

Модель многоостровковых одноэлектронных цепочек на основе метода Монте-Карло

© И.И. Абрамов[†], С.А. Игнатенко, Е.Г. Новик

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
220027 Минск, Белоруссия

(Получена 11 июля 2002 г. Принята к печати 16 октября 2002 г.)

Предложена двумерная модель многоостровковых одноэлектронных цепочек на основе численного решения уравнения Пуассона и использования метода Монте-Карло. Показана адекватность модели путем сравнения результатов расчета вольт-амперных характеристик двух различных пятиостровковых структур с экспериментальными данными. С помощью модели проиллюстрирована возможность восстановления ряда геометрических размеров приборной одоэлектронной структуры, которые трудно идентифицировать экспериментально.

1. Введение

Метод Монте-Карло становится одним из основных подходов при построении моделей повышенной адекватности описания физических процессов в самых разнообразных приборных структурах [1,2]. Так, достаточно отметить теоретические исследования [3,4], в которых анализировались МОП транзисторы на ряде технологически значимых для микроэлектроники полупроводников. Оказалось, что при длинах канала транзисторов менее 100 нм ни один из исследованных полупроводниковых материалов не будет иметь существенных преимуществ по сравнению с кремнием. Исключением является только фосфид индия. К сожалению, высокоадекватная и очень нужная модель [3,4] трудно реализуема и не может широко использоваться. В частности, для расчета только одной точки вольт-амперной характеристики (ВАХ) МОП транзистора по программе DAMOCLES требуется от 10 до 100 ч (и более!) на высокопроизводительной вычислительной системе IBM 3090S. Поэтому в настоящее время прикладываются значительные усилия по разработке различных ускоряющих процедур для моделей рассматриваемого класса на основе физических подходов, аппроксимаций, более полного учета специфики задачи [5].

Ситуация в целом, по-видимому, будет еще более сложной для приборных структур нанoeлектроники. К счастью, чуть менее критична она при теоретическом исследовании структур, для описания которых полуклассический подход продолжает быть корректным. Такими структурами, в частности, являются приборы одoeлектроники [6,7]. Известно, что метод Монте-Карло — один из немногих в настоящее время более или менее эффективных подходов теоретического анализа многоостровковых одoeлектронных цепочек [6,8,9]. В данном случае распространенной программой моделирования на основе метода Монте-Карло является программа MOSES [9].

Тем не менее известные модели многоостровковых одoeлектронных цепочек на основе метода Монте-Карло обладают одним существенным недостатком. В качестве

обязательных параметров согласования с экспериментальными данными в них используются сопротивления и емкости туннельных переходов. В результате утрачивается связь модели с параметрами конструкции и материалов приборов, а следовательно, затрудняется ее использование в процессе теоретического исследования и разработки одoeлектронной приборной структуры.

Цель статьи — разработка модели многоостровковых одoeлектронных цепочек на основе метода Монте-Карло, лишенной отмеченного недостатка, а также подтверждение ее адекватности путем сравнения с экспериментальными данными. При этом важно отметить, что предложенная модель может быть реализована на персональных ЭВМ типа Pentium III, т.е. допустимо ее широкое использование.

2. Модель

В работах [10–12] была предложена двумерная численная модель одoeлектронного транзистора с одним островком. В модели решаются уравнение Пуассона и основное уравнение (master equation). В статье [13] данный подход распространен на случай двухостровковых одoeлектронных цепочек. Модель, описанная в [13], характеризуется приемлемой адекватностью и высокой эффективностью, однако, к сожалению, с увеличением числа туннельных переходов решение основного уравнения сильно усложняется. В связи с этим для одoeлектронных структур с большим количеством островков в данной статье разработанный подход используется уже в сочетании с методом Монте-Карло.

Рассмотрим сущность предлагаемой модели. Согласно классификации работы [7], анализируемый прибор выбран соответствующим принципиальной структурной схеме многоостровковых одoeлектронных цепочек. Ее вид приведен на рис. 1. Исходными в модели являются геометрические размеры структуры, параметры материалов, фоновые заряды на островках, управляющие воздействия: напряжения истока, стока и затвора; температура T .

[†] E-mail: nanodev@bsuir.edu.by

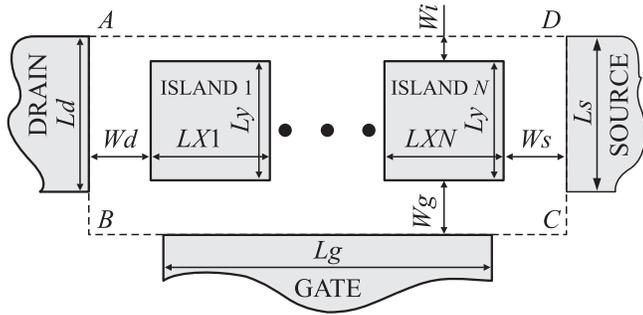


Рис. 1. Структура многоостровковой одноэлектронной цепи.

Уравнение Пуассона в виде [10–12] численно решается в области $ABCD$ (рис. 1). Влияние фоновых зарядов на островках учитывается с помощью аппроксимации [13]. В качестве крайних условий выбираются граничные условия Дирихле на контактах и условия Неймана на свободных границах $ABCD$. Используемые численные методы конечно-разностной аппроксимации уравнения Пуассона, решения систем линейных алгебраических уравнений подробно описаны в [10]. В результате численного решения уравнения Пуассона получается распределение потенциала в приборе в зависимости от геометрических, электрофизических параметров структуры и управляющих воздействий.

Сопротивления туннельных переходов и вероятности переноса носителей заряда через них рассчитываются по известным формулам, вид которых при учете зависимости от электростатического потенциала для одноостровковых структур приведен в [10]. Их распространение на случай многоостровковых структур осуществляется естественным образом.

Ток, проходящий через туннельный переход, вычисляется по формуле [6,13]

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

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

где V_i и V_f — напряжения до тунелирования электрона и после соответственно; k_B — постоянная Больцмана.

Рассмотрим процедуру расчета ВАХ по предложенной модели. Ее блок-схема при расчете одной точки ВАХ приведена на рис. 2. В качестве примера поясним ее для случая пятиостровковой структуры, т.е. $N = 5$.

Первоначально решается уравнение Пуассона для начальной (с индексом $i = 0$) комбинации избыточных носителей на островках $\{n_i\} \equiv (n_1 = 0, n_2 = 0, n_3 = 0, n_4 = 0, n_5 = 0)$ и вычисляются парциальные токи через все туннельные переходы по формулам (1) и (2). Найденные значения запоминаются с целью экономии времени ЭВМ, когда в следующий раз возникает комбинация $\{n_0\}$. Сразу же заметим, что наиболее трудоемким процессом в модели по затратам времени ЭВМ является решение уравнения Пуассона. Поэтому в данной

модели такой способ экономии времени ЭВМ целесообразен и позволяет в некоторых случаях сократить его в 1000 раз и более. Далее производится выбор количества туннельных событий K . Чем больше K , тем точнее результат, но, к сожалению, и увеличивается время расчета. Далее в соответствии с методом Монте-Карло генерируется первое случайное число $r_i \in [0, 1]$ и определяется время t_i до следующего туннельного события:

$$t_i = -\frac{e \ln(r_i)}{\Sigma I}, \quad (3)$$

где ΣI — сумма парциальных токов для всех возможных независимых событий, соответствующих туннелирова-

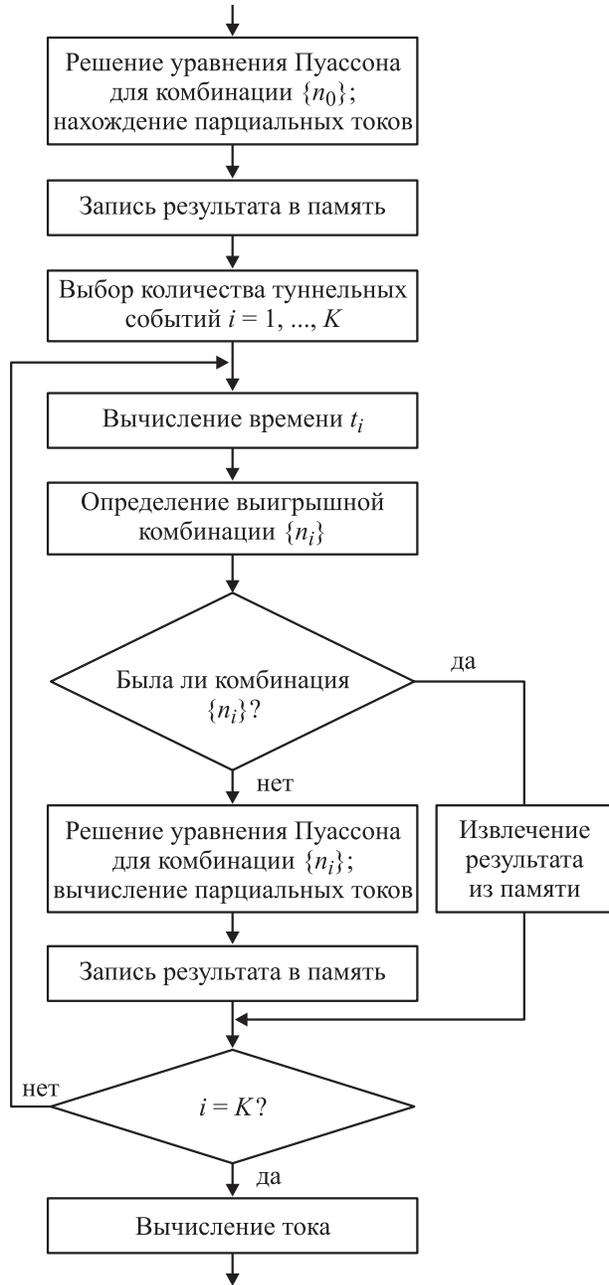


Рис. 2. Блок-схема процедуры расчета точки ВАХ одноэлектронных цепочек по предложенной модели.

нию одного носителя в двух направлениях через каждый переход.

Затем генерируется следующее случайное число r_i . Отрезок $[0,1]$ разбивается на участки, пропорциональные величинам парциальных токов, которые соответствуют туннелированию одного носителя в двух направлениях через каждый переход. Участок, на который выпало данное случайное число r_i , — выигрышный. В результате определяется новая комбинация $\{n_i\}$. Далее проверяется, встречалась ли данная комбинация ранее? Если да, то парциальные токи извлекаются из памяти ЭВМ, если нет, то решается уравнение Пуассона и вычисляются парциальные токи через все туннельные переходы. Последние заносятся в память ЭВМ. После этого проверяется, все ли возможные туннельные события перебраны (число K)?

Общий ток, проходящий через одиночный туннельный переход j , определяется по формуле

$$I_j = \frac{n_j e}{t_{\Sigma}}, \quad (4)$$

где n_j — количество носителей заряда, прошедших через данный переход за весь период, e — заряд электрона; t_{Σ} — суммарное время актов туннелирования. Критерием правильности расчета является равенство токов I_j через все туннельные переходы с определенной степенью точности.

Наиболее существенные отличия предложенной модели от моделей [6,8,9], также основанных на методе Монте-Карло, заключаются в следующем: 1) в решении уравнения Пуассона в виде [10–12] с целью вычисления напряжений на туннельных переходах; 2) вместо скоростей туннелирования непосредственно используются парциальные токи через туннельные переходы, вычисленные по формулам (1) и (2). Отметим ряд преимуществ данной модели по сравнению с моделью [13], в которой решается основное уравнение, а именно 1) возможен расчет сложных одноэлектронных цепочек с $N > 2$; 2) в ее основе лежит непосредственно микроскопическая модель туннельных актов, которая более строго отражает реальное поведение носителей заряда в одноэлектронной структуре; 3) высокая устойчивость вычислительного процесса. Недостаток модели состоит в гораздо больших временах расчета ВАХ при $N = 2$ по сравнению с моделью работы [13]. Тем не менее время расчета ВАХ, например для пятиостровковых цепочек, обычно не превышает 10 ч на персональной ЭВМ типа Pentium III, т. е. все же приемлемое.

Предложенная модель была реализована в программе, написанной на языке Фортран и включенной в комплекс программ расчета многоостровковых одноэлектронных цепочек MTJ-SET-NANODEV системы моделирования нанoeлектронных приборов NANODEV [10]. Все приводимые в следующей части работы результаты получены с ее использованием на персональной ЭВМ типа Pentium III.

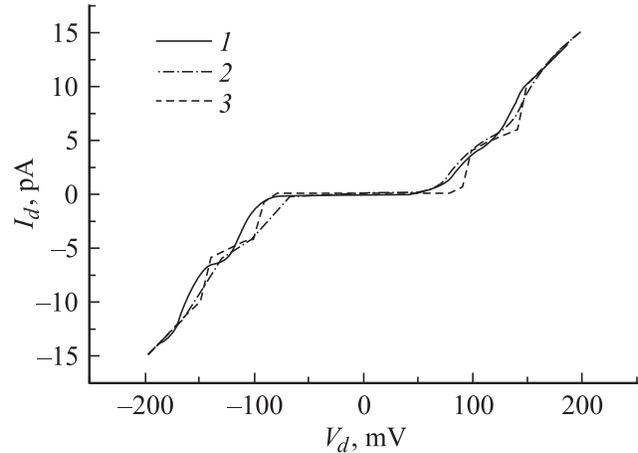


Рис. 3. ВАХ одноэлектронного транзистора с пятью островками: 1 — экспериментальные данные, 2 — расчет по программе MOSES, 3 — расчет по разработанной модели.

3. Результаты

В качестве объекта моделирования был выбран одноэлектронный транзистор с пятью островками, т. е. $N = 5$. Поясним причины этого выбора. Во-первых, при таком количестве островков проявляются все основные черты функционирования многоостровковых цепочек, например, временная и пространственная корреляция актов туннелирования. Во-вторых, при большем количестве островков общее сопротивление велико (очень мал проходящий ток) и, следовательно, высока степень сложности изготовления таких структур. Поэтому в литературе мало сведений о структурах с $N > 5$. В-третьих, при дальнейшем увеличении количества островков возрастает, к сожалению, и время расчета ВАХ.

Рассмотрим результаты моделирования, подтверждающие адекватность предложенной модели. Они получены при $K = 20\,000$, исходя из достижимости равенства токов через все туннельные переходы с погрешностью не более 0.1%.

В работе [14] описывается процесс изготовления одноэлектронного транзистора с пятью островками, экспериментальные данные и результаты расчета авторов по программе MOSES. Заметим, что структура создается искусственно и контролируется с помощью метода SECO (step edge cut off). В качестве материала островков используется титан, а для туннельных переходов — кремний p -типа. На рис. 3 приведена экспериментальная характеристика для тока стока I_d в зависимости от напряжения стока V_d (кривая 1), результаты расчета по программе MOSES (кривая 2) и по предложенной модели (кривая 3). Видно, что обе модели неплохо согласуются с экспериментальными данными.

С помощью разработанной модели получается хорошее согласование и с экспериментальными данными для одноэлектронных многоостровковых цепочек на других материалах, причем при различных рабочих температурах. Более того, с помощью предложенной модели

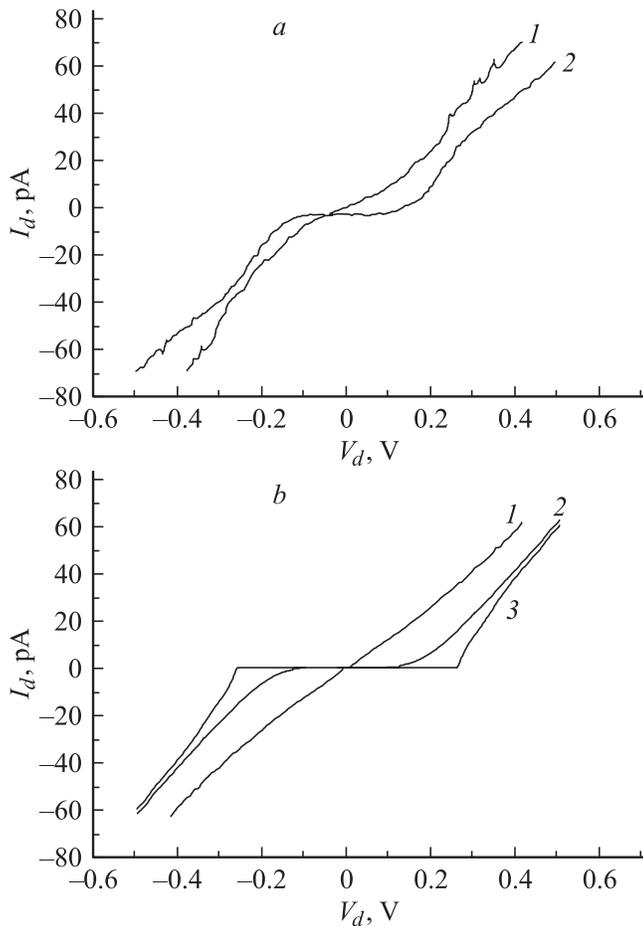


Рис. 4. ВАХ многоостровковой структуры: *a* — экспериментальные данные, *b* — результаты моделирования по разработанной модели, *T*, К: 1 — 300, 2 — 77, 3 — 0.01.

можно восстановить основные размеры исследуемых структур. Для иллюстрации этого рассмотрим очень сложный случай.

В работе [15] описана многоостровковая цепочка, в которой в качестве островков используются наночастицы AuPd. Структура достаточно сложная (см. рис. 5 работы [15]). Как пишет автор [15], удалось определить лишь следующие исходные параметры структуры: 1) количество туннельных переходов по наиболее короткому пути между стоком и истоком равно шести; 2) размеры островков от 2 до 3 нм; 3) расстояние от истока до стока 20–30 нм. Итак, имеющаяся информация весьма неопределенна.

На рис. 4, *a* приведены экспериментальные данные, а на рис. 4, *b* — результаты расчета по предложенной модели. Видно, что результаты в целом достаточно неплохо согласуются при $T = 300$ и 77 К. Проиллюстрированные на рис. 4, *b* данные получены при следующих основных исходных параметрах структуры: $N = 5$, расстояние между островками 1.5 нм, островки одинаковые с размерами 2.5×2.5 нм. Таким образом, расстояние от истока до стока бралось 21.5 нм

($6 \times 1.5 + 5 \times 2.5$). Важно отметить, что все эти восстановленные исходные параметры лежат в указанном автором [15] диапазоне численных значений (см. ранее). Приведенные на рис. 4, *b* результаты позволяют определить область кулоновской блокады данной структуры при очень малой температуре ($T = 0.01$ К), в частности $[-0.25$ В, $+0.25$ В]. Сравнивая кривые 1–3 на рис. 4, *b*, можно убедиться в „разрушении“ эффекта кулоновской блокады с увеличением температуры до комнатной для исследуемой структуры, что полностью подтверждается экспериментальными данными на рис. 4, *a*.

Полученные результаты, кроме подтверждения отмеченного вывода об адекватности модели, позволяют также сделать следующие замечания. Во-первых, предложенная модель может использоваться для восстановления ряда исходных параметров многоостровковых одноэлектронных цепочек, например их геометрических размеров. Это представляется чрезвычайно важным ввиду возможных проблем их экспериментального определения, как в рассматриваемом случае. Во-вторых, несмотря на казалось бы высокую степень сложности анализируемой одноэлектронной структуры, при моделировании ее допустимо представить принципиальной структурной схемой, приведенной на рис. 1. Таким образом, основные физические закономерности функционирования многоостровковых одноэлектронных цепочек верно описываются в рамках предложенной модели, в которой используется достаточно простая структурная схема рис. 1. Заметим, что это также важно, так как использование геометрии реальной структуры в ряде случаев приведет к существенным дополнительным трудностям численного моделирования данного вида одноэлектронных структур. В результате было бы фактически невозможно теоретически исследовать влияние параметров конструкции и материалов на их электрические характеристики.

4. Заключение

Разработана двумерная модель многоостровковых одноэлектронных цепочек на основе численного решения уравнения Пуассона в сочетании с использованием метода Монте-Карло. Показано, что модель характеризуется приемлемой адекватностью и эффективностью. С ее помощью могут быть также восстановлены некоторые исходные параметры, которые трудно определить из экспериментальных данных.

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность д-ру А.Н. Короткову за ряд полезных замечаний по модели, описанной в данной статье.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Республиканских программ научных исследований: „Электроника“, „Наноэлектроника“ и гранта Министерства образования Республики Беларусь.

Список литературы

- [1] Р. Хокни, Дж. Иствуд. *Численное моделирование методом частиц* (М., Мир, 1987).
- [2] Ю. Пожела. *Физика быстродействующих транзисторов* (Вильнюс, Мокслас, 1989).
- [3] M.V. Fishetti, S.E. Laux. Phys. Rev. B, **38** (14) 9721 (1988).
- [4] M.V. Fishetti, S.E. Laux. IEEE Trans., **ED-38** (3), 650 (1991).
- [5] Н. Kosina, М. Nedjalkov, S. Selberherr. IEEE Trans., **ED-47** (10), 1898 (2000).
- [6] *Single charge tunneling: Coulomb blockade phenomena in nanostructures*, ed. by H. Grabert, M.H. Devoret. [NATO ASI Ser. B: Physics (N.Y., Plenum, 1992) v. **294**].
- [7] И.И. Абрамов, Е.Г. Новик. ФТП, **33** (11), 1388 (1999).
- [8] Н.С. Бахвалов, Г.С. Казача, К.К. Лихарев, С.И. Сердюкова. ЖЭТФ, **95** (3), 1010 (1989).
- [9] R.H. Chen, A.N. Korotkov, K.K. Likharev. App. Phys. Lett., **68** (14), 1954 (1996).
- [10] И.И. Абрамов, Е.Г. Новик. *Численное моделирование металллических одноэлектронных транзисторов* (Минск, Бестпринт, 2000).
- [11] И.И. Абрамов, Е.Г. Новик. ФТП, **34** (8), 1014 (2000).
- [12] И.И. Абрамов, Е.Г. Новик. ФТП, **35** (4), 489 (2001).
- [13] И.И. Абрамов, С.А. Игнатенко, Е.Г. Новик. ФТП, **36** (10), 1272 (2002).
- [14] S. Altmeyer, A. Hamidi, B. Spangenberg, H. Kurz. J. Appl. Phys., **81** (12), 8118 (1997).
- [15] H. Ahmed. J. Vac. Sci. Technol. B, **15** (6), 2101 (1997).

Редактор Л.В. Беляков

A model of multiple-island single-electron arrays based on Monte-Carlo method

I.I. Abramov, S.A. Ignatenko, E.G. Novik

Belarussian State University
of Informatics and Radioelectronics,
220027 Minsk, Belarus

Abstract A two-dimensional model of multiple-island single-electron arrays based on a numerical solution of the Poisson equation alongside with a Monte-Carlo method was proposed. By comparing results of current-voltage characteristics simulation with experimental data the model is shown to be adequate. Making use of the model, it was illustrated that one has a possibility to restore a number of geometric parameters for a single-electron device structure, which are not easily identified experimentally.