda, *IEEE Trans. on Nanotechnology*, 6, 2, p. 218-224 (2007).