



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ,
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Θεωρία και Προσομοίωση Νανοηλεκτρονικών Διατάξεων

Διδακτορική Διατριβή

Αργυρώ Γκίλη

Αθήνα
Δεκέμβριος 2016



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ
ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ, ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Θεωρία και Προσομοίωση Νανοηλεκτρονικών Διατάξεων

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Συμβουλευτική Επιτροπή : Ιωάννης Π. Ξανθάκης

Δημήτριος Τσαμάκης

Ηλίας Γλύτσης

Εγκρίθηκε από την επταμελή εξεταστική επιτροπή την 23^η Δεκεμβρίου 2016.

.....
Ιωάννης Π. Ξανθάκης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Δημήτριος Τσαμάκης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Ηλίας Γλύτσης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Δημήτριος Τσουκαλάς
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Χαράλαμπος Δημητριάδης
Καθηγητής Α.Π.Θ

.....
Πάυλος Σωτηριάδης
Αναπ. Καθ. ΕΜΠ

.....
Νικόλαος Κονοφάος
Αναπ. Καθ. ΑΠΘ

Αργυρώ Γ. Γκίλη
Διδάκτωρ Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Αργυρώ Γ. Γκίλη 2016.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου

Στη μητέρα μου, Χρυσούλα

Ευχαριστίες

Η εκπόνηση της διδακτορικής μου διατριβής στον τομέα της Νανοηλεκτρονικής ήταν εκ των πραγμάτων μία πρόκληση και ως τέτοια μου κέντρισε το ενδιαφέρον. Μοναδική συμβολή στην πραγμάτωση αυτού του στόχου είχε ο επιβλέπων της διατριβής μου κ.Ιωάννης Ξανθάκης τον οποίο θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά. Η επιστημονική καθοδήγησή του κατά τη διάρκεια εκπόνησης της διδακτορικής μου διατριβής υπήρξε συνεχής. Η συγκεκριμένη διατριβή ανήκει σε μία θεματική ενότητα πολύ ανταγωνιστική. Ωστόσο, ο κ. Ξανθάκης εμπιστεύτηκε με προθυμία σε εμένα την διεκπεραίωση αυτής και για αυτό τον ευχαριστώ ιδιαίτερος. Οι υπομονετικές και πεφωτισμένες παρεμβάσεις του στην επιστημονική ορθότητα των μεθόδων που ακολουθήθηκαν και η αισιοδοξία του υπήρξαν καταλυτικές για την πορεία της συγκεκριμένης εργασίας. Και για τις ολιγόλεπτες εκείνες στιγμές της έρευνας που όλα φάνταζαν λάθος, αλλά αμέσως μετά αυτό ανατρεπόταν, ο ίδιος έλεγε περιπαικτικά «*nivere pericolosamente - ζειν επικινδύνως*». Ο κ. Ξανθάκης χαρακτηρίζεται από μία ιδιαίτερη απλότητα και πέρα από τις επιστημονικές του συμβουλές δεν ήταν λίγες οι φορές που θα είχε ένα ανέκδοτο να μας πει, μία ιστορία να μας διηγηθεί και που οι συζητήσεις για θέματα πολιτικά και μη κρατούσαν ώρες. Η συνεργασία μαζί του ήταν εξαιρετική και η εμπειρία της διατριβής κάτι παραπάνω από ενδιαφέρουσα και γόνιμη.

Στη συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τους καθηγητές Δημήτριο Τσαμάκη και Ηλία Γλύτση, μέλη της τριμελούς επιτροπής του διδακτορικού μου. Ευχαριστώ τον κ. Γλύτση για την υπομονετική του παρέμβαση και την υποστήριξη της διατριβής μου. Ευχαριστώ τον κ.Τσαμάκη για τις επιστημονικές παρατηρήσεις που έθιξαν καίρια σημεία της εργασίας, τις συμβουλές του και την υποστήριξη του διδακτορικού μου. Επιπρόσθετα ευχαριστώ τον κ.Τσαμάκη ο οποίος σε συνεργασία με τον κ.Ξανθάκη μου έδωσαν την ευκαιρία να διδάξω το εργαστήριο του μαθήματος «Ηλεκτρονικά Υλικά», μία εμπειρία πλούσια σε γνώσεις και ιδιαίτερη για εμένα.

Θερμές ευχαριστίες οφείλω και στα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς επιτροπής της διατριβής μου. Ευχαριστώ τον κ. Χαράλαμπο Δημητριάδη για τις σημαντικές παρατηρήσεις και διορθώσεις που πρότεινε στην παρουσίαση του διδακτορικού μου. Ευχαριστώ τον κ. Δημήτριο Τσουκαλά για την επιστημονική παρέμβαση του σε σχέση τόσο με την δομή όσο και με τη συγγραφή της εργασίας. Τον κ. Νικόλαο Κονοφάο είχα την τύχη να τον γνωρίσω στο συνέδριο ISDRS 2016. Τον ευχαριστώ για τις επιστημονικές και ακαδημαϊκές συμβουλές του και για την υποστήριξη της εργασίας μου. Τέλος, ευχαριστώ τον κ Παύλο Σωτηριάδη που προσπάθησε να αναδείξει την πιθανή εφαρμογή του περιεχομένου της εργασίας σε συμπαγή κυκλωματικά μοντέλα.

Πάνω από όλα όμως θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου. Τους ευχαριστώ πολύ για την αγάπη και την ηθική και υλική υποστήριξη καθ'όλη τη διάρκεια του διδακτορικού μου. Ευχαριστώ πολύ τη μητέρα μου που πιστεύοντας σε εμένα με ενθάρρυνε πάντα ως προς τις σπουδές μου και ήταν κάτι παραπάνω από στήριγμα και αρωγός σε όλη αυτήν την προσπάθεια. Ευχαριστώ πολύ την αδερφή μου, που ούσα η καλύτερη μου φίλη είναι για εμένα πάντα εκεί. Ευχαριστώ πολύ τους ανθρώπους που ήταν πραγματικά κοντά μου αυτήν την περίοδο. Τους ευχαριστώ για την αμέριστη υποστήριξη και που ανέχτηκαν το άγχος μου όλη αυτήν την περίοδο.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά το σύμπαν και τις δυνάμεις του που με τους κατάλληλους συγχρονισμούς με ενίσχυσαν στο να καταφέρω να φτάσω ως εδώ.

Αργυρώ Γκίλη
Αθήνα, Δεκέμβριος 2016

Λέξεις Κλειδιά

Τρανζίστορες επίδρασης πεδίου κβαντικού πηγαδιού QW-FETs

Τρανζίστορες επίδρασης πεδίου υλικών III-V FETs

Μοντελοποίηση Poisson-Schroedinger-Continuity

Κανάλι InGaAs

Προσομοίωση Φυσικού Επιπέδου

Φορμαλισμός Natori

Θεωρία Landauer

Περίληψη

Προς το παρόν υπάρχουν τρανζίστορες επίδρασης πεδίου κβαντικού πηγαδιού (Quantum Well FETs) με μήκος πύλης 30-60nm τα οποία παρουσιάζουν εξαιρετική απόδοση και θεωρείται ότι αποτελούν έναν από τους κύριους ανταγωνιστές τεχνολογίας όσον αφορά στην μετά το Si εποχή. Η φυσική που διέπει τη μεταφορά φορτίου για τα τρανζίστορες FETs μεγάλου καναλιού που ακολουθούν την εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης και η φυσική που διέπει τη μεταφορά φορτίου για τα τρανζίστορες FETs μικρού καναλιού όπου η μεταφορά φορτίου είναι βαλλιστική, είναι σαφώς διαφορετική. Ωστόσο, πρόσφατα, αποδείχτηκε ότι τα αποτελέσματα της προσέγγισης του Landauer για την αγωγιμότητα μπορούν να γραφτούν με τη μορφή της εξίσωσης ολίσθησης-διάχυσης εάν η ταχύτητα κόρου v_{sat} επαναπροσδιοριστεί. Η συγκεκριμένη προσέγγιση έχει χρησιμοποιηθεί μέχρι στιγμής σε απλοποιημένες διατάξεις που αποτελούνται από ένα μόνο στρώμα-το κανάλι. Σε αυτήν την εργασία εφαρμόζεται η συγκεκριμένη προσέγγιση σε πραγματικές διατάξεις πολλών στρωμάτων. Αποδεικνύεται ότι το κλασσικό μοντέλο ανάλυσης στο οποίο επιλύονται αυτοσυνεπώς σε δύο διαστάσεις οι τρεις διαφορικές εξισώσεις Poisson, Schroedinger και η εξίσωση Συνεχειάς μπορεί να επεκταθεί και να εφαρμοστεί σε προσομοιώσεις που αφορούν και στους δύο τύπους τρανζίστορες επίδρασης πεδίου κβαντικού πηγαδιού, μεγάλου αλλά και μικρού καναλιού, αρκεί να προσαρμοστεί μία παράμετρος στο μοντέλο της εξίσωσης ολίσθησης-διάχυσης που είναι η ταχύτητα κόρου v_{sat} . Η συγκεκριμένη προσέγγιση η οποία καλείται PSC με κβαντικές διορθώσεις επιτρέπει την καλύτερη γκατανόηση των πλεονεκτημάτων και των μειονεκτημάτων των διαφορετικών τύπων QW FETs.

Η μέθοδος που ακολουθήθηκε για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων Poisson-Schroedinger-Continuity αυτοσυνεπώς είναι η αριθμητική μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών. Όλες οι παράμετροι του συγκεκριμένου μοντέλου έχουν αποκτηθεί από ανεξάρτητες πηγές βιβλιογραφίας. Δεν έχει γίνει προσαρμογή παραμέτρων, εκτός από το φράγμα Schottky Φ_b στη διεπιφάνεια μετάλλου-οξειδίου για το οποίο δεν υπάρχει κάποια πληροφορία αλλά και την ταχύτητα κόρου v_{sat} του μοντέλου ολίσθησης-διάχυσης σύμφωνα με όσα αναφέρθηκαν παραπάνω. Επιπλέον το φράγμα Schottky Φ_b μετακινεί τις καμπύλες διαγωγιμότητας σταθερά χωρίς να αλλάζει τη μορφή τους και η τιμή που επιλέχθηκε είναι κοντά στο μισό του ενεργειακού διάκενου του οξειδίου της διάταξης Al_2O_3 . Εφαρμόζοντας τη μέθοδο σε πραγματικές διατάξεις πολλών στρωμάτων προέκυψαν αποτελέσματα τα οποία βρίσκονται σε αξιοσημείωτη συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα, τόσο για τη διάταξη μεγάλου καναλιού όσο και για τη διάταξη μικρού καναλιού. Επιπλέον, από τα συγκεκριμένα αποτελέσματα αποκαλύφθηκε η αιτία του αργού ανοίγματος των διατάξεων που αναλύθηκαν.

Επιπρόσθετα, αναλύθηκε η εγκυρότητα της σχέσης Natori για το ρεύμα στον απαγωγό στις συγκεκριμένες διατάξεις. Η σχέση αποτελεί μία από τις πιο ανεπτυγμένες πλήρως κβαντικές μεθοδολογίες για όλα τα είδη των τρανζίστορες FETs. Γίνεται εμφανές από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων της σχέσης Natori με τα πειραματικά δεδομένα και με τα αποτελέσματα της μεθόδου PSC με κβαντικές διορθώσεις ότι η

μέθοδος Natori γίνεται αναξιόπιστη στην περιοχή υπο-κατωφλίου καθώς δεν συμπεριλαμβάνει το παρασιτικό ρεύμα. Τρόποι για να διορθωθεί η συγκεκριμένη αδυναμία προτείνονται, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο PSC με κβαντικές διορθώσεις, από τις οποίες η πιο αποδοτική είναι η χρήση ολόκληρου του δυδιάστατου δυναμικού που προκύπτει από τη μέθοδο PSC στην έκφραση Natori για το ρεύμα, αντί των απλοποιημένων δυναμικών που χρησιμοποιούνται στα συμπαγή μοντέλα.

Keywords

Quantum Well Field Effect Transistors QW-FETs

III–V Field Effect Transistors

Poisson-Schroedinger-Continuity modelling

InGaAs channel

Physical layer simulation

Natori Formalism

Landauer Theory

Abstract

At present 30-60nm-gate length Quantum Well (QW) FETs with superior performance exist which are considered to be one of the candidates for the post-Si era. The physics of long-channel drift diffusion (DD) driven FET and short-channel ballistic (30nm) FETs are of course different. However, it has been shown that the Landauer approach to conduction can be recast in the DD form if the saturation velocity v_{sat} is reinterpreted. This approach has only been exploited so far in simplified devices consisting of one layer, the channel. In this thesis we apply this approach to realistic devices consisting of many layers and show that we can extend the traditional fully 2-dimensional Poisson-Schroedinger-Continuity (PSC) model to simulate both types of III-V QW FETs by altering just one parameter in the DD model, namely the saturation velocity v_{sat} . Such an approach which we call quantum corrected PSC allows us to understand better the advantages and disadvantages of different QW FETs.

To this end we solve the system of differential equations Poisson-Schroedinger-Continuity by the numerical finite differences method. We state that all parameters of our model have been obtained from independent sources, i.e. no fitting has been used except for the Schottky barrier Φ_b at the metal-oxide interface for which there is no information and the saturation velocity of the DD model in accordance with what was stated previously. We note that the Φ_b only shifts the transconductance curves rigidly and, furthermore, the value we used is near the half gap value of the device oxide. Upon applying our method to realistic many-layer devices we got results in remarkably agreement with experimental data for both short and long gate devices. Furthermore, from our results we were able to discover the cause of the slow turn-on of some of the devices we have analyzed.

We have also analyzed the validity of the Natori formula for the drain current of such devices. This formula is one of the most advanced fully-quantum methodologies for all kinds of FETs. We have shown by comparing to experimental results and the results of our quantum corrected PSC method that the Natori formula becomes unreliable in the sub-threshold regime because it misses out the leakage current. Ways of erecting this, using our quantum corrected PSC method, are proposed, the most efficient one being the use of our full scale 2-dimensional potential from the PSC method in the Natori expression for the current instead of the simplified potentials used in compact models.

Κατάλογος Δημοσιεύσεων

- 1) **On the Applicability of the Natori Formula to Realistic Multi-Layer Quantum Well III-V FETs.** A.Gili and J.P.Xanthakis, υποβληθείσα για κρίση στο περιοδικό *Solid State Electronics* (30/1/2017).
- 2) **Poisson-Schroedinger-Continuity two-dimensional analysis of both short (ballistic) and long (drift-diffusion) III-V FETs.** A. Gili, S. Sarras and J.P. Xanthakis, *Microelectronic Engineering*, vol. 159, (2016), 221–225.
- 3) **Threshold Voltage and Sub-threshold Slope Variation with Gate-length in Al₂O₃/InAlAs/InGaAs Quantum Well (QW) FET's.** I. Tsopelas, A. Gili, J.P. Xanthakis. *Key Engineering Materials*. vol. 495 (2012) pp 112-115, doi:10.4028.

Κατάλογος Συνεδρίων

- 1) **International Semiconductor Device Research Symposium, ISDRS 2016, December 7-9, 2016, Bethesda, Maryland, USA.** Poisson-Schroedinger-Continuity Two-dimensional Analysis of both short (ballistic) and long (drift-diffusion) III-V FETs. A.Gili and J.P.Xanthakis. (Προφορική Παρουσίαση).
- 2) **6th International Conference "Micro&Nano 2015", 4-7 October 2015, Glyfada, Athens, Greece.** Ab-Initio Poisson-Schroedinger-Continuity Two-dimensional Analysis of both short (ballistic) and long (drift-diffusion) III-V FETs. A.Gili, S.Sarras and J.P.Xanthakis. (Προφορική Παρουσίαση).
- 3) **Workshop on Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits (WOCSDICE), 15-18 June, 2014, Delphi, Greece.** A fully Two-Dimensional Simulator of Quantum Well (QW) III-V FETs: Short Channel and Gate Tunneling effects. A.Gili and J.P.Xanthakis (Προφορική Παρουσίαση).
- 4) **International Semiconductor Device Research Symposium, ISDRS 2013, December 11-13, 2013, Bethesda, Maryland, USA.**
 - A fully Two-Dimensional Simulator of Quantum Well (QW) III-V FETs: Short Channel and Gate Tunneling effects. A.Gili, J.P.Xanthakis and A.Anastasopoulos.
 - A Calculation with No Fitting Parameters of the Charging Time of Metal Nanoparticles Inside Non-Volatile Memories: Effects of Voltage Pulse Duration. A. Anastasopoulos, A. Kyritsakis, A. Gili and J.P. Xanthakis.
- 5) **International Semiconductor Device Research Symposium, ISDRS 2011, December 7-9, 2011, College Park, Maryland, USA (IEEE Conference supported).** Threshold Voltage and Sub-Threshold Slope Variation with Gate-length in Al₂O₃/InAlAs/InGaAs QW FETs. A. Gili I. Tsopelas and J.P. Xanthakis

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	7
Λέξεις Κλειδιά	9
Περίληψη.....	11
Keywords.....	13
Abstract	15
Κατάλογος Δημοσιεύσεων	17
Κατάλογος Συνεδρίων.....	17
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1.....	21
1.1 Εισαγωγή.....	21
1.2 Ιδανική Δίοδος MOS	29
1.3 Τρανζίστορ MOSFET	30
1.4 Τρανζίστορες επίδρασης πεδίου κβαντικού πηγαδιού (QW FETs) από υλικά III-V	37
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2.....	43
Ηλεκτρονική Δομή και συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων σε μία, δύο και τρεις διαστάσεις 1D, 2D, 3D.	43
2.1 Θεώρημα Bloch.....	43
2.2 Ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων- Ημικλασσική Προσέγγιση.....	45
2.2.1 Γενική Περίπτωση.....	45
2.2.2 Ισοτροπική Διασπορά – Προσέγγιση Παραβολής.....	46
2.3 Πιθανότητα Κατάληψης.....	48
2.4 Πυκνότητα καταστάσεων	49
2.4.1 Στις τρεις διαστάσεις $M=3$	49
2.4.2 Σε δύο διαστάσεις $M=2$	52
2.4.3 Σε μία διάσταση $M=1$	53
2.4.4 Σε διάσταση μηδέν $M=0$	53
2.5 Πυκνότητα ηλεκτρονίων/οπών στη ζώνη αγωγιμότητας/σθένους.	55
2.7 Εξίσωση Boltzmann	59
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3.....	63
Κλασσική και Κβαντική Μεταφορά Φορτίου	63
3.1 Κλασσική Μεταφορά-Εξίσωση Ολίσθησης Διάχυσης.....	63
3.2 Η εξίσωση Poisson	65
3.3 Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών.....	67
3.3.1 Εφαρμογή των πεπερασμένων διαφορών στην εξίσωση Poisson	71
3.3.2 Εφαρμογή των πεπερασμένων διαφορών στην εξίσωση Schroedinger	77

3.3.3 Η εφαρμογή των Πεπερασμένων διαφορών στην εξίσωση Συνέχειας.....	83
3.4 Κβαντική Μεταφορά Ηλεκτρονίων.....	86
3.4.1 Η Θεωρία Landauer.....	86
3.4.2 Η αγωγιμότητα της διάταξης σε χαμηλές θερμοκρασίες - Η σχέση Landauer	90
3.4.3 Βαλλιστικό μοντέλο τρανζίστορ MOSFET σύμφωνα με τη θεωρία Kenji Natori.....	90
I. Εισαγωγή.....	90
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4.....	97
Προσομοίωση δύο διαστάσεων με επίλυση των εξισώσεων Poisson-Schroedinger-Continuity αυτοσυνεπώς σε τρανζίστορς επίδρασης πεδίου (FETs) κβαντικού πηγαδιού (QW) μεγάλου και μικρού καναλιού από υλικά III-V.....	97
4.1 Εισαγωγή.....	97
4.2 Μέθοδος	99
4.3 Αποτελέσματα Μεθόδου PSC	107
4.3.1 Αποτελέσματα για τη θεωρητική Διάταξη $L_g=65\text{nm}$	107
4.3.2 Αποτελέσματα για τη διάταξη μεγάλου καναλιού	110
4.3.3 Αποτελέσματα για τη διάταξη μικρού καναλιού $L_g=30\text{nm}$	115
4.4 Συμπεράσματα.....	118
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5.....	119
Ανάλυση σχετικά με τη δυνατότητα εφαρμογής της μαθηματικής σχέσης του Natori σε πραγματικά III-V FETs κβαντικού πηγαδιού πολλών στρωμάτων.	119
5.1 Εισαγωγή.....	119
5.2 Μέθοδος	120
5.3 Αποτελέσματα.....	122
4.4 Συμπεράσματα.....	127
Συμπεράσματα	129
Μελλοντική Εργασία.....	130
Παράρτημα.....	131
Προγράμματα	131
Αναφορές	191

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1.1 Εισαγωγή

Η επανάσταση της μικροηλεκτρονικής χαρακτηρίζεται ίσως καλύτερα από την φράση «όσο μικρότερο τόσο καλύτερο». Μοναδική συμβολή σε αυτό έχει το τρανζίστορ MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor-Field-Effect-Transistor), χρησιμοποιούμενο ευρέως στη βιομηχανία, του οποίου τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά βελτιώνονται καθώς οι διαστάσεις του μειώνονται.

Το τρανζίστορ, ωστόσο, αποτελεί έναν διακόπτη του ρεύματος και επομένως τα πιο σημαντικά χαρακτηριστικά του, που καθορίζουν και την ταχύτητα ενός επεξεργαστή είναι η ταχύτητα εναλλαγής μεταξύ των καταστάσεων «ανοιχτού» και «κλειστού» (switching) που καθορίζεται από τη συχνότητα αποκοπής f_T . Σχετικά με την υπολογιστική ισχύ ενός μικροκυκλώματος P_{chip} ισχύει:

$$P_{chip} = (V \cdot I)_{1transistor} \cdot N \cdot f_T$$

όπου N ο αριθμός των τρανζίστορ στο μικροκύκλωμα και f_T η συχνότητα αποκοπής. Σύμφωνα με την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι η μεγιστοποίηση της υπολογιστικής ισχύος απαιτεί μεγιστοποίηση της συχνότητας αποκοπής και του αριθμού των χρησιμοποιούμενων τρανζίστορς.

Η συχνότητα αποκοπής αποτελεί πολύ σημαντική παράμετρο στα μικροκυκλώματα και ορίζεται ως η μέγιστη συχνότητα στην οποία το κέρδος γίνεται ίσο με τη μονάδα. Για την γενική περίπτωση κυκλώματος ενός MESFET (βλ.Σχ.1) η συχνότητα αποκοπής f_T δίνεται από την παρακάτω σχέση [2]:

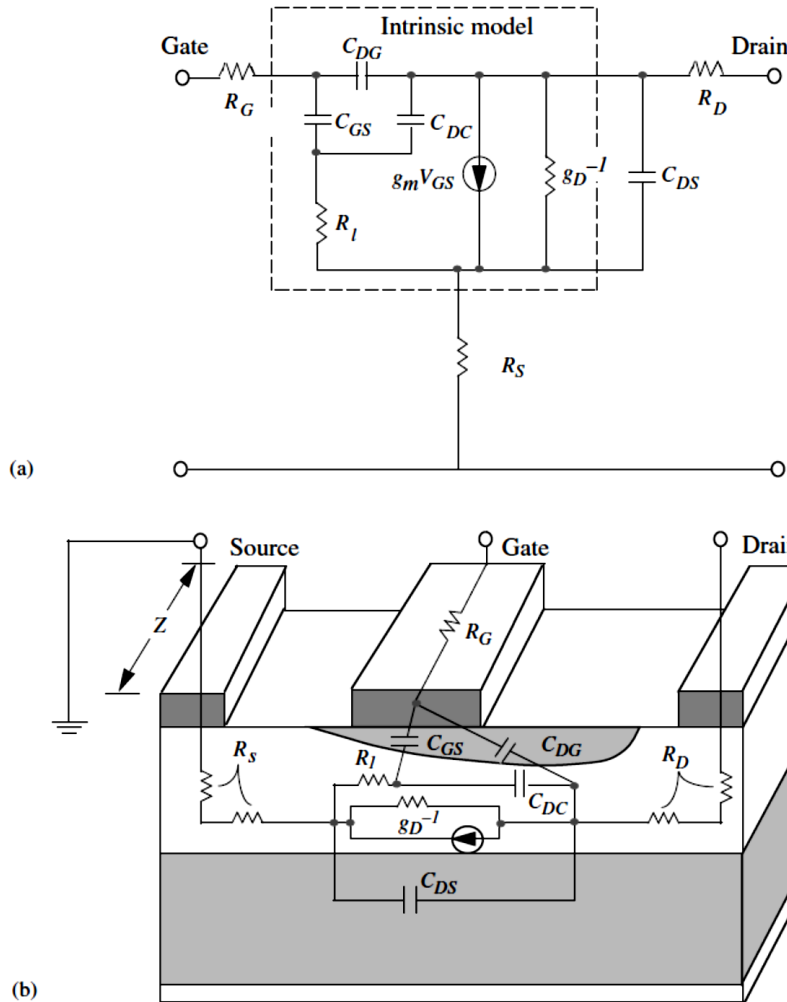
$$f_T = \frac{g_m}{2 \cdot \pi \cdot C_G} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot t_r}$$

Είναι εμφανές από την παραπάνω σχέση ότι η συχνότητα αποκοπής είναι ανάλογη του αντιστρόφου του χρόνου διέλευσης των φορέων (ηλεκτρόνια-οπές) κατά μήκος του καναλιού στη διάταξη του τρανζίστορ. Εάν υποθέσουμε ότι οι φορείς κινούνται με την ταχύτητα κόρου v_s τότε ο χρόνος διέλευσης t_r ισούται με:

$$t_r = \Delta t = \frac{L}{v_s}$$

και η συχνότητα αποκοπής γίνεται [3]:

$$f_T = \frac{v_s}{2 \cdot \pi \cdot L} < \frac{\mu_n \cdot q \cdot N_D \cdot a^2}{2 \cdot \pi \cdot \epsilon_s \cdot L^2}$$



Σχήμα 1: α) Ισοδύναμο κύκλωμα για ένα MESFET. β) Κάθετη τομή σε ένα MESFET όπου διακρίνονται τα διάφορα στοιχεία του κυκλώματος[2].

Στο σημείο αυτό προκύπτουν δύο πολύ σημαντικές παρατηρήσεις:

- 1) Για να βελτιωθεί η απόδοση υψηλής συχνότητας απαιτείται να χρησιμοποιηθούν MESFET τα οποία κατασκευάζονται από υλικά με υψηλή κινητικότητα φορέων μ_n (αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο προτιμάται στη βιομηχανία η χρήση των MESFET με κανάλι τύπου-n) και τα τρανζίστορς που χρησιμοποιούνται να έχουν μικρό μήκος πύλης L.

- 2) Επιπρόσθετα για να αυξηθεί περαιτέρω η συχνότητα αποκοπής f_T θα πρέπει να μειωθεί αρκετά το μήκος της πύλης L και να χρησιμοποιηθούν ημιαγωγοί με υλικά υψηλής ταχύτητας.

Για δεκαετίες λοιπόν οι κατασκευαστές μικροκυκλωμάτων μπορούσαν να επιταχύνουν τους μικροεπεξεργαστές απλά συρρικνώνοντας τα τρανζίστορς και «πακετάροντας» πολλά σε αριθμό σε ένα μικροκύκλωμα. Στηρίζονταν στον βασικό κανόνα ότι τα μικρότερα τρανζίστορς ανοιγοκλείνουν γρηγορότερα και καταναλώνουν λιγότερη ενέργεια στη διαδικασία. Αλλά στα τέλη του 1990 αυτός ο κανόνας ανετράπει. Όσο τα μικροκυκλώματα γίνονταν πιο πυκνά σε αριθμό τρανζίστορς η κατανάλωση ισχύος άρχισε να θέτει τα κυκλώματα στον κίνδυνο της υπερθέρμανσης.

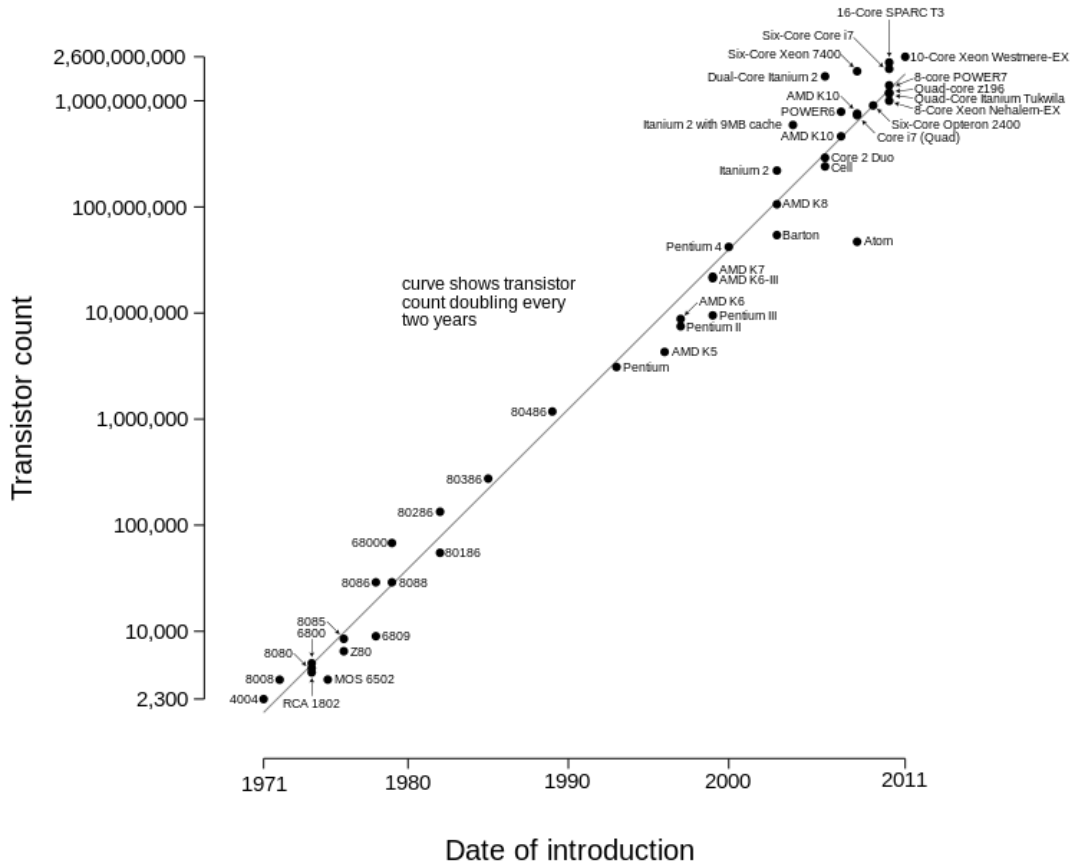
Το αποτέλεσμα είναι ότι τα τρανζίστορ δεν συρρικνώνονται πλέον με το ρυθμό που συρρικνούνταν μέχρι πρότινος. Πρόσφατα τα MOSFETs έφτασαν στο σημείο όπου η πυκνότητα ισχύος που διαχέεται αγγίζει τα 100Wcm^{-2} [1] και ουσιαστικά εισέρχονται σε μία φάση περιορισμού της κλιμάκωσης ως προς την ισχύ. Η πυκνότητα ισχύος δε δύναται να αυξηθεί πολύ παραπάνω χωρίς να υφίστανται μεγάλα κόστη στο «πακετάρισμα» και στην ψύξη των τρανζίστορς που καθιστούν τελικά τα μικροκυκλώματα σε αυτήν την περίπτωση μη πρακτικά για πολλές εφαρμογές.

Όσον αφορά στην υπερθέρμανση, ένας τρόπος για να αντιμετωπιστεί είναι να χαμηλώσει η παρεχόμενη τάση. Αυτή η μέθοδος μειώνει μεν την κατανάλωση ισχύος, αλλά σημαίνει επίσης ότι λιγότερο ρεύμα είναι διαθέσιμο για τη φόρτιση πυκνωτών στο κύκλωμα και επομένως καταλήγει στη δημιουργία πιο αργών κυκλωμάτων.

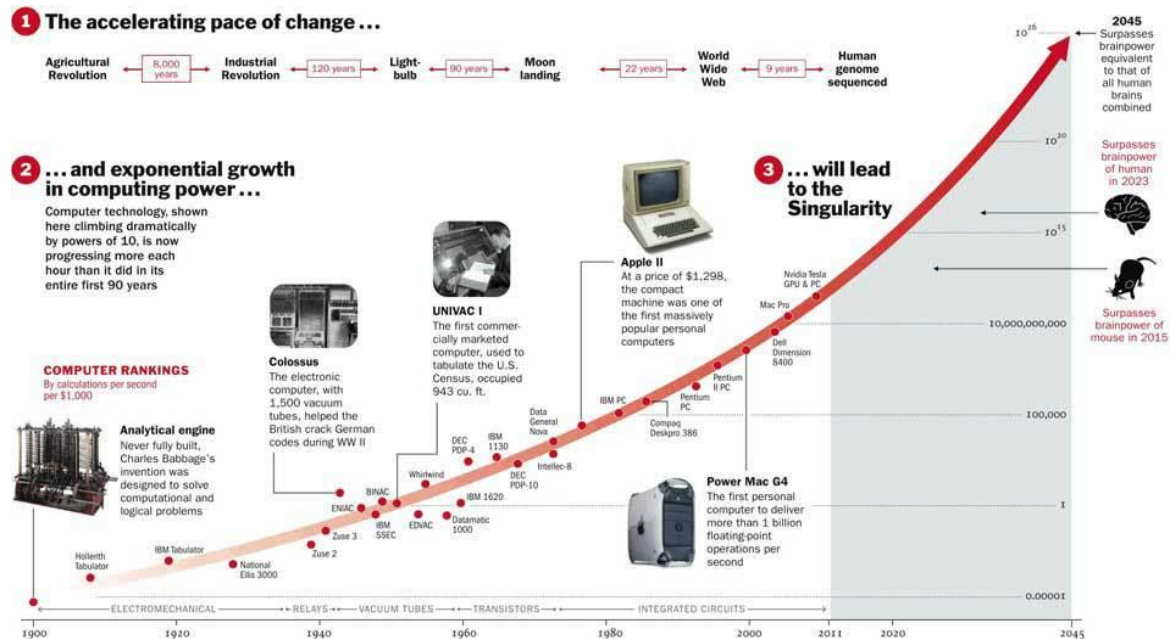
Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο η τάση λειτουργίας στα CMOS τρανζίστορς έχει παραμείνει στο 1V για αρκετό χρονικό διάστημα. Χωρίς περαιτέρω μείωση η ελαχιστοποίηση των διαστάσεων στο μέλλον μπορεί να μην είναι δυνατή.

Πρόσφατα οι κατασκευαστές μικροκυκλωμάτων (chips) οραματίζονται κάποιες αξιομνημόνευτες αλλαγές στην αρχιτεκτονική των τρανζίστορς προκειμένου να διατηρείται σε ισχύ ο νόμος του Moore (η παρατήρηση πως ο αριθμός των τρανζίστορς ενός πυκνού ολοκληρωμένου κυκλώματος διπλασιάζεται κάθε δύο χρόνια, βλ. Σχ. 2.α, 2.β). και να επιτευχθεί μείωση στην τάση λειτουργίας χωρίς όμως αυτό να έχει επίπτωση στην απόδοση.

Microprocessor Transistor Counts 1971-2011 & Moore's Law



Σχήμα 2.α. Στο διάγραμμα φαίνεται η αύξηση του αριθμού των τρανζίστορ στους επεξεργαστές των υπολογιστών με την πάροδο των χρόνων μέχρι το 2011 (Νόμος του Μούρ).[4].

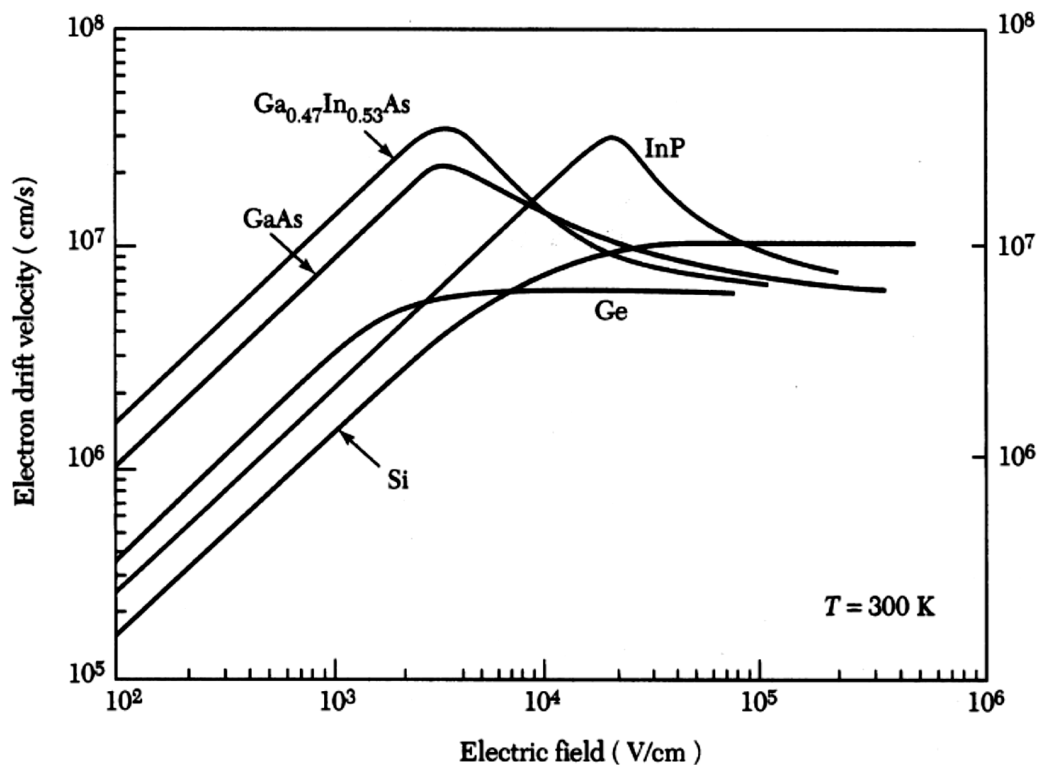


Σχήμα 2.β. Πρόβλεψη για την εξέλιξη του αριθμού των τρανζίστορ έως το 2045 [5].

Η σημασία δίνεται τώρα στο κανάλι, σε ένα τρανζίστορ, όπου και γίνεται η μεταφορά του ρεύματος και η τάση είναι να αντικατασταθεί το Πυρίτιο (Si) με Γερμάνιο (Ge) και ημιαγωγούς χημικών ενώσεων III-V. Αυτό συμβαίνει γιατί μια πιθανή λύση είναι να βρεθούν νέα υλικά που θα χρησιμοποιούνται στο κανάλι και στα οποία οι φορείς φορτίου θα μπορούν να κινούνται σε πολύ υψηλότερη ταχύτητα σε σχέση με το Si (βλ.Σχ.3). Αυτό θα επέτρεπε μία μείωση της τάσης χωρίς όμως να μειώνεται ταυτόχρονα η απόδοση. Αυτός είναι και ο λόγος που η επιστήμη έχει στραφεί στη δημιουργία σύνθετων ημιαγωγών III-V. Οι σύνθετοι ημιαγωγοί III-V όπως είναι το GaAs, AlAs, InAs, InP και τα κράματα αυτών συνδιάζουν στοιχεία από τις στήλες III και V του περιοδικού πίνακα (βλ.Πίνακα 1).

Πίνακας 1: Τμήμα Περιοδικού Πίνακα με υλικά που χρησιμοποιούνται σε Ημιαγωγούς [3].

Period	Column II	III	IV	V	VI
2		B Boron	C Carbon	N Nitrogen	O Oxygen
3	Mg Magnesium	Al Aluminum	Si Silicon	P Phosphorus	S Sulfur
4	Zn Zinc	Ga Gallium	Ge Germanium	As Arsenic	Se Selenium
5	Cd Cadmium	In Indium	Sn Tin	Sb Antimony	Te Tellurium
6	Hg Mercury		Pb Lead		



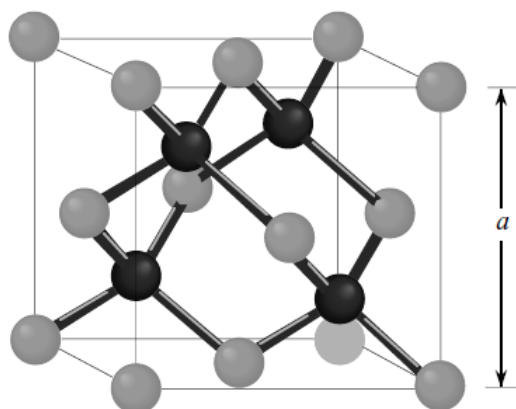
Σχήμα 3: Η ταχύτητα ολίσθησης (drift velocity) ως προς το ηλεκτρικό πεδίο για ηλεκτρόνια σε διάφορα υλικά ημιαγωγών [3].

Μερικές ενώσεις III – V έχουν μοναδικές οπτικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες. Η ικανότητά τους να εκπέμπουν αποδοτικά και να ανιχνεύουν φως είναι ο λόγος για τον οποίο χρησιμοποιούνται συχνά στα λέιζερ, σε διόδους εκπομπής φωτός και σε ανιχνευτές για οπτικές επικοινωνίες, ενορχήστρωση και σε αισθητήρες. Επιπλέον το GaAs, InGaAs και το InAs παρουσιάζουν εξαιρετικές ιδιότητες μεταφοράς ηλεκτρονίων. Τα τρανζίστορ που βασίζονται σε αυτά τα υλικά βρίσκονται σε πολλά ηλεκτρονικά συστήματα υψηλής ταχύτητας και συχνότητας.

Εάν αυτή η πολλά υποσχόμενη ιδέα αποδειχθεί λειτουργική, αυτά τα υλικά θα μπορούσαν να επιφέρουν τη δημιουργία μίας καινούργιας γενιάς ταχύτερων τρανζίστορ τα οποία καταναλώνουν λιγότερη ισχύ και επιτρέπουν τη δημιουργία πυκνότερων, ταχύτερων και εύκολα ψυχραϊνόμενων μικροκυκλωμάτων.

Ωστόσο, για την κατασκευή των νέων τρανζίστορ απαιτείται να βρεθεί ένας τρόπος ώστε να αναπτύσσονται πάνω στα στάνταρ δισκία Si της βιομηχανίας και η συγκεκριμένη διαδικασία δεν είναι απλή. Τα άτομα στα καινούρια υλικά είναι τοποθετημένα σε μεγαλύτερη απόσταση σε σχέση με το Si καθιστώντας δύσκολη τη διαδικασία ανάπτυξης του κρυστάλλου χωρίς ατέλειες.

Στο σχήμα 4 φαίνεται μία τέτοια δομή. Εάν τα δύο άτομα της βάσης είναι πανομοιότυπα, η δομή καλείται δομή διαμαντιού. Τέτοιοι ημιαγωγοί είναι το Si, Ge, C. Εάν τα άτομα είναι διαφορετικά η δομή καλείται δομή “Zinc Blende”. Ημιαγωγοί όπως GaAs, AlAs, CdS ανήκουν σε αυτήν την κατηγορία. Οι ημιαγωγοί με δομή διαμαντιού καλούνται στοιχειώδεις ενώ οι ημιαγωγοί με δομή “Zinc Blende” καλούνται σύνθετοι. Οι σύνθετοι ημιαγωγοί υποδηλώνονται επίσης από τη θέση των ατόμων στον περιοδικό πίνακα όπως για παράδειγμα οι ημιαγωγοί GaAs, AlAs, InP καλούνται III-V (τρία-πέντε «three-five») ενώ οι ημιαγωγοί όπως CdS, HgTe, CdTe, κ.τ.λ., καλούνται II-VI (δύο-έξη «two-six») ημιαγωγοί. Στο Si τα άτομα είναι τοποθετημένα σε απόσταση 0.543nm μεταξύ τους ενώ στο Ge κατά μέσο όρο στα 0.566nm και στο InGaAs ακόμα πιο μακριά στα 0.59nm. Οι διαφορές αυτές έχουν ως αποτέλεσμα τη δημιουργία ατελειών όταν αναπτύσσεται μία στοίβη από αυτά τα υλικά.



Σχήμα 4. Κρυσταλλική Δομή “zinc blende”. Η δομή αποτελείται από πλέγματα σε διάταξη fcc τα οποία αλληλοδιεισδύουν το ένα μέσα στο άλλο και αντικαθιστά το ένα το άλλο σε απόσταση $(a/4 \ a/4 \ a/4)$ κατά μήκος της κύριας διαγωνίου. Το βασικό πλέγμα Bravais είναι fcc με βάση δύο ατόμων. Οι θέσεις των δύο ατόμων είναι $(0 \ 0 \ 0)$ και $(a/4 \ a/4 \ a/4)$ [2].

Ωστόσο, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, η χρήση χαμηλότερης τάσης στον απαγωγό V_d (έλκει τους φορείς φορτίου κατά μήκος του καναλιού) για μείωση της κατανάλωσης ισχύος, καταλήγει στη δημιουργία πιο αργών κυκλωμάτων.

Πραγματικά, στα μέσα του 2000 οι ταχύτητες των επεξεργασιών φτάνουν σε ένα σημείο κόρου και η περαιτέρω αύξηση φαίνεται να μην είναι πια μια απλή διαδικασία. Οι εταιρίες αρχίζουν να επιλύουν το πρόβλημα σε επίπεδο επεξεργαστή εφευρίσκοντας και παρουσιάζοντας την ιδέα των πολλαπλών πυρήνων (multiple cores). Όμως τα προβλήματα υπερθέρμανσης επιμένουν και με κάθε αύξηση της πυκνότητας των τρανζίστορς το κλάσμα των τρανζίστορς που είναι ενεργά σε κάθε χρόνο μικραίνει.

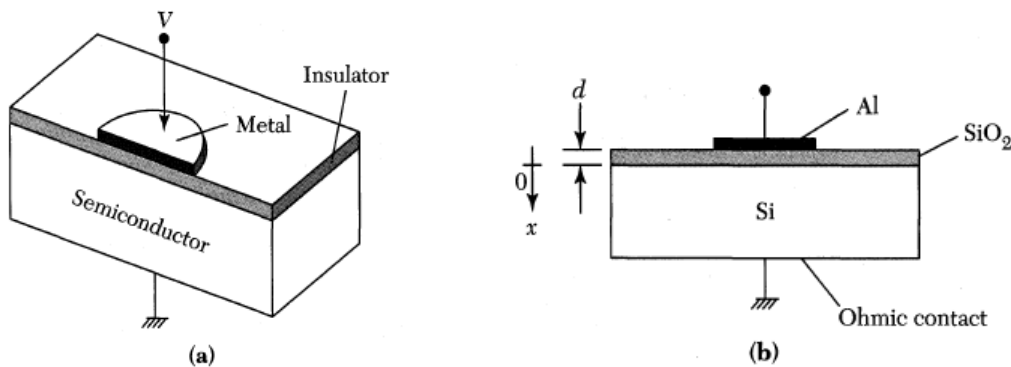
Σε αυτήν την φάση παραγωγής αρχίζουν σιγά-σιγά να δοκιμάζονται τα καινούρια υλικά. Μία μέθοδος που παρουσίασε η INTEL το 2002 ήταν να αναμίξει Si και Ge. Τα άτομα σε αυτό το κράμα είναι τοποθετημένα διαφορετικά σε σχέση με το καθαρό Si. Το είδος που προκύπτει έχει διαφορετικές κρυσταλλικές και άρα και ηλεκτρικές ιδιότητες σε σχέση με το τρανζίστορ Si και έτσι ενισχύεται η ταχύτητα με την οποία ένα ηλεκτρόνιο ή μια οπή θα μπορούσε να ταξιδεύει κατά μήκος της διάταξης. Αυτή η αύξηση στην κινητικότητα είχε ως αποτέλεσμα τη δημιουργία τρανζίστορς με ταχύτερο “switching” (δηλαδή εναλλαγή μεταξύ «ανοιχτού» και «κλειστού») τα οποία μεταφέρουν περισσότερο ρεύμα για δεδομένη τάση, γεγονός που ευνοεί και τη δημιουργία ταχύτερων κυκλωμάτων.

Στη συνέχεια οι κατασκευαστές υιοθετούν μία βασική στρατηγική προκειμένου να επιτύχουν μία δραστική αλλαγή: την ολοκληρωτική αντικατάσταση του καναλιού Si. Για τα τρανζίστορς τα οποία μεταφέρουν οπές κατά μήκος του καναλιού (positive-channel Field Effect Transistors/pFETs), ο κύριος ανταγωνιστής είναι το Ge, το οποίο μπορεί να μεταφέρει φορτίο τέσσερις φορές γρηγορότερα. Για τα τρανζίστορς τα οποία μεταφέρουν ηλεκτρόνια (negative-channel Field Effect Transistors/nFETs) και άρα η ταχύτητα εξαρτάται από την κινητικότητα των ηλεκτρονίων, ιδανικά θεωρούνται τα υλικά III-V όπως αναφέρθηκε παραπάνω. Το πιο υποσχόμενο φαίνεται να είναι το InGaAs το οποίο έχει μια κινητικότητα περίπου $10.000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$ η οποία είναι παραπάνω από έξι φορές μεγαλύτερη από την αντίστοιχη του Si.

Με τα υλικά III-V αρχίζουν να προτείνονται διάφορες διατάξεις. Μία από αυτές είναι τα τρανζίστορς κβαντικού πηγαδιού (Quantum Well FETs) των οποίων η λειτουργία στηρίζεται στη λειτουργία της διόδου MOS και στο γεγονός ότι διαφορετικές ενώσεις των στοιχείων III-V (InGaAs, InAlAs, AlAsSb κ.α.) έχουν διαφορετικό ενεργειακό διάκενο και όταν τοποθετούνται σε στοίβες και εναλλάσσονται δημιουργούνται κβαντικά πηγάδια. Άλλες διατάξεις είναι τα FET υλικών III-V διπλής ή τριπλής πύλης και να νανοσύρματα υλικών III-V τα οποία θα αναλυθούν παρακάτω. Για να γίνει όμως κατανοητή η λειτουργία των παραπάνω διατάξεων, θα αναφερθούν παρακάτω οι βασικές αρχές λειτουργίας της διόδου MOS και του τρανζίστορ MOSFET.

1.2 Ιδανική Δίοδος MOS

Η διάταξη μιας διόδου MOS (Metal-Oxide-Semiconductor) αποτελείται από μία μεταλλική επαφή (π.χ. Al) (βλ.Σχ.8) η οποία εφάπτεται σε οξείδιο πάχους d (π.χ. SiO_2) και ενώνεται με ημιαγωγό (π.χ. Si). V είναι η τάση που εφαρμόζεται στο μεταλλικό πλακίδιο.



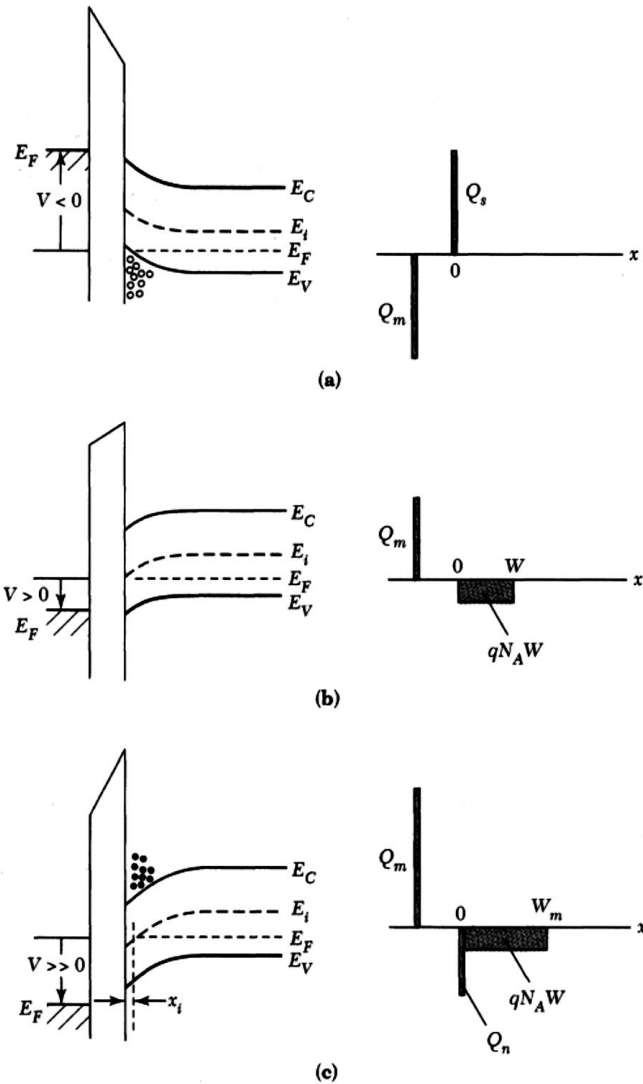
Σχήμα 8: α) Η Διάταξη μιας διόδου MOS σε προοπτική β) Διάταξη μιας διόδου MOS σε τομή [3].

Για την περίπτωση ημιαγωγού τύπου-p (π.χ. p-τύπου Si) στο παρακάτω σχήμα φαίνονται τα ενεργειακά διαγράμματα και τα φορτία για εφαρμογή αρνητικού και θετικού δυναμικού αντίστοιχα.

- Για $V < 0$ δημιουργείται μία «συσσωρευση» των φορέων-οπών στη διεπιφάνεια οξειδίου-ημιαγωγού και οι ενεργειακές ζώνες κάμπτονται προς τα πάνω. Q_s είναι το θετικό φορτίο ανα μονάδα επιφάνειας στον ημιαγωγό και Q_m είναι το αρνητικό φορτίο ανα μονάδα επιφάνειας στο μέταλλο και ισχύει $|Q_m| = Q_s$.
- Για $V > 0$ οι ενεργειακές ζώνες κάμπτονται προς τα κάτω. Οι φορείς πλειονότητας-οπές που έχουν θετικό φορτίο απωθούνται από τη διεπιφάνεια οξειδίου-ημιαγωγού και επομένως δημιουργείται μια περιοχή «απογύμνωσης-εξάντλησης» των φορέων από τη διεπιφάνεια. Το χωρικό φορτίο ανα μονάδα επιφάνειας Q_{sc} στον ημιαγωγό ισούται με $-q \cdot N_A \cdot W$ όπου W είναι το πλάτος της περιοχής πογύμνωσης.
- Για $V \gg 0$ η κάμψη των ενεργειακών ζωνών γίνεται ακόμα μεγαλύτερη. Τότε τοπικά κοντά στη διεπιφάνεια η στάθμη Fermi να φαίνεται να είναι πιο κοντά στη ζώνη αγωγιμότητας E_c και επομένως ο ημιαγωγός φαίνεται σαν να είναι τοπικά τύπου -n. Αυτό συμβαίνει γιατί για $V \gg 0$ έλκονται στη διεπιφάνεια οι φορείς μειονότητας που είναι ηλεκτρόνια και τα οποία συναθροίζονται κοντά στη διεπιφάνεια είναι περισσότερα από τις οπές και αλλάζουν τοπικά τον τύπο του ημιαγωγού από p σε n. Η κατάσταση αυτή ονομάζεται αντιστροφή. Σε αυτήν την περίπτωση

$$Q_s = Q_n + Q_{sc} = Q_n - q \cdot N_A \cdot W_m$$

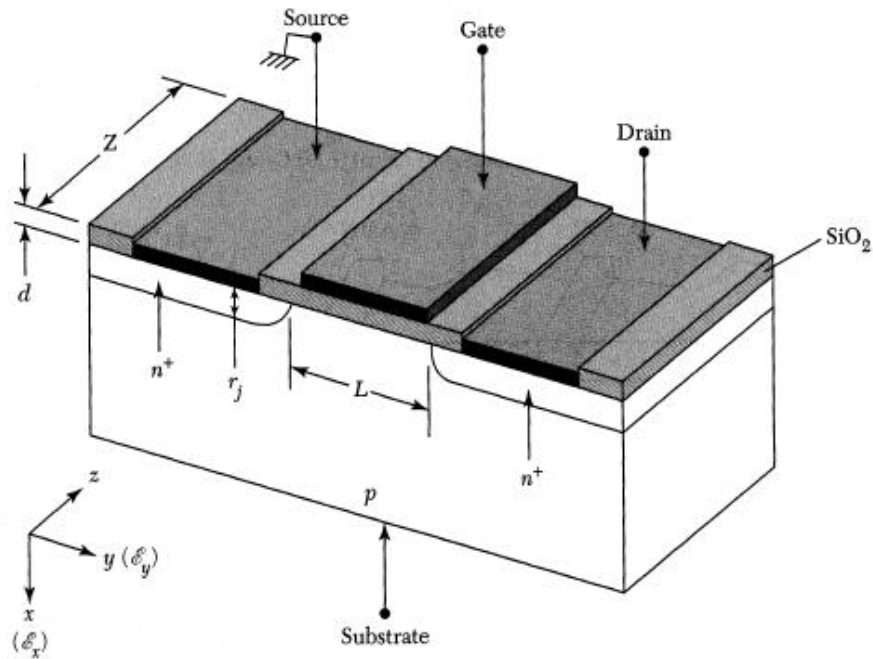
Όπου W_m είναι το μέγιστο πλάτος της περιοχής απογύμνωσης στην επιφάνεια.



Σχήμα 9: Ενεργειακά διαγράμματα ζωνών και κατανομές φορτίου για μια ιδανική δίοδο MOS σε α) συσσώρευση, β) απογύμνωση και γ) αντιστροφή [3].

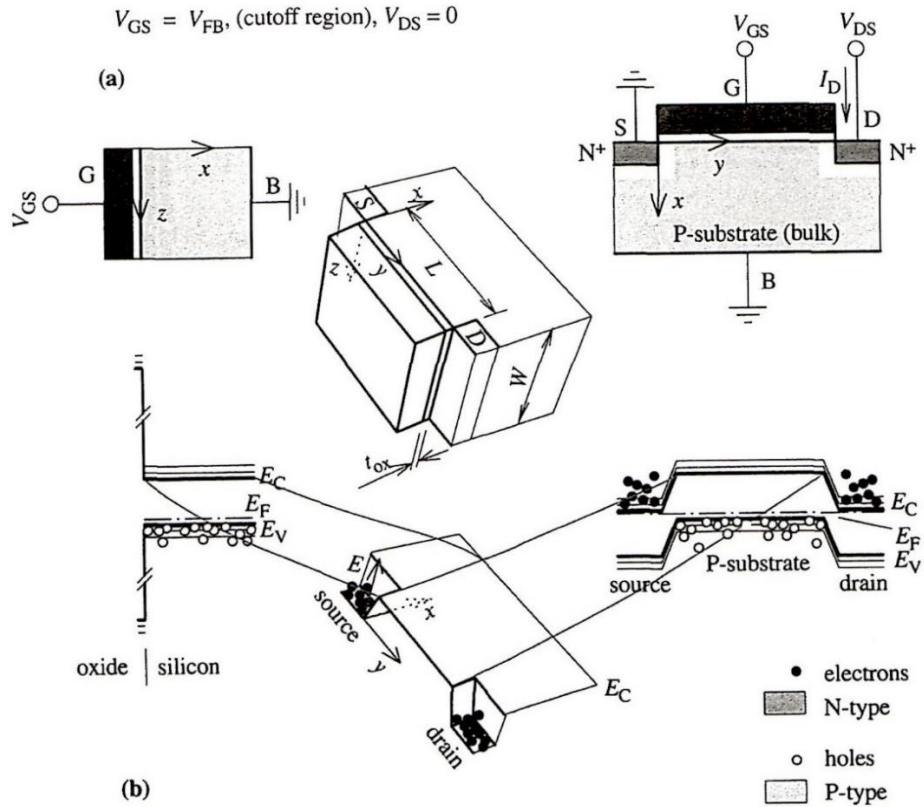
1.3 Τρανζίστορ MOSFET

Σε μια ιδανική δίοδο MOS με υπόστρωμα ημιαγωγό τύπου-p μπορούν να σχηματιστούν δύο περιοχές n^+ με την έγχυση κατάλληλων νοθεύσεων τοπικά (βλ. Σχ.10). Οι περιοχές ονομάζονται πηγή (source) και απαγωγός (drain). Στις περιοχές τοποθετούνται μεταλλικά πλακίδια και εφαρμόζεται τάση V_{ds} . Το μεταλλικό πλακίδιο πάνω στο οξείδιο καλείται πύλη (gate) και πάνω στην πύλη εφαρμόζεται τάση V_g . Η διάταξη ονομάζεται MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor-Field-Effect-Transistor). Βασικές παράμετροι είναι το κανάλι μήκους L , το οποίο είναι η απόσταση μεταξύ των δύο μεταλλικών επαφών $n^+ - p$, το πλάτος του καναλιού Z , το πάχος του οξειδίου d και η νόθευση του υποστρώματος N_A .



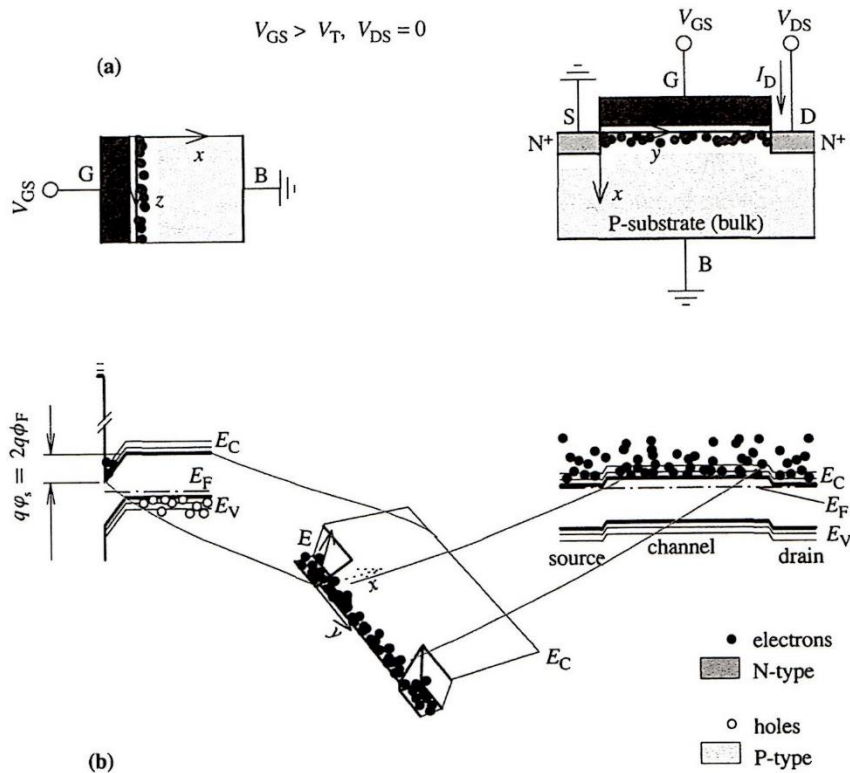
Σχήμα 10: Σχηματική αναπαράσταση διάταξης N-MOSFET [3].

Η επαφή της πηγής χρησιμοποιείται ως δυναμικό αναφοράς $E_{fsource} = 0$. Όταν δεν εφαρμόζεται δυναμικό στην πύλη $V_g = 0$, η διαδρομή από την πηγή στον απαγωγό περιλαμβάνει μία δίοδο n-p (πηγή-υπόστρωμα) και στη συνέχεια μία δίοδο p-n (υπόστρωμα-απαγωγός) (βλ.Σχ.11). Υπάρχει ένα ενεργειακό φράγμα (βλ.Σχ.11.β) το οποίο εμποδίζει τα ηλεκτρόνια να περάσουν από την πηγή στον απαγωγό. Σε αυτήν την περίπτωση, ακόμα και αν εφαρμοστεί τάση V_{ds} , δεν παράγεται ροή ηλεκτρονίων και το MOSFET θεωρείται ότι είναι στην περιοχή αποκοπής. Δεν υπάρχει επομένως ρεύμα από την πηγή στον απαγωγό. Το μόνο ρεύμα που ρέει από την πηγή στον απαγωγό είναι το ρεύμα ανάστροφης διαρροής.



Σχήμα 11: Σχηματική αναπαράσταση διάταξης N-MOSFET σε προοπτική, σε τομή και ενεργειακό διάγραμμα ζωνών για $V_g = 0$, $V_{ds} = 0$ [6].

Όταν εφαρμοστεί ένα επαρκώς μεγάλο θετικό δυναμικό $V_g > V_T \gg 0$ στην πύλη, η δίοδος MOS υπόκειται σε αντιστροφή. Το ενεργειακό φράγμα ΔE_c μεταξύ πηγής και απαγωγού χαμηλώνει (βλ.Σχ.12.β), οι φορείς μειονότητας (ηλεκτρόνια) συσσωρεύονται κάτω από την πύλη (βλ.Σχ.12.α) και το επιφανειακό φορτίο n^+ που σχηματίζεται μεταξύ των δύο περιοχών n^+ ονομάζεται κανάλι. Ωστόσο, για $V_{ds} = 0$ οι φορείς που έχουν συγκεντρωθεί δεν κινούνται και άρα δεν υπάρχει ροή ηλεκτρικού ρεύματος. Για την κίνηση των φορέων και τη δημιουργία ηλεκτρικού ρεύματος απαιτείται $V_{ds} \neq 0$.



Σχήμα 12: Σχηματική αναπαράσταση διάταξης N-MOSFET σε ισχυρή αντιστροφή σε κάθετη τομή και ενεργειακό διάγραμμα ζωνών για $V_{GS} > V_T \gg 0$, $V_{DS} = 0$ [6].

Όταν εφαρμοστεί ένα επαρκώς μεγάλο θετικό δυναμικό $V_g > V_T \gg 0$ και ταυτόχρονα $0 < V_{ds} < V_{dsat}$ το κάτω τμήμα της ζώνης αγωγιμότητας στην περιοχή του απαγωγού E_{cd} χαμηλώνει σε σχέση με το αντίστοιχο της πηγής E_{cs} (το χαμήλωμα επιτυγχάνεται με την εφαρμογή του V_{ds}), οι ενεργειακές ζώνες κάμπτονται κατά μήκος του καναλιού (βλ.Σχ.13) και τα ηλεκτρόνια στο κανάλι κυλούν προς τον απαγωγό. Σε αυτήν την περίπτωση δημιουργείται ροή ηλεκτρικού ρεύματος. Η τιμή του ηλεκτρικού ρεύματος I_{ds} εξαρτάται από την κλίση των ενεργειακών ζωνών και την πυκνότητα των φορέων στο κανάλι. Και επειδή η κλίση είναι ανάλογη του V_{ds} το ρεύμα δίνεται από τη σχέση:

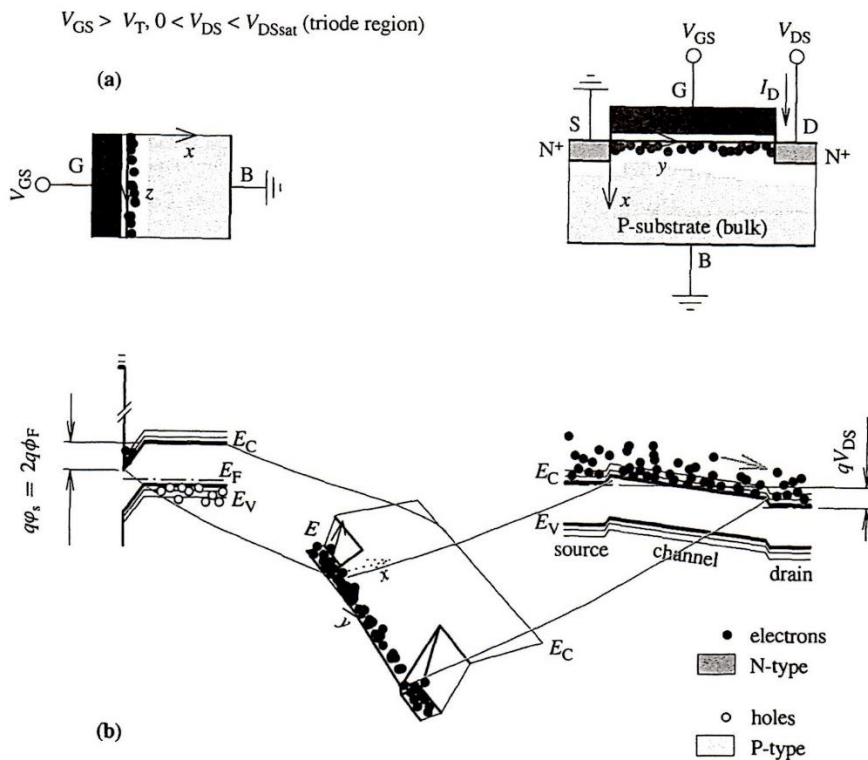
$$I_D = \beta \cdot (V_{GS} - V_T) \cdot V_{DS}$$

Όπου β είναι ένας παράγοντας αναλογίας που περιλαμβάνει την χωρητικότητα του οξειδίου C_{ox} . Από την παραπάνω εξίσωση είναι εμφανές ότι σε αυτήν την περιοχή λειτουργίας υπάρχει μία γραμμική εξάρτηση του ρεύματος από την τάση V_{DS} για μικρές τιμές της τάσης V_{DS} (βλ.Σχ.14). Γι'αυτόν τον λόγο η περιοχή αυτή λειτουργίας ονομάζεται και γραμμική περιοχή λειτουργίας. Η τάση V_{GS} η οποία χρειάζεται να

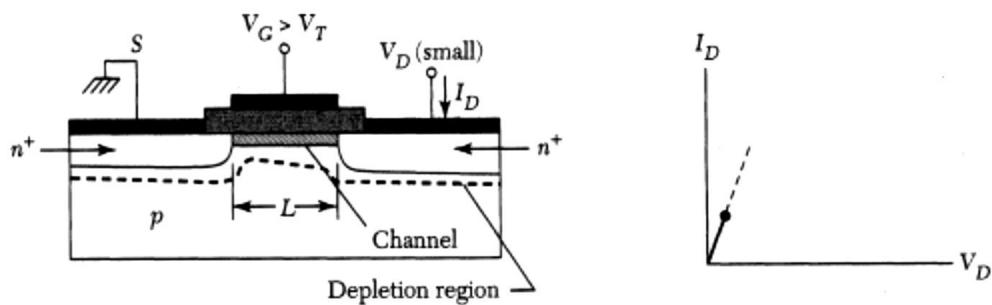
εφαρμοστεί για να φέρει το επιφανειακό δυναμικό στην κατάσταση $\phi_s \approx 2 \cdot \phi_F$ (βλ.Σχ.13) ονομάζεται τάση κατωφλίου V_T (threshold voltage) και ισούται με:

$$V_T \approx V_{FB} + 2 \cdot \Psi_B + \frac{\sqrt{2 \cdot \epsilon_s \cdot q \cdot N_A \cdot (2 \cdot \Psi_B + V_{BS})}}{C_o}$$

Όπου V_{BS} είναι το δυναμικό ανάστροφου υποστρώματος-πηγής, C_{ox} η χωρητικότητα του οξειδίου και τα υπόλοιπα σύμβολα έχουν τη συμβατική σημασία τους.

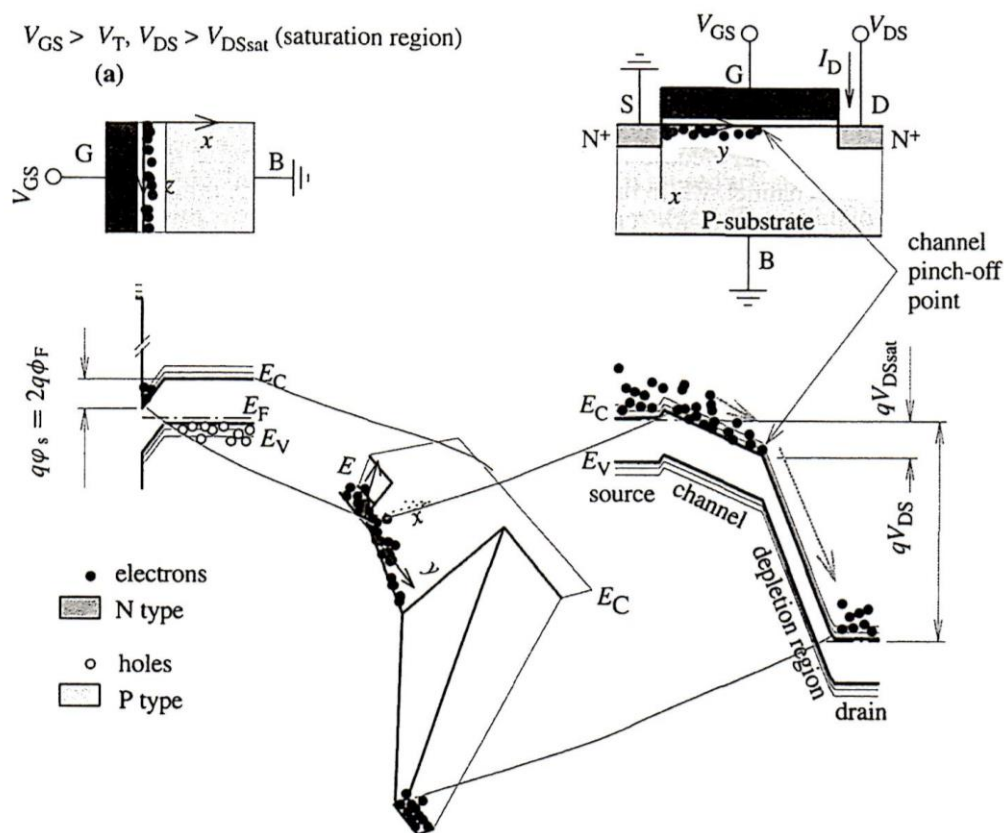


Σχήμα 13: Σχηματική αναπαράσταση διάταξης N-MOSFET και ενεργειακό διάγραμμα ζωνών στη γραμμική περιοχή λειτουργίας $V_g > V_T \gg 0$ και $0 < V_{ds} < V_{dsat}$ [6].

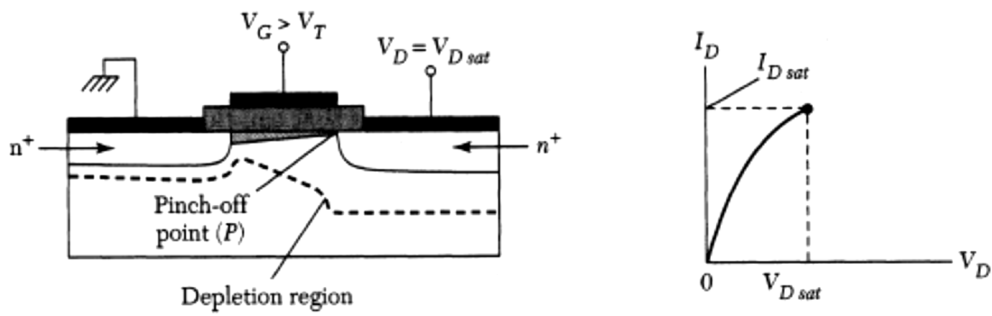


Σχήμα 14: α) Διάγραμμα τομής N-MOSFET στην γραμμική περιοχή και β) η αντίστοιχη χαρακτηριστική καμπύλη του ρεύματος ως προς την τάση V_{ds} [3].

Όταν εκτός από ένα επαρκώς μεγάλο θετικό δυναμικό $V_g > V_T \gg 0$ εφαρμοστεί ταυτόχρονα και ένα μεγάλο δυναμικό V_{ds} τότε το MOSFET βρίσκεται στην κατάσταση κόρου. Όσο αυξάνει το V_{ds} το πλευρικό πεδίο στο κανάλι αυξάνει και μπορεί να γίνει μεγαλύτερο από το κάθετο (λόγω του δυναμικού V_g) πεδίο. Αυτό θα συμβεί πρώτα στον απαγωγό. Σε αυτήν την κατάσταση το κάθετο πεδίο δεν μπορεί να κρατήσει τα ηλεκτρόνια στο τέλος του καναλιού κοντά στον απαγωγό. Το πιο δυνατό πλευρικό πεδίο τα μαζεύει αμέσως μέσα στον απαγωγό (βλ.Σχ.15). Το κανάλι σε αυτήν την περίπτωση λέμε ότι «στενεύει» (pinched off) (βλ.Σχ.16) στην άκρη του απαγωγού. Η τάση V_{ds} στην οποία συμβαίνει αυτό λέγεται τάση κόρου V_{dsat} (saturation voltage).

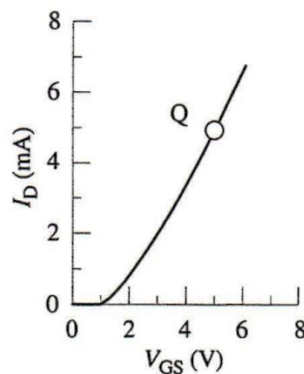
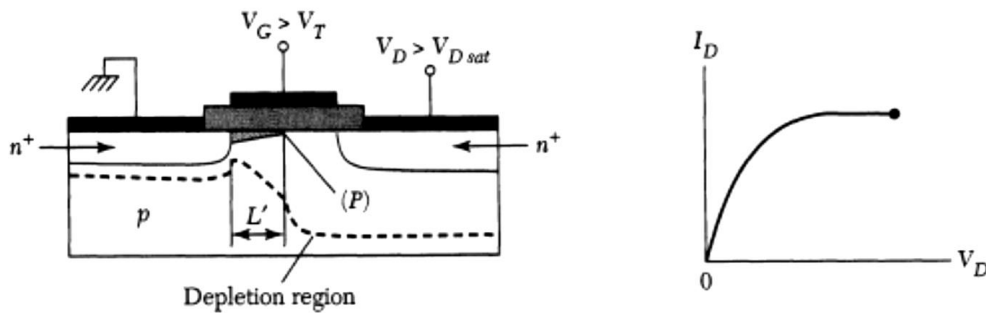


Σχήμα 15: Σχηματική αναπαράσταση διάταξης N-MOSFET και ενεργειακό διάγραμμα ζωνών στην κατάσταση κόρου $V_g > V_T \gg 0$ και $V_{ds} > V_{dsat}$ [6].



Σχήμα 16: α) Διάγραμμα τομής N-MOSFET σε κατάσταση κόρου με έμφαση στο σημείο P που το κανάλι στενεύει (pinched-off) και β) η αντίστοιχη χαρακτηριστική καμπύλη του ρεύματος ως προς την τάση V_{ds} [3].

Η περαιτέρω αύξηση του V_{ds} πάνω από την τιμή V_{dsat} διευρύνει την περιοχή στην οποία το πλευρικό πεδίο είναι πιο δυνατό από το κάθετο και μετακινεί το σημείο P (pinch-off) από το οποίο το κανάλι αρχίζει να στενεύει πιο κοντά στην πηγή (βλ. Σχ.17).



Σχήμα 17: α) Διάγραμμα τομής N-MOSFET σε κατάσταση πέρα από τον κόρο. Το σημείο P που το κανάλι στενεύει (pinched-off) μετακινείται προς την πηγή και β) η αντίστοιχη χαρακτηριστική καμπύλη του ρεύματος ως προς την τάση V_{ds} και γ) η αντίστοιχη χαρακτηριστική καμπύλη του ρεύματος ως προς την τάση V_{gs} .

Σε αυτήν την περίπτωση τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να μείνουν για πολύ χρόνο στο απότομο τμήμα της ζώνης αγωγιμότητας E_c καθώς η μεγάλη κλίση τα αναγκάζει να κατρακυλούν πολύ γρήγορα στον απαγωγό. Αυτό το τμήμα της περιοχής από την πηγή στον απαγωγό έχει επομένως μικρή αντίσταση. Η περαιτέρω αύξηση του V_{ds} πάνω από την τιμή V_{dsat} συνεχίζει να χαμηλώνει τη θέση της ζώνης αγωγιμότητας στον απαγωγό, αλλά αυτό δεν αυξάνει παραπάνω το ρεύμα I_{ds} . Φαίνεται λοιπόν ότι η ποσότητα του ρεύματος εξαρτάται από την ποσότητα των φορέων στο κανάλι πριν την πτώση στον απαγωγό και όχι από το ύψος της πτώσης ($q \cdot V_{ds} - q \cdot V_{dsat}$).

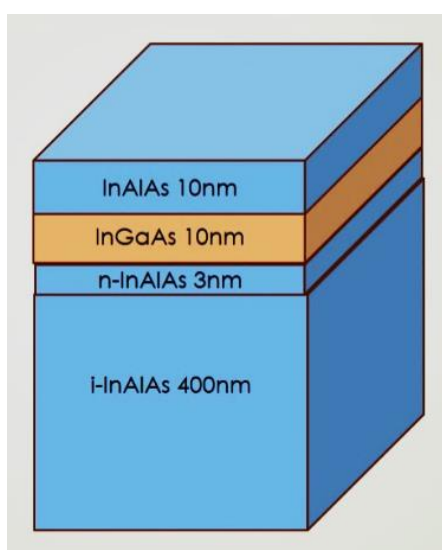
Τέλος παρατηρείται ότι η περιοχή απογύμνωσης έχει μικρή επίδραση στο ρεύμα I_{ds} και επίσης η τιμή του ρεύματος I_{ds} περιορίζεται από τον αριθμό των ηλεκτρονίων που εμφανίζονται στην άκρη της περιοχής απογύμνωσης (pinch-off point). Επιπρόσθετα ο αριθμός των ηλεκτρονίων στο κανάλι και κατά συνέπεια το σημείο που το κανάλι στενεύει (pinch-off point) ελέγχεται από την τάση της πύλης V_g και όχι από την τάση του απαγωγού V_{ds} . Επομένως το ρεύμα I_{ds} ελέγχεται από την τάση της πύλης V_g και και σύμφωνα με αυτήν την αρχή το MOSFET συμπεριφέρεται ως μία ελεγχόμενη -από μία τάση- πηγή ρεύματος. Δηλαδή ως ένας διακόπτης του ηλεκτρικού ρεύματος ανάλογα με την τάση V_g .

1.4 Τρανζίστορς επίδρασης πεδίου κβαντικού πηγαδιού (QW FETs) από υλικά III-V

Ένας τρόπος για να δημιουργηθεί ένα κβαντικό πηγάδι είναι να περιοριστούν σωματίδια τα οποία ήταν αρχικά ελεύθερα να κινούνται σε τρεις διαστάσεις, σε δύο διαστάσεις, εάν εξαναγκαστούν να καταλάβουν μία επίπεδη περιοχή. Το φαινόμενο αυτό του κβαντικού περιορισμού συμβαίνει όταν το πάχος του κβαντικού πηγαδιού γίνεται συγκρίσιμο με το μήκος κύματος de Broglie των φορέων. Τότε οι φορείς μπορούν να πάρουν μόνο διακριτές ενεργειακές τιμές και έτσι δημιουργούνται ενεργειακά επίπεδα τα οποία καλούνται ενεργειακές υπο-ζώνες.

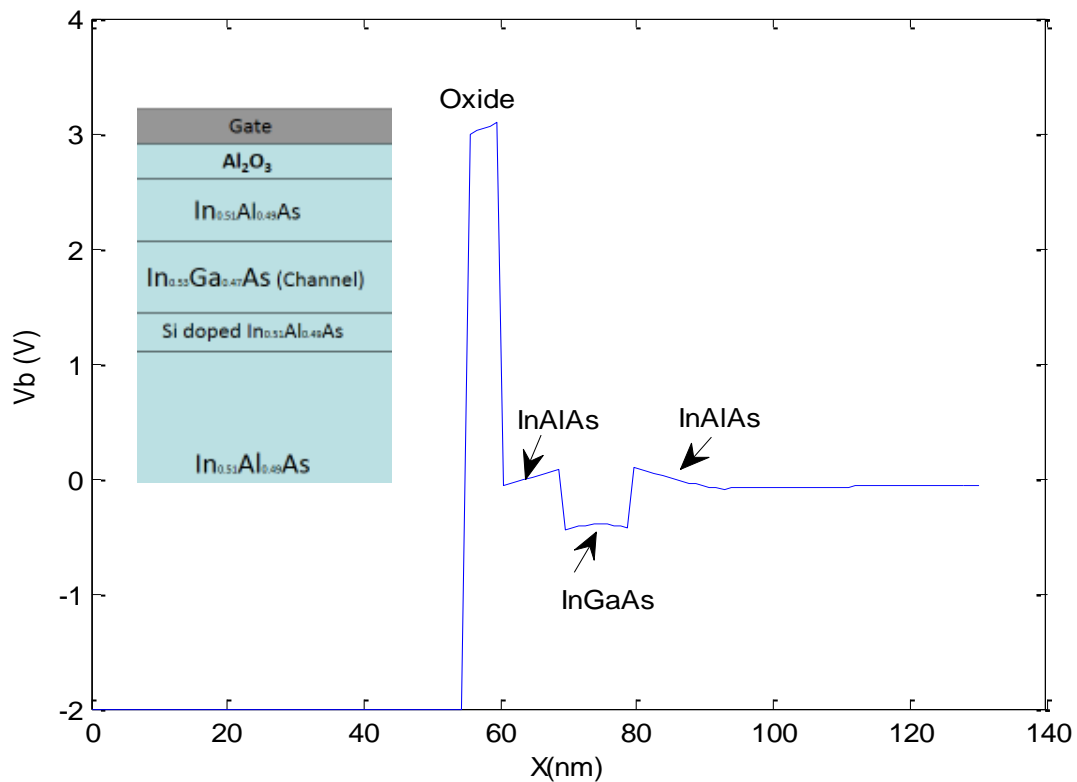
Είναι δυνατόν να σχηματιστούν κβαντικά πηγάδια σε ημιαγωγούς III-V όταν ένα υλικό, π.χ. InGaAs τοποθετείται μεταξύ δύο στρωμάτων ενός άλλου υλικού με μεγαλύτερο ενεργειακό διάκενο, π.χ. InAlAs (βλ. Σχ.18,19). Σε αυτήν την περίπτωση το κβαντικό πηγάδι είναι αποτέλεσμα των διαφορετικών ενεργειακών διακένων και σχηματίζεται με τη δημιουργία της διάταξης, σε αντίθεση με το MOSFET όπου το κβαντικό πηγάδι δημιουργείται από την εφαρμογή τάσης η οποία προκαλεί την κάμψη

των ενεργειακών ζωνών τοπικά σε επίπεδο αντιστροφής. Ηλεκτρόνια λόγω της τάσης ρέουν από το νοθευμένο N-InAlAs στρώμα στο ανόθευτο i-InGaAs. Το στρώμα-i του InGaAs είναι πολύ λεπτό (π.χ. 10nm) σε σχέση με το υπόστρωμα InAlAs (π.χ. 400nm). Εκεί τα ηλεκτρόνια εγκλωβίζονται σε δύο διαστάσεις. Η νόθευση μπορεί να τοποθετείται σε στρώμα υλικού κάτω από το κανάλι (βλ.Σχ.21.α) ή σε στρώμα υλικού πάνω από το κανάλι (βλ.Σχ.21.β). Αυτές οι δομές μπορούν να δημιουργηθούν με επιταξία μοριακής δέσμης (Molecular Beam Epitaxy) ή με εναπόθεση μέσω ατμού χημικών στοιχείων (Chemical Vapor Deposition). Με τις συγκεκριμένες μεθόδους δύναται να δημιουργηθούν πολύ λεπτά στρώματα υλικών φτάνοντας ακόμα και σε επίπεδο στρώματος με ένα μόνο άτομο (monolayer) [7].



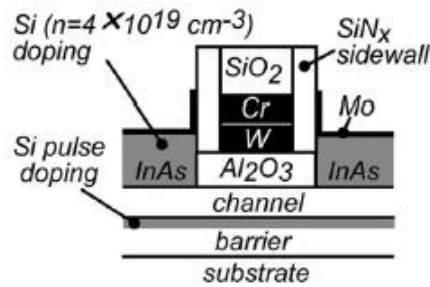
Σχήμα.18: Κβαντικά πηγάδια σχηματίζονται όταν ένα υλικό, π.χ. InGaAs τοποθετείται μεταξύ δύο στρωμάτων ενός άλλου υλικού με μεγαλύτερο ενεργειακό διάκενο, π.χ. InAlAs.

Σε αυτήν την περίπτωση οι φορείς των υλικών III-V περιορίζονται στο πηγάδι δυναμικού το οποίο δημιουργείται μεταξύ των ημιαγωγικών υλικών διαφορετικού διακένου. Αν επομένως δημιουργηθεί μία διάταξη από μία τεχνολογία CMOS στην οποία προστίθεται μία στοίβα από υλικά III-V που εναλλάσσονται, θα δημιουργηθεί ένα τρανζίστορ όπου μέσω της πύλης ελέγχεται η δημιουργία του ρεύματος και ο περιορισμός των φορέων λόγω του κβαντικού πηγαδιού ελέγχει την κατεύθυνση ροής του ώστε να μην έχουμε μεγάλα παρασιτικά ρεύματα κάτω από το κανάλι. Τα συγκεκριμένα τρανζίστορς λέγονται III-V MOSFETs ή Quantum Well FETs (QW FETs) [85], [90], [102], [105].



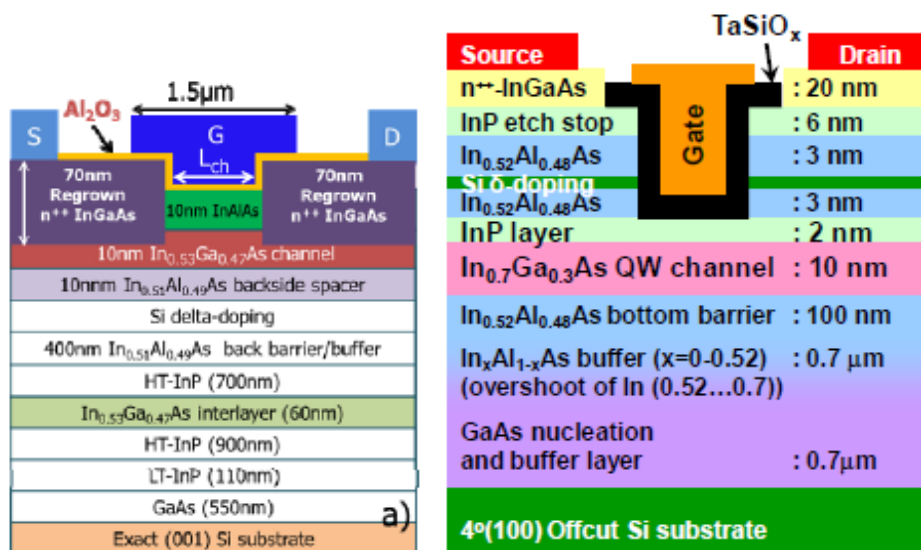
Σχήμα.19: Διάταξη CMOS III-V που δημιουργείται από μία στοίβα με υλικά III-V, InAlAs/InGaAs/InAlAs κάτω από το οξείδιο.

Μία πολύ σημαντική παράμετρος για τις διατάξεις III-V MOS είναι η κινητικότητα των φορέων στο κανάλι. Η ιδανική διάταξη στοίβας υλικών III-V όσον αφορά στην συρρίκνωση των τρανζίστορς, είναι αυτή του επιφανειακού καναλιού (surface channel) στην οποία το οξείδιο τοποθετείται ακριβώς πάνω από το κανάλι (βλ.Σχ.20). Το πρόβλημα σε αυτήν την περίπτωση είναι ότι η τραχύτητα της διεπιφάνειας και οι σκεδάσεις Coulomb που σχετίζονται με καταστάσεις της διεπαφής όπως επίσης και σκεδάσεις μεμονωμένων φωνονίων από το οξείδιο οδηγούν σε σημαντική μείωση της κινητικότητας [8-9]. Έτσι ακόμα και για συρρικνωμένες δομές InGaAs MOS με ρεαλιστικές συγκεντρώσεις επιφανειακών φορέων είναι δύσκολο να αποκτηθεί μία κινητικότητα μεγαλύτερη από $1000\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ [9].



Σχήμα.20: Διάταξη MOS III-V επιφανειακού καναλιού (κανάλι ακριβώς κάτω από το οξείδιο)[10].

Μία πιθανή λύση σε αυτό είναι η διάταξη με το «θαμμένο» κανάλι [97] (βλ.Σχ.21). Σε αυτήν την προσέγγιση ένα λεπτό στρώμα ενός ημιαγωγού με μεγαλύτερο ενεργειακό διάκενο (π.χ. InAlAs) τοποθετείται ανάμεσα στο κανάλι (π.χ. InGaAs) και στο οξείδιο (π.χ. Al₂O₃). Αυτό μετριάζει την επίδραση της τραχύτητας της διεπιφάνειας και μειώνει τις σκεδάσεις Coulomb από την φορτισμένη διεπιφάνεια και τις καταστάσεις του καθαρού οξειδίου, όπως επίσης και από τις σκεδάσεις των μεμονωμένων φωνονίων από τα φωνόνια του οξειδίου. Με τον τρόπο αυτό δύναται να αυξηθεί η κινητικότητα. Ωστόσο, η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο για όσο το φράγμα οξειδίου-ημιαγωγού αναγκάζεται να παραμένει πολύ λεπτό, ώστε να μπορέσουν να γίνουν διαχειρίσιμα τα λεγόμενα φαινόμενα «μικρού καναλιού» (short-channel effects). Αυτό περιορίζει την κινητικότητα του InGaAs σε 1000-3000cm² V⁻¹s⁻¹. Η επίδραση του συγκεκριμένου περιορισμού στην ταχύτητα έγχυσης σε πολύ μικρές διατάξεις δεν είναι ακόμα γνωστή.



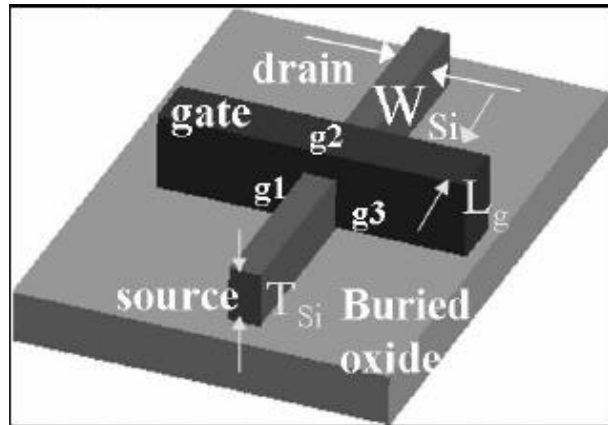
Σχήμα.21: Διατάξεις MOS III-V «θαμμένο» καναλιού (κανάλι ανάμεσα σε δύο στρώματα ημιαγωγού με μεγαλύτερο ενεργειακό διάκενο)[11][21].

Η χρήση των νέων υλικών III-V στην τεχνολογία CMOS που προαναφέρθηκε έχει νόημα μόνο στα πλαίσια που επιτρέπουν την περαιτέρω συρρίκνωση των τρανζίστορ (scaling) και δημιουργούν διατάξεις καλύτερης απόδοσης σε σχέση με άλλες εναλλακτικές. Η πρόκληση στη δημιουργία όλο και μικρότερων τρανζίστορ είναι διπλή. Πρώτον είναι σημαντικό να έχουν επαρκή ηλεκτροστατική ακεραιότητα. Αυτό σημαίνει ότι η πύλη θα πρέπει να ασκεί μεγαλύτερο ηλεκτροστατικό έλεγχο στην συγκέντρωση των ηλεκτρονίων μέσα στο κανάλι σε σχέση με τον έλεγχο στον απαγωγό. Άρα το κανάλι απαιτείται να έχει υψηλή γεωμετρική αναλογία διαστάσεων. Η δεύτερη πρόκληση είναι η διατήρηση χαμηλής παρασιτικής χωρητικότητας και αντίστασης από το ένα μέρος της διάταξης στο άλλο.

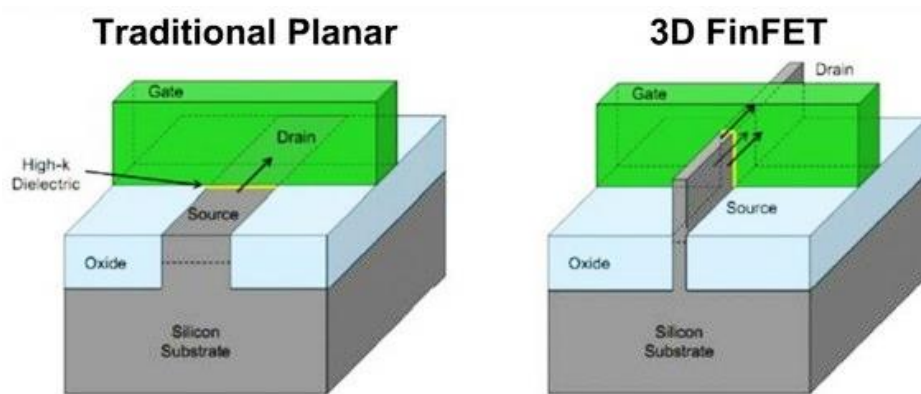
Το πιο σημαντικό, ωστόσο, για τη λειτουργία των τρανζίστορς III-V είναι η σταθερότητα και συνοχή της δομής τους με τέτοιον τρόπο ώστε να επιτυγχάνεται επαρκής έλεγχος του φορτίου του καναλιού από την πύλη, που είναι και βασική προϋπόθεση για την απότομη κλίση της υπο-κατωφλίου περιοχής (SS=Sub Threshold Swing). Σε έναν σχεδιασμό δομής με επίπεδο κβαντικό πηγάδι, αυτό απαιτεί ένα πολύ λεπτό κανάλι και ένα εξαιρετικά λεπτό φράγμα πύλης.

Εάν όμως ο επίπεδος σχεδιασμός του κβαντικού πηγαδιού αποτύχει στην ικανοποίηση βασικών απαιτήσεων, υπάρχουν εναλλακτικές δομές διατάξεων. Η Intel [13] έχει ανακοινώσει τη χρήση FET τριπλής πύλης για τη γενιά των 22nm CMOS (βλ.Σχ.22). Οι συγκεκριμένες δομές γνωστές και ως FinFETs είναι στην πραγματικότητα ένα MOSFET στο οποίο το φορτίο του καναλιού ελέγχεται ηλεκτροστατικά από μία πύλη που «τυλίγει» από τρεις διαφορετικές πλευρές ένα πολύ λεπτό κανάλι (Βλ.Σχ. 22,23).

Αυτή η προσέγγιση καταλήγει τόσο σε βελτιωμένο ηλεκτροστατικό έλεγχο όσο και σε επιτυχή προσπάθεια περαιτέρω συρρίκνωσης. Παρόμοιες διατάξεις που χρησιμοποιούν III-V ενώσεις έχουν ήδη παρουσιαστεί με βελτίωση στα «φαινόμενα μικρού καναλιού» σε σχέση με τις επιπεδες διατάξεις [14-15].



Σχήμα.22: Διάταξη N-MOS III-V τριπλής πύλης (Tri-Gate)[13].



Σχήμα.23: α) Παραδοσιακό QW FET με επίπεδο κβαντικό πηγάδι και β) FinFET-το φορτίο του καναλιού ελέγχεται ηλεκτροστατικά από μία πύλη που «τυλίγει» από τρεις διαφορετικές πλευρές ένα πολύ λεπτό κανάλι-Τριπλή Πύλη-Tri-Gate [16].

Υψηλότερη ηλεκτροστατική σταθερότητα και δυναμικό περαιτέρω συρρίκνωσης αναμένονται από διατάξεις FETs νανοσυρμάτων (nanowires). Αυτές περιλαμβάνουν μία σειρά από πολύ κοντά και λεπτά νανοςύρματα στα οποία η πύλη τυλίγεται γύρω τους. FETs με Νανοςύρματα από Πυρίτιο (Si Nanowires) έχουν μελετηθεί για κάποιο χρονικό διάστημα [17-18] και αποτελούν μία εναλλακτική CMOS τεχνολογία. Για ενώσεις III-V οριζόντια και κάθετα νανοςύρματα FETs με εκπληκτικά χαρακτηριστικά έχουν παρουσιαστεί σε ένα InAs σύστημα [19-20].

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Ηλεκτρονική Δομή και συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων σε μία, δύο και τρεις διαστάσεις 1D, 2D, 3D.

2.1 Θεώρημα Bloch

Κρυσταλλικό στερεό είναι εκείνο τα άτομα του οποίου είναι διατεταγμένα συμμετρικά στο χώρο. Μέσα στο κρυσταλλικό στερεό μπορούμε να αναγνωρίσουμε μία περιοχή η οποία επαναλαμβάνεται και ονομάζεται μοναδιαία κυψελίδα. Η μοναδιαία κυψελίδα μπορεί να αναπαραστήσει ολόκληρο το πλέγμα καθώς το πλέγμα μπορεί να «χτιστεί» με τακτικές επαναλήψεις αυτής. Η μικρότερη μοναδιαία κυψελίδα καλείται θεμελιώδης κυψελίδα του πλέγματος.

Το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό ενός ιδανικού κρυσταλλικού πλέγματος είναι η συμμετρία μεταφοράς. Η ιδιότητα δηλαδή του κρυστάλλου να μπορεί να μεταφερθεί με παράλληλη μεταφορά σε συγκεκριμένες διευθύνσεις και για συγκεκριμένες αποστάσεις. Για κάθε τρισδιάστατο πλέγμα καθορίζονται 3 θεμελιώδη διανύσματα μεταφοράς $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ έτσι ώστε η θέση κάθε σημείου του πλέγματος να δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (2.2)$$

όπου n_1, n_2, n_3 ακέραιοι.

Για έναν ιδανικό κρύσταλλο το κρυσταλλικό δυναμικό είναι περιοδικό με περίοδο αυτήν του κρυσταλλικού πλέγματος. Η περιοδικότητα του κρυσταλλικού δυναμικού εκφράζεται ως εξής:

$$W\left(\mathbf{r} + \sum_{j=1}^3 n_j \mathbf{a}_j\right) = W(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

όπου \mathbf{a}_j με $j=1,2$ και 3 είναι τα τρία διανύσματα βάσης του πλέγματος που καθορίζουν τις αρχικές μετατοπίσεις και ονομάζονται θεμελιώδη διανύσματα θέσης, \mathbf{r} είναι ένα αυθαίρετο σημείο και n_j ακέραιοι.

Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου πρέπει να ικανοποιεί την χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schroedinger:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + W(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

όπου m_0 η μάζα του ελεύθερου ηλεκτρονίου. Η εξίσωση (2.4) αγνοεί τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων και γι'αυτό η $\psi(\mathbf{r})$ συχνά καλείται κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου (*one particle wavefunction*). Η $\psi(\mathbf{r})$ έχει τη μορφή:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

όπου

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{d})} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{d}) \quad (2.6)$$

η οποία αποτελεί τη συνάρτηση **Bloch** και είναι εύκολο να αποδειχθεί ότι αποτελεί περιοδική συνάρτηση. Άρα:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{d}') = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \text{ και } \mathbf{d}' = \sum_{j=1}^3 n_j \mathbf{a}_j \quad (2.7)$$

Επομένως η χρονοανεξάρτητη κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου σε ένα κρυσταλλικό δυναμικό έχει τη μορφή επίπεδου κύματος το οποίο ακολουθεί τη συνάρτηση *Bloch* με την περιοδικότητα του πλέγματος. Το διάνυσμα \mathbf{k} αποτελεί το κυματόνυσμα των ηλεκτρονίων στον κρύσταλλο.

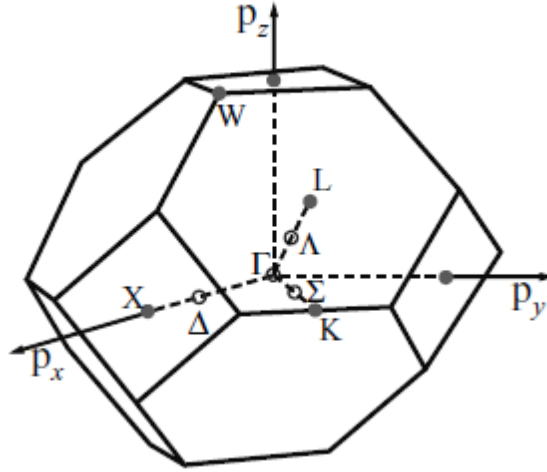
Εφαρμόζοντας συνοριακές συνθήκες στον κρύσταλλο που έχει N_j περιόδους κατά μήκος της διεύθυνσης \mathbf{a}_j :

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r} + N_j \mathbf{a}_j) &= \psi(\mathbf{r}), & N_j &\rightarrow \infty \\ \mathbf{k} \mathbf{a}_j N_j &= 2\pi n_j, & n_j &= 1, 2, 3, \dots, N_j \end{aligned}$$

Άρα οι επιτρεπόμενες τιμές του \mathbf{k} στον κρύσταλλο είναι:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi n_j}{\mathbf{a}_j N_j} = \frac{2\pi n_j}{L_j} \quad (2.8)$$

Όπου L_j το μήκος του διανύσματος \mathbf{a}_j στη διεύθυνση j . Οι επιτρεπόμενες τιμές του \mathbf{k} σχηματίζουν την πρώτη ζώνη *Brillouin* στον κρύσταλλο (βλ. Σχ.2.1).



Σχήμα 2.1: Πρώτη ζώνη Brillouin για κυβικό κρύσταλλο. Τα σημεία Γ, L και X είναι σημεία συμμετρίας.

2.2 Ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων- Ημικλαστική Προσέγγιση

2.2.1 Γενική Περίπτωση

Στην γενική περίπτωση η επιτάχυνση αποτελεί την αλλαγή στην ταχύτητα ομάδας [24] :

$$\alpha = \frac{dV_g}{dt} = \frac{d}{dt} (\nabla_k \omega(k)) = \nabla_k \frac{d\omega(k)}{dt} = \nabla_k \left(\frac{dk}{dt} \cdot \nabla_k \omega(k) \right) \quad (2.9)$$

Επίσης είναι γνωστό ότι η δύναμη είναι η μεταβολή της ορμής και ότι $p = \hbar k$

$$F = \frac{dP_{crystal}}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (2.10)$$

Με συνδυασμό των εξισώσεων (2.9) και (2.10) προκύπτει ότι:

$$a = \nabla_k \left(\frac{F}{\hbar} \cdot \nabla_k \omega(k) \right) \quad (2.11)$$

Η εξίσωση στις τρεις διαστάσεις θα είναι:

$$\alpha_i = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \omega(k)}{\partial k_i \partial k_j} \right) F_j = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \right) F_j \quad (2.12)$$

και από το δεύτερο νόμο του Νεύτωνα για την αδρανειακή μάζα γίνεται εμφανές ότι ο παράγοντας $\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j}$ αντιστοιχεί στο αντίστροφο μιας μάζας η οποία θα ονομαστεί ενεργός μάζα m^* και δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$[m^{*-1}]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \quad (2.13)$$

- Άρα στις τρεις διαστάσεις η ενεργός μάζα γίνεται τένσορας ο οποίος εκφράζει την αλλαγή στην ταχύτητα ομάδας εξαιτίας κάποιας αλλαγής στην κρυσταλλική ορμή.
- Ο τένσορας εξαρτάται από το k , κάτι το οποίο σημαίνει ότι η μάζα του σωματιδίου αλλάζει όταν εφαρμοστεί κάποιος παλμός. Η μόνη περίπτωση στην οποία δεν αλλάζει είναι αυτή των παραβολικών ζωνών η οποία θα περιγραφεί παρακάτω.
- Ο τένσορας της ενεργού μάζας αποκλίνει στην περίπτωση εξισώσεων γραμμικής διασποράς όπως για παράδειγμα είναι τα φωτόνια ή τα ηλεκτρόνια στη γραφίνη (Αυτά τα σωματίδια θεωρούνται χωρίς μάζα ηρεμίας - όχι ενεργό).

2.2.2 Ισοτροπική Διασπορά – Προσέγγιση Παραβολής

Για ισοτροπικά υλικά όπως π.χ. Ge, Si, GaAs που έχουν το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας στο $k(0,0,0)$ μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ανάπτυγμα ως προς k για την ενέργεια των ηλεκτρονίων κοντά στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας. Όπου χρησιμοποιήσαμε ότι $\frac{dE}{dk} = 0$ αφού αναπτύσσουμε γύρω από ακρότατο:

$$E(k) = E_o + \frac{dE}{dk} k + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dk^2} k^2 + \dots = E_c + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dk^2} k^2 \quad (2.14)$$

Για τις οπές αντίστοιχα στη ζώνη σθένους που έχουν το μέγιστο της ζώνης σθένους στο $k(0,0,0)$ η ενέργεια κοντά στο μέγιστο της ζώνης σθένους θα είναι:

$$E(k) = E_v - \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dk^2} k^2 \quad (2.15)$$

Οι εξισώσεις (2.14) και (2.15) με τη βοήθεια της (2.13) καταλήγουν στις εξής:

$$E_c(k) = E_c(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (2.16)$$

$$E_v(k) = E_v(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \quad (2.17)$$

Η ενέργεια $E(k)$ μπορεί, επομένως, να προσεγγιστεί τοπικά στην περιοχή του ακρότατου με μία παραβολή, όπως στην περίπτωση του ελεύθερου σωματιδίου, αρκεί η μάζα m να αντικατασταθεί από την ενεργό μάζα m^* . Στην περίπτωση των ηλεκτρονίων που βρίσκονται χαμηλά στη ζώνη αγωγιμότητας $E(k) > E_c \Rightarrow C(k) > 0$ τότε και $m^* > 0$. Άρα η ενεργός μάζα είναι μια παράμετρος η οποία συσχετίζει το κβαντομηχανικό αποτέλεσμα με τις κλασσικές εξισώσεις κίνησης. Αυτό σημαίνει ότι στις περισσότερες περιπτώσεις τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται στο κάτω τμήμα της ζώνης αγωγιμότητας μπορούν να θεωρηθούν ως κλασσικά σωματίδια των οποίων η κίνηση μπορεί να μοντελοποιηθεί από τη Νευτώνεια Μηχανική, με την προϋπόθεση ότι οι εσωτερικές δυνάμεις και κβαντομηχανικές ιδιότητες λαμβάνονται υπόψη μέσω της ενεργού μάζας. Αντίστοιχα επομένως αν εφαρμοστεί ένα ηλεκτρικό πεδίο E τότε η επιτάχυνση a μπορεί να γραφτεί:

$$a = \frac{-eE}{m^*} = m^{*-1}F \quad (2.18)$$

Σύμφωνα με την προσέγγιση ενεργού μάζας η εξίσωση Schroedinger σε μία διάσταση γράφεται ως εξής:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_n^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \cdot \varphi_n(x) = (E - E_c) \cdot \varphi_n(x) \quad (2.19)$$

Στην εξίσωση ενεργού μάζας άγνωστη ποσότητα είναι η περιβάλλουσα κυματοσυνάρτηση $\varphi_n(x)$, ενώ οι επιτρεπτές ενεργειακές στάθμες μετρώνται από το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας. Η εξίσωση ενεργού μάζας είναι ίδια με την εξίσωση Schroedinger για ελεύθερα ηλεκτρόνια με την προϋπόθεση ότι η ενεργός μάζα αντικαθιστά την πραγματική μάζα των ηλεκτρονίων. Για ένα ιστροπικό υλικό σε τρεις διαστάσεις και κοντά στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας E_c η εξίσωση ενεργού μάζας γενικεύεται:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_n^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \cdot \varphi(\mathbf{r}) = (E - E_c) \cdot \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.20)$$

Αντίστοιχα για καταστάσεις κοντά στην κορυφή της ζώνης σθένους γράφεται η εξίσωση:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_p^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \cdot \varphi(\mathbf{r}) = (E_v - E) \cdot \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

Η εξίσωση ενεργού μάζας μπορεί να γραφεί σε πιο γενική μορφή με χρήση του τελεστή ενεργού μάζας (Σχ. 2.13). Για μια ζώνη με ακρότατο στο $k=k_0$ προκύπτει:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left[\frac{1}{m^*} \right] \nabla + V(\mathbf{r}) \right) \cdot \varphi(\mathbf{r}) = (E - E(\mathbf{k}_0)) \cdot \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

Η προσέγγιση ενεργού μάζας είναι πολύ χρήσιμη στη μελέτη διατάξεων ετεροεπαφών.

2.3 Πιθανότητα Κατάληψης

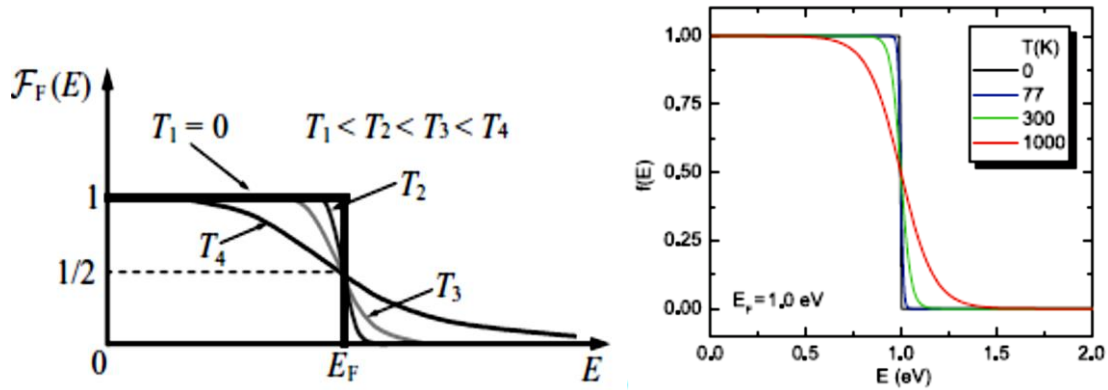
Για θερμοκρασία $T = 0^\circ C$ στους αμιγείς (καθαρούς) ημιαγωγούς η ζώνη αγωγιμότητας είναι εντελώς άδεια και η ζώνη σθένους εντελώς γεμάτη και περιέχει τόσα ηλεκτρόνια όσα ο αριθμός των κυψελίδων του ημιαγωγού επί του αριθμού των εξωτερικών ηλεκτρονίων ανά κυψελίδα.

Καθώς μεγαλώνει όμως η θερμοκρασία T υπάρχουν διεγέρσεις ηλεκτρονίων από την ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας. Όταν η θερμοκρασία $T \neq 0^\circ C$ τα ηλεκτρόνια δεν μένουν σε μία καθορισμένη ενέργεια το καθένα, αλλά μεταπηδούν από κατάσταση σε κατάσταση μένοντας μόνο κάποιο χρονικό διάστημα σε κάθε μία από αυτές. Έτσι δεν ισχύει κατ'ανάγκη ότι αν έχουμε N ηλεκτρόνια οι πρώτες (ενεργειακά) N καταστάσεις θα είναι γεμάτες και όλες οι άλλες άδειες.

Σε θερμοδυναμική ισορροπία η πιθανότητα κατάληψης μίας κατάστασης με ενέργεια E ονομάζεται κατανομή *Fermi-Dirac* και ισούται με:

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} \quad (2.23)$$

όπου k είναι η σταθερά Boltzmann, T η θερμοκρασία και E_F η στάθμη *Fermi*.



Σχήμα 2.2: Η μεταβολή της κατανομής *Fermi* για διάφορες θερμοκρασίες [25,23].

Σε υψηλές θερμοκρασίες ο πρώτος όρος κυριαρχεί γιατί είναι πολύ μεγαλύτερος της μονάδας και η κατανομή *Fermi* προσεγγίζει την κατανομή *Boltzmann*.

$$f_e(E) \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right) \approx \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) \quad (2.24)$$

Σε χαμηλές θερμοκρασίες όπου $T \rightarrow 0$ η συνάρτηση γίνεται βηματική:

$$f_e(E) = \begin{cases} 1, & \text{για } E_F > E \\ 0, & \text{για } E > E_F \end{cases} \quad (2.25)$$

Άρα σε χαμηλές θερμοκρασίες οι καταστάσεις με ενέργεια χαμηλότερη από την ενέργεια *Fermi* είναι κατειλημμένες ενώ οι καταστάσεις με ενέργεια υψηλότερη από την ενέργεια *Fermi* είναι άδειες. Στις υψηλές θερμοκρασίες υπάρχει μία πιο ομαλή μετάβαση της συνάρτησης από το 0 στο 1 και η μετάβαση αυτή διαρκεί περίπου kT γύρω από τη στάθμη *Fermi* (βλ.Σχ.2.2.α.).

2.4 Πυκνότητα καταστάσεων

2.4.1 Στις τρεις διαστάσεις $M=3$

Τα ηλεκτρόνια μπορούν να κινούνται σχετικά ελεύθερα στη ζώνη αγωγιμότητας των ημιαγωγών αλλά στον κρύσταλλο είναι περιορισμένα. Για να προσεγγιστεί ο περιορισμός θα θεωρηθεί το μοντέλο ενός ελεύθερου ηλεκτρονίου το

οποίο βρίσκεται σε ένα τρισδιάστατο άπειρο πηγάδι δυναμικού, όπου το πηγάδι δυναμικού αναπαριστά τον κρύσταλλο. Σε μία διάσταση, οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες *Born-Von Karman*:

$$\psi(0) = \psi(L)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial\psi}{\partial x} \Big|_{x=L}$$

καταλήγουν στις εξής επιτρεπόμενες τιμές για το \mathbf{k} (βλ. Σχέση 2.7):

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi n_j}{a_j N_j} = \frac{2\pi n_j}{L_j}$$

όπου $j=x$ και $n_j=1,2,3,\dots$

Η απόσταση των \mathbf{k} είναι

$$\Delta \mathbf{k}_i = \frac{2\pi(n+1)}{L} - \frac{2\pi n}{L} = \frac{2\pi}{L}$$
(2.26)

Αντίστοιχα στις τρεις διαστάσεις οι επιτρεπόμενες τιμές των k_x, k_y, k_z θα είναι:

$$\mathbf{k}_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad \mathbf{k}_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, \quad \mathbf{k}_z = \frac{2\pi n_z}{L_z}$$
(2.27)

και η ενέργεια E γίνεται:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \mathbf{k}^2$$

$$= k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \Rightarrow E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$$
(2.28)

και αντίστοιχα σε M διαστάσεις:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_{i=1}^M k_i^2$$
(2.29)

όπου το k_i παίρνει τιμές

$$\mathbf{k}_i = \pm \frac{2 \cdot n \cdot \pi}{L} \Rightarrow \Delta \mathbf{k}_i = \frac{2\pi}{L} \text{ σε κάθε διάσταση}$$
(2.30)

Επομένως ο στοιχειώδης όγκος μιας επιτρεπόμενης ιδιοκατάστασης θα είναι:

$$\Delta V_{\mathbf{k}} = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{L^3} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \quad (2.31)$$

και η πυκνότητα των ιδιοκαταστάσεων θα είναι το αντίστροφο:

$$N(\mathbf{k})_{3D} = \frac{1 \text{ ιδιοκατάσταση}}{\frac{(2\pi)^3}{\Omega}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}$$

και * 2 για το σπίν $\Rightarrow N(\mathbf{k})_{3D} = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3}$ (2.32)

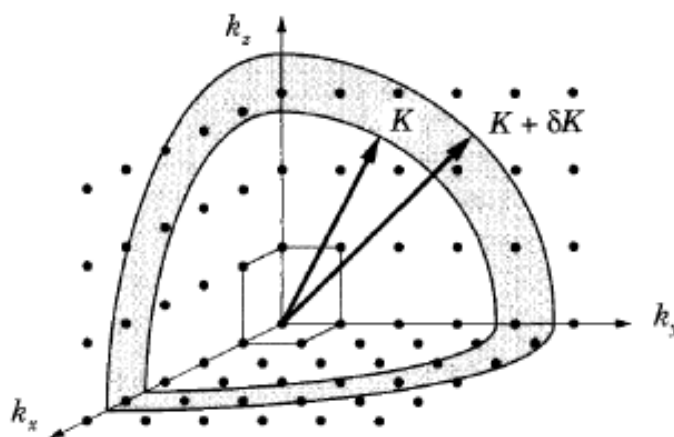
και διαιρώντας την (2.32) με τον όγκο Ω προκύπτει η πυκνότητα των ιδιοκαταστάσεων στον χώρο των \mathbf{k} ανα μονάδα όγκου:

$$\Rightarrow n_{3D}(\mathbf{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \quad (2.33)$$

Αντίστοιχα σε M διαστάσεις:

$$\Rightarrow n_{MD}(\mathbf{k}) = \frac{2}{(2\pi)^M} \quad (2.34)$$

Επιπρόσθετα έστω ότι υπάρχουν δύο σφαίρες-κυψελίδες στον χώρο των \mathbf{k} μία με ακτίνα \mathbf{k} και μία με ακτίνα $\mathbf{k}+d\mathbf{k}$ (βλ.Σχ.2.3). Ο όγκος μεταξύ των 2 σφαιρών είναι $4\pi^2 \mathbf{k} d\mathbf{k}$.



Σχήμα 2.3: Οι κυψελίδες-σφαίρες έχουν ακτίνες \mathbf{k} και $\mathbf{k}+d\mathbf{k}$ και αντίστοιχα ενέργειες E και $E+dE$ [27].

Άρα ο αριθμός των καταστάσεων μέσα στον στοιχειώδη όγκο θα είναι το γινόμενο της πυκνότητας των ιδιοκαταστάσεων ανα μονάδα όγκου $n_{3D}(\mathbf{k})$ επί τον στοιχειώδη όγκο $4\pi k^2 dk$:

$$N(\mathbf{k})_{3D} = n_{3D}(\mathbf{k}) \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{k^2 dk}{\pi^2} \quad (2.35)$$

Όμως λόγω της σχέσης (2.28):

$$dE = \frac{dE}{dk} dk = \frac{\hbar^2 k}{m} dk \quad (2.36)$$

Ο αριθμός των ιδιοκαταστάσεων μέσα στην κυψελίδα σε όρους ενέργειας θα είναι:

$$N(E)_{3D} = n_{3D}(E) dE = n_{3D}(E) \cdot \frac{\hbar^2 k}{m} dk \quad \text{όμως } N(\mathbf{k})_{3D} = \frac{k^2 dk}{\pi^2} \quad \text{απο (2.41)}$$

Άρα

$$N(E)_{3D} = N(\mathbf{k})_{3D} \Rightarrow n_{3D}(E) \cdot \frac{\hbar^2 k}{m} dk = \frac{k^2 dk}{\pi^2} \Rightarrow n_{3D}(E) = \frac{\frac{k^2 dk}{\pi^2}}{\frac{\hbar^2 k}{m} dk} = \frac{mk}{\pi^2 \hbar^2}$$

και με χρήση της (2.28) για το k:

$$n_{3D}(E) = \frac{mk}{\pi^2 \hbar^2} = \frac{m \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}{\pi^2 \hbar^2} = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2mE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \quad (2.37)$$

Η αναπαράσταση της πυκνότητας των ενεργειακών καταστάσεων σε 3 διαστάσεις συναρτήσει της ενέργειας γίνεται ευδιάκριτη στο σχήμα 2.4.α.

2.4.2 Σε δύο διαστάσεις M=2

Αυτή η περίπτωση είναι σημαντική για λεπτά στρώματα στα οποία η κίνηση των ηλεκτρονίων είναι περιορισμένη σε μία διάσταση και ελεύθερη σε ένα επίπεδο. Τέτοιες διατάξεις καλούνται κβαντικά πηγάδια (quantum wells) (βλ.Σχ.2.4.β). Η πυκνότητα των καταστάσεων είναι:

$$n_{2D}(E) = \frac{A m^*}{\pi \hbar^2} \quad (2.38)$$

όπου A η επιφάνεια του στρώματος και γίνεται εμφανές ότι η πυκνότητα είναι σταθερή.

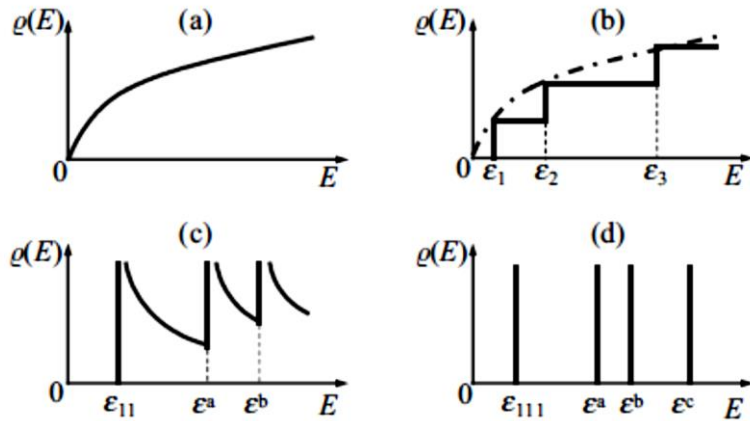
2.4.3 Σε μία διάσταση $M=1$

Η περίπτωση αυτή περιγράφει ένα κβαντικό σύρμα (quantum wire) στο οποίο η κίνηση των ηλεκτρονίων είναι περιορισμένη σε δύο διαστάσεις και ελεύθερη σε μία διάσταση (βλ.Σχ.2.4.γ). Σε αυτήν την περίπτωση για ένα σύρμα με μήκος L η πυκνότητα γίνεται μοναδική στο $E=0$ και δίνεται από τη σχέση:

$$n_{1D}(E) = \frac{L}{\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (2.39)$$

2.4.4 Σε διάσταση μηδέν $M=0$

Σε αυτήν την περίπτωση τα ηλεκτρόνια δεν έχουν βαθμούς ελευθερίας π.χ. οι κβαντικές τελείες και η κάθε κατάσταση είναι μία συνάρτηση δέλτα για πυκνότητα καταστάσεων σε κάθε κβαντισμένο επίπεδο (βλ.Σχ.2.4.δ).



Σχήμα 2.4: Η πυκνότητα των καταστάσεων $n_{MD}(E) = \rho(E)$ σε συστήματα διαφορετικών διαστάσεων α) σε αμγή κρύσταλλο β) κβαντικό πηγάδι γ) κβαντικό σύρμα και δ) κβαντική τελεία. ϵ_1 , ϵ_{11} και ϵ_{111} είναι οι πρωταρχικές ενεργειακές καταστάσεις σε κβαντικό πηγάδι, κβαντικό σύρμα και κβαντική τελεία, ϵ_2 και ϵ_3 είναι οι υψηλότερες σε κβαντικό πηγάδι, κβαντικό σύρμα και κβαντική τελεία και ϵ^a , ϵ^b , ϵ^c υψηλότερες σε κβαντικό σύρμα και κβαντική τελεία [25].

2.4.5 Γενική Περίπτωση

Στην γενική περίπτωση η πυκνότητα μιας κατάστασης είναι:

$$\rho(E) = \sum_{\nu} \delta(E - E_{\nu}) \quad (2.40)$$

όπου E_{ν} είναι η ενέργεια στην κβαντική κατάσταση ν και δ η συνάρτηση δέλτα του Dirac.

i) Στις τρεις διαστάσεις η παραπάνω σχέση γίνεται το τριπλό ολοκλήρωμα:

$$\varrho_{3D}(E) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \iiint d\mathbf{k} \delta(E - E(\mathbf{k})) \quad (2.41)$$

Με χρήση σφαιρικών συντεταγμένων:

$$\varrho_{3D}(E) = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} dk k^2 \delta(E - E(\mathbf{k})) \quad (2.42)$$

Με τροποποίηση της ολοκλήρωσης ως προς E αντί ως προς k: $E(\mathbf{k}) = \varepsilon$

$$k^2 = \frac{2m^*\varepsilon}{\hbar^2} \Rightarrow d\mathbf{k} = \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^2\varepsilon}} d\varepsilon \quad (2.43)$$

$$\varrho_{3D}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} 4\pi \int_0^{+\infty} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} \delta(E - \varepsilon) = \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{V}{\pi^2} \sqrt{2E} \quad (2.44)$$

ii) Αντίστοιχα στις δύο διαστάσεις:

$$\varrho_{2D}(E) = 2 \sum_{l_3, k_x, k_y} \delta\left(E - \varepsilon_{l_3} - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m}\right) \quad (2.45)$$

$$\varrho_{2D}(E) = \frac{m^*S}{\pi\hbar^2} \sum_{l_3} \int_0^{\infty} \delta(E - \varepsilon_{l_3} - \varepsilon) = \frac{m^*S}{\pi\hbar^2} \sum_{l_3} \Theta(E - \varepsilon_{l_3}) \quad (2.46)$$

όπου η συνάρτηση Θ είναι η συνάρτηση Heaviside:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{για } x > 0 \\ 0 & \text{για } x < 0 \end{cases}$$

iii) Σε μία διάσταση:

$$\varrho_{1D}(E) = \sum_{l_2, l_3} \varrho_{l_2, l_3}(E) \quad (2.47)$$

όπου

$$g_{l_2, l_3}(E) = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E - \varepsilon_{l_2, l_3}}} \theta(E - \varepsilon_{l_2, l_3}) \quad (2.48)$$

όπου L το μήκος του κβαντικού σύρματος.

2.5 Πυκνότητα ηλεκτρονίων/οπών στη ζώνη αγωγιμότητας/σθένους.

Οι παραπάνω εξισώσεις έχουν αναπτυχθεί για την περίπτωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων. Στη συνέχεια αναλύεται η περίπτωση των ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας και των οπών στη ζώνη σθένους. Η τρισδιάστατη πυκνότητα των καταστάσεων για τα ελεύθερα ηλεκτρόνια που δίνεται από την εξίσωση (2.37) και την οποία θα μετονομάσουμε $g_{3Dn}(E)$ σύμφωνα με τις εξισώσεις (2.16) και (2.17) θα γίνει:

$$g_{3Dn}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_C} \quad (2.49)$$

$$g_{3Dp}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - E} \quad (2.50)$$

Οπότε η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας n και των οπών στη ζώνη σθένους p θα δίνονται από τα παρακάτω ολοκληρώματα:

$$n = \int g_{3Dn}(E) \cdot f_e(E) dE \quad (2.51)$$

$$p = \int g_{3Dp}(E) \cdot f_p(E) dE \quad (2.52)$$

- I. Για πιθανότητα κατάληψης $f_e(E) = 1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)$ και αντικαθιστώντας την (2.49) στην (2.51) προκύπτει:

$$n = \int_{E_C}^{\infty} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_C} \cdot \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} dE \Rightarrow$$

$$n = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \frac{\sqrt{E - E_c}}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} dE \quad (2.53)$$

με αλλαγή μεταβλητής $\varepsilon = \frac{E-E_c}{kT}$ και θέτοντας $n_F = \frac{E_F-E_c}{kT}$

$$n = \frac{(2m^*kT)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{1 + e^{\varepsilon-n_F}} d\varepsilon \quad (2.54)$$

όπου η (2.54) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$n = N_{3D} \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}(n_F) \quad (2.55)$$

$$\text{όπου } N_c = N_{3D} = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.56)$$

ορίζεται ως N_c και ονομάζεται ενεργός πυκνότητα ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας.

Επίσης:

$$F_{1/2}(n_F) = \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{1 + e^{\varepsilon-n_F}} d\varepsilon \quad (2.57)$$

Το ολοκλήρωμα ονομάζεται *Fermi* ολοκλήρωμα τάξεως $1/2$. Το συγκεκριμένο ολοκλήρωμα υπολογίζεται μόνο αριθμητικά και η τιμή του εξαρτάται από το n_F το οποίο μετρά τη θέση της στάθμης *Fermi* ως προς την ζώνη αγωγιμότητας. Είναι πιο βολικό επιπλέον να οριστεί το παρακάτω ολοκλήρωμα:

$$\mathcal{F}_{1/2}(n_F) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{1 + e^{\varepsilon-n_F}} d\varepsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}(n_F) \quad (2.58)$$

Με τη βοήθεια του παραπάνω ολοκληρώματος η (2.55) γίνεται:

$$n = N_c \mathcal{F}_{1/2}(n_F) \quad \text{όπου} \quad n_F = \frac{E_F-E_c}{kT} \quad (2.59)$$

Αντίστοιχα για τις οπές:

$$n = N_v \mathcal{F}_{1/2}(n_F) \quad \text{όπου} \quad n_F = \frac{E_v-E_F}{kT} \quad (2.60)$$

II. Έστω ότι $E_c - E_F \gg kT$ και ότι $E_F - E_v \gg kT$. Άρα η συνάρτηση πιθανότητας Fermi γίνεται η προσέγγιση Boltzmann (Σχέση 2.24):

$$f_e(E) \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right) \approx \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)$$

Αντικαθιστώντας την (2.49) και την (2.24) στην (2.51) προκύπτει:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi}{1} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_c} \cdot \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) dE$$

με αλλαγή μεταβλητής $\varepsilon = \frac{E - E_c}{kT}$

$$n = \frac{4\pi}{1} \left(\frac{2m_e^* kT}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right) \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.61)$$

$$\text{όπου } \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (2.62)$$

Άρα η εξίσωση (2.61) γράφεται:

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right) \quad (2.63)$$

και με τη βοήθεια της (2.56) η (2.63) δίνει:

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \quad (2.64)$$

όπου N_c η ενεργός πυκνότητα ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας.

Αντίστοιχα για τις οπές προκύπτει η σχέση:

$$p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right) \quad (2.65)$$

με

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.66)$$

όπου N_v η ενεργός πυκνότητα των οπών στη ζώνη σθένους.

III. Εάν η προσέγγιση *Boltzmann* δεν μπορεί να εφαρμοστεί, π.χ. σε υψηλές θερμοκρασίες ή σε περιπτώσεις όπου το ενεργειακό διάκενο του ημιαγωγού είναι μικρό το ολοκλήρωμα *Fermi* ορίζεται ως εξής:

$$F_n(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{y^n}{1 + \exp(y - x)} dy$$

Η παραπάνω εξίσωση περιορίζεται για $n > -1$.

IV. Μία μορφή της εξίσωσης χωρίς περιορισμό είναι η παρακάτω:

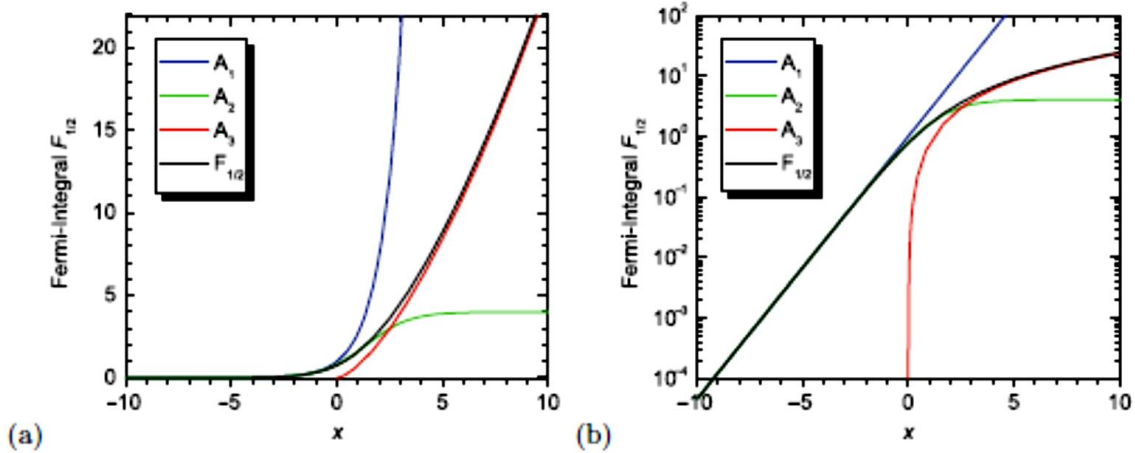
$$F_n(x) = \frac{1}{\Gamma(n + 1)} \int_0^{\infty} \frac{y^n}{1 + \exp(y - x)} dy \quad (2.67)$$

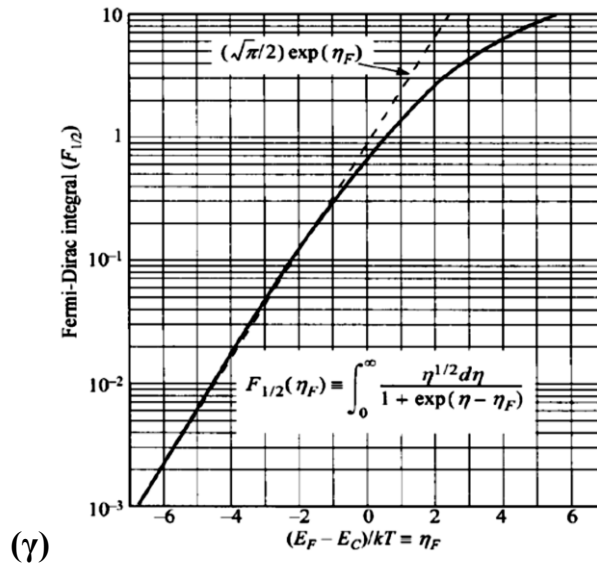
όπου ο παράγοντας $\frac{2}{\sqrt{\pi}}$ παραλείπεται αρχικά, αλλά στη συνέχεια πρέπει να προστεθεί.

Στην περίπτωση του αμιγούς ημιαγωγού $n = 1/2$ και για μεγάλα αρνητικά ορίσματα $x < 0$ και $|x| \gg 1$, $F_{1/2}(x) \cong \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp(x)$ που είναι η προσέγγιση *Boltzmann*.

$F_{1/2}(0) = 0.67809 \approx 2/3$. Για μεγάλα ορίσματα $x \gg 1$, $F_{1/2}(x) \approx 2/3 x^{3/2}$.

Τέτοιες προσεγγίσεις σε αντιδιαστολή με το ολοκλήρωμα *Fermi* φαίνονται στο Σχήμα 2.5.α,β,γ.





Σχήμα 2.5: Το ολοκλήρωμα Fermi $\mathcal{F}_{1/2}(n_F) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}(\eta_F)$ με προσεγγίσεις σε τρεις περιοχές: $A_1(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp(x)$ για $x < 2$, $A_2(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{1}{4} + \exp(-x) \right)^{-1}$ για $-2 < x < 2$, $A_3(x) = \frac{2}{3} x^{3/2}$ για $x > 2$ σε α) γραμμική κλίμακα και β), γ) σε λογαριθμική κλίμακα.

2.7 Εξίσωση Boltzmann

Η πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο σε κατάσταση με κυματόνυσμα μεταξύ \mathbf{k} και $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$ και στην χωρική τοποθεσία $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ δίνεται από τη συνάρτηση κατανομής πιθανότητας:

$$\mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{k} d\mathbf{r} \quad (2.68)$$

Σε κατάσταση ισορροπίας η (2.68) συμπίπτει με την κατανομή Fermi.

Η εξίσωση Boltzmann εκφράζει τον ρυθμό μεταβολής της συνάρτησης κατανομής πιθανότητας $\frac{d[\mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)]}{dt}$, δηλαδή τον ρυθμό μεταβολής των κατειλημμένων ενεργειακών καταστάσεων στη διαδικασία μεταφοράς. Η μεταβολή οφείλεται σε τρεις παράγοντες που είναι η ύπαρξη ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{F} με δύναμη ίση με $-e\mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$, η διάχυση και οι κρούσεις των φορέων στη διαδικασία μεταφοράς. Άρα:

$$\frac{d[\mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)]}{dt} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} \Big|_{\text{εξωτερικού πεδίου}} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} \Big|_{\text{κρούσεων}} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} \Big|_{\text{διάχυσης}} \quad (2.69)$$

Για τη σταθερή κατάσταση όπου $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = 0$:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} \Big|_{\text{εξωτερικού πεδίου}} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = -\frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{F} \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} \Big|_{\text{διάχυσης}} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{F} \quad (2.71)$$

όπου v η ταχύτητα ομάδας των ηλεκτρονίων. Οπότε η (2.68) γίνεται:

$$\frac{d[\mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)]}{dt} = -\frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{F} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} \Big|_{\text{κρούσεων}} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{F} \quad (2.72)$$

που είναι η γενική μορφή της εξίσωσης *Boltzmann*.

Η πυκνότητα του ρεύματος $j(\mathbf{r}, t)$ εκφράζεται με τη βοήθεια της συνάρτησης κατανομής πιθανότητας \mathcal{F} ως το γινόμενο του φορτίου των ηλεκτρονίων e επί την ταχύτητα των ηλεκτρονίων v και αθροιζόμενα για όλα τα ηλεκτρόνια στο χώρο των \mathbf{k} .

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -2 \frac{e}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \quad (2.73)$$

όπου ο παράγοντας 2 μετρά τον εκφυλισμό του σπίν και V είναι όγκος της αγώγιμης διάταξης.

Επίσης η συνάρτηση κατανομής \mathcal{F} μπορεί να θεωρηθεί ως το άθροισμα ενός συμμετρικού μέρους και ενός αντισυμμετρικού μέρους:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_s(\mathbf{k}, r) &= \mathcal{F}_s(-\mathbf{k}, r) \\ \mathcal{F}_a(\mathbf{k}, r) &= -\mathcal{F}_a(-\mathbf{k}, r) \end{aligned}$$

δηλαδή

$$\mathcal{F}(\mathbf{k}, r) = \mathcal{F}_s(\mathbf{k}, r) + \mathcal{F}_a(\mathbf{k}, r) \quad (2.74)$$

Αντικαθιστώντας την (2.74) στην (2.73) προκύπτει ότι το άθροισμα που περιέχει το συμμετρικό μέρος $\mathcal{F}_s(\mathbf{k}, r)$ δίνει μηδέν και επομένως το ρεύμα καθορίζεται από το αντισυμμετρικό μέρος. Άρα:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -2 \frac{e}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v} \mathcal{F}_a(\mathbf{k}, r) \quad (2.75)$$

Επιπλέον έχει υποτεθεί ότι $|\mathcal{F}_s| \gg |\mathcal{F}_a|$. Σε αυτήν την περίπτωση η εξίσωση (2.72) χωρίζεται σε δύο εξισώσεις, μία συμμετρική ως προς \mathbf{k} και μία αντισυμμετρική ως προς \mathbf{k} . Επίσης το ολοκλήρωμα για τις μη γραμμικές κρούσεις στην αντισυμμετρική συνάρτηση μπορεί να γραμμικοποιηθεί ως εξής:

$$I_{sc} \approx -\frac{\mathcal{F}_\alpha}{\tau_p} \quad (2.76)$$

όπου τ_p είναι μία συνάρτηση της ενέργειας των ηλεκτρονίων και ονομάζεται χρόνος χαλάρωσης ροπής. Σύμφωνα με τα παραπάνω η αντισυμμετρική συνάρτηση μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\mathcal{F}_\alpha = -\tau_p \left(\mathbf{v} \nabla_r \mathcal{F}_s - \frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_k \mathcal{F}_s \right) \quad (2.77)$$

Οι δύο όροι που φαίνονται στην παραπάνω εξίσωση δίνουν δύο διαφορετικές συνεισφορές στην πυκνότητα ηλεκτρικού ρεύματος.

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \quad (2.78)$$

όπου το ρεύμα \mathbf{j}_1 :

$$\mathbf{j}_1 = -\frac{2e^2}{\hbar V} \sum_k \mathbf{v} (\mathbf{F} \nabla_k \mathcal{F}_s) \tau_p \quad (2.79)$$

είναι ανάλογο του ηλεκτρικού πεδίου και ονομάζεται ρεύμα ολίσθησης. Για το ρεύμα \mathbf{j}_2 προκύπτει η παρακάτω σχέση:

$$\mathbf{j}_2 = -\frac{2e^2}{V} \sum_k \mathbf{v} (\mathbf{v} \nabla_r \mathcal{F}_s) \tau_p \quad (2.80)$$

Το ρεύμα \mathbf{j}_2 συνδέεται με την ανομοιομορφία της κατανομής των ηλεκτρονίων και καλείται ρεύμα διάχυσης.

Στο μοντέλο ηλεκτρονιακού αερίου σε τρεις διαστάσεις η άθροιση των παραπάνω σχέσεων μπορεί να μετατραπεί σε ολοκλήρωση σύμφωνα με τη σχέση:

$$\sum_k = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \quad (2.81)$$

Για ηλεκτρικό πεδίο κατά μήκος του άξονα z, έχοντας υποθέσει ότι ο χρόνος χαλάρωσης τ_p είναι μία συνάρτηση της ενέργειας των ηλεκτρονίων και χρησιμοποιώντας τη σχέση (2.81) το ρεύμα ολίσθησης \mathbf{j}_1 γίνεται:

$$j_{1z} = -e^2 \frac{2\sqrt{2m^*}}{\pi^2 \hbar^3} F_z \int_0^\infty dE E^{3/2} \tau_p(E) \frac{\partial F_s}{\partial E}$$

(2.82)

Η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων $n(r)$ υπολογίζεται από τη σχέση:

$$N = 2 \sum_n \mathcal{F}_F(E_n) \Rightarrow$$

$$\text{λόγω της (2.80)} \Rightarrow$$

$$n(r) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \mathcal{F}_s(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{m^* \sqrt{2m^*}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dE E^{1/2} \mathcal{F}_s$$
(2.83)

Επομένως η (2.82) μπορεί να ξαναγραφτεί ως εξής:

$$j_{1z} = e \mu n_e F_z$$
(2.84)

όπου η κινητικότητα μ :

$$\mu = \frac{e \langle \tau_p \rangle}{m^*}$$

και

$$\langle \tau_p \rangle = -\frac{2}{3} \frac{\int_0^\infty dE E^{3/2} \tau_p(E) \frac{\partial \mathcal{F}_s}{\partial E}}{\int_0^\infty dE E^{1/2} \mathcal{F}_s(E)}$$
(2.85)

Με παρόμοιο τρόπο ο δεύτερος όρος συνεισφοράς στο ρεύμα j_2 μπορεί να γραφτεί ως:

$$j_2 = e \nabla_r (D n_e)$$
(2.86)

όπου D η σταθερά διάχυσης ορίζεται ως εξής:

$$D = \frac{2}{3} \frac{1}{m^*} \frac{\int_0^\infty dE E^{3/2} \tau_p(E) \mathcal{F}_s(E)}{\int_0^\infty dE E^{1/2} \mathcal{F}_s(E)}$$
(2.87)

όπου η συνάρτηση \mathcal{F}_s εξαρτάται από το ηλεκτρικό πεδίο και άρα και η κινητικότητα μ και η σταθερά διάχυσης D εξαρτώνται από αυτό.

Τελικά το ηλεκτρικό ρεύμα που είναι το άθροισμα των j_1, j_2 δίνεται από τη σχέση:

$$j = e \mu n_e \mathbf{F} + e \nabla_r (D n_e)$$
(2.88)

που είναι η εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Κλασική και Κβαντική Μεταφορά Φορτίου

3.1 Κλασική Μεταφορά-Εξίσωση Ολίσθησης Διάχυσης

Κάτω από την επίδραση ενός ηλεκτρικού πεδίου τα ηλεκτρόνια επιταχύνονται σύμφωνα με την εξίσωση:

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} \Rightarrow \text{με χρήση της (2.14)} \\ \Rightarrow \mathbf{F} &= \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = q\mathbf{E} = -e\mathbf{E} \end{aligned} \quad (3.1)$$

όπου v η μέση ταχύτητα των φορέων-ηλεκτρονίων. Σε έναν πραγματικό ημιαγωγό, σε συνήθεις θερμοκρασίες, οι ατέλειες, τα φωνόνια και οι ακαθαρσίες συνεισφέρουν σε σκεδάσεις των ηλεκτρονίων. Ως χρόνος χαλάρωσης τ θεωρείται ο χρόνος που μεσολαβεί μεταξύ δύο κρούσεων, μέσα στον οποίο οι φορείς δεν σκεδάζονται. Η πιθανότητα σκέδασης έχει την έννοια της τριβής και θεωρείται ανάλογη της μέσης ταχύτητας των φορέων. Οπότε η δύναμη που ασκείται από το ηλεκτρικό πεδίο είναι:

$$\mathbf{F} = m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{m^*}{\tau} \mathbf{v} - e\mathbf{E} \quad (3.2)$$

Από τη σχέση (3.2) προκύπτει για την σταθερή κατάσταση όπου $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0$ η μέγιστη ταχύτητα ολίσθησης (drift) την οποία μπορούν να φτάσουν οι φορείς σε ένα στατικό ηλεκτρικό πεδίο είναι:

$$\mathbf{v} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m^*} = -\mu\mathbf{E} \quad (3.3)$$

όπου η παράμετρος μ καλείται κινητικότητα των ηλεκτρονίων.

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} \quad (3.4)$$

Η κινητικότητα είναι επομένως μεγαλύτερη για υλικά με μικρή ενεργό μάζα και λίγες σκεδάσεις, δηλαδή μεγαλύτερο χρόνο χαλάρωσης τ .

Σύμφωνα με τον νόμο του Ohm η πυκνότητα του ρεύματος ολίσθησης ηλεκτρονίων (drift current) ανα μονάδα επιφάνειας θα είναι:

$$J_{dr} = nqv = -\frac{ne^2\mathcal{E}\tau}{m^*} = -ne\mu\mathcal{E} \quad (3.5)$$

όπου σ η αγωγιμότητα του ημιαγωγού:

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2\tau}{m^*} \quad (3.6)$$

Μία μεταβολή στην συγκέντρωση των φορέων-ηλεκτρονίων ∇n οδηγεί στη δημιουργία ρεύματος το οποίο είναι ανάλογο της κλίσης ∇n . Η σχέση αυτή, γνωστή ως *νόμος της διάχυσης ή νόμος του Fick*, ανταποκρίνεται μικροσκοπικά σε μία τυχαία διαδρομή και περιγράφει το ρεύμα διάχυσης. Το ρεύμα διάχυσης για ηλεκτρόνια και οπές αντίστοιχα θα είναι:

$$\begin{aligned} J_{dif_n} &= eD_n\nabla n \\ J_{dif_p} &= eD_p\nabla p \end{aligned} \quad (3.7)$$

Οι σταθερές D_n, D_p ονομάζονται συντελεστές διάχυσης των ηλεκτρονίων και των οπών αντίστοιχα και δίνονται για την κατάσταση ισορροπίας όπου $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ από τη λεγόμενη σχέση του *Einstein*:

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e} \quad (3.8)$$

Επομένως το συνολικό ρεύμα σε έναν ημιαγωγό παρουσία ηλεκτρικού πεδίου \mathcal{E} και παρουσία διάχυσης ∇_n, ∇_p θα είναι:

$$\begin{aligned} J_n &= J_{drift_n} + J_{diffusion_n} = -ne\mu_n\mathcal{E} + eD_n\nabla n \\ J_p &= J_{drift_p} + J_{diffusion_p} = pe\mu_p\mathcal{E} - eD_p\nabla p \end{aligned} \quad (3.9)$$

Η παραπάνω σχέση μπορεί να εξαχθεί και από την κλίση της στάθμης *Fermi* και γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned} J_n &= -ne\mu_n\mathcal{E} - n\mu_n\nabla_{E_F} \\ J_p &= pe\mu_p\mathcal{E} - e\mu_p\nabla_{E_F} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Στην περίπτωση μη εκφυλισμού όπου η στάθμη *Fermi* είναι μέσα στο ενεργειακό διάκενο και όχι πιο κοντά από $4kT$ από τα άκρα των ζωνών η (3.9) γράφεται:

$$\begin{aligned} J_n &= -ne\mu_n \mathbf{E} + kT\mu_n \nabla_n \\ J_p &= -pe\mu_p \mathbf{E} + kT\mu_p \nabla_p \end{aligned} \quad (3.11)$$

3.2 Η εξίσωση Poisson

Οι εξισώσεις που διατυπώθηκαν από τον James Clerk Maxwell το 1864 περιγράφουν τη συμπεριφορά ηλεκτρικών και μαγνητικών πεδίων και την αλληλεπίδρασή τους με την ύλη. Σε επίπεδο συμβολισμού με τη μορφή διανυσμάτων γράφονται ως εξής:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.12)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.13)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (3.14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (3.15)$$

όπου \mathbf{E} είναι το ηλεκτρικό πεδίο, \mathbf{H} είναι το μαγνητικό πεδίο, \mathbf{B} η μαγνητική επαγωγή, \mathbf{D} η διηλεκτρική μετατόπιση, \mathbf{J} η πυκνότητα ρεύματος αγωγιμότητας και ρ η πυκνότητα του ηλεκτρικού φορτίου.

Η εξίσωση (3.12) εκφράζει την παραγωγή ηλεκτρικού πεδίου εξαιτίας της μεταβολής του μαγνητικού πεδίου (Νόμος Επαγωγής Faraday). Η εξίσωση (3.13) προβλέπει την απουσία μαγνητικών πηγών. Η εξίσωση (3.14) αντικατοπτρίζει τον τρόπο με τον οποίο το ηλεκτρικό ρεύμα και η αλλαγή του ηλεκτρικού πεδίου καταλήγουν στη δημιουργία μαγνητικού πεδίου (Νόμος Ampere-Maxwell). Τέλος, η εξίσωση (3.15) συσχετίζει τη δημιουργία ενός ηλεκτρικού πεδίου με την παρουσία ηλεκτρικών φορτίων (Νόμος του Ohm).

Επίσης το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} και η ηλεκτρική μετατόπιση \mathbf{D} συνδέονται με την παρακάτω εξίσωση:

$$\mathbf{D} = \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{E} \quad (3.16)$$

όπου $\hat{\epsilon}$ είναι ο τένσορας της ηλεκτρικής διαπερατότητας. Για υλικά που χρησιμοποιούνται κυρίως στις διατάξεις ημιαγωγών και τα οποία συνήθως δεν παρουσιάζουν ανισοτροπία της διαπερατότητας ϵ , η διαπερατότητα θεωρείται μία βαθμωτή συνάρτηση στην προσομοίωση και ισούται με το γινόμενο της σχετικής διαπερατότητας ϵ_r επί τη διαπερατότητα του κενού ϵ_0 :

$$\epsilon = \epsilon_r \cdot \epsilon_0 \quad (3.17)$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (2.85) στην (2.84) προκύπτει:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \Rightarrow \\ \nabla \cdot \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{E} &= \rho \end{aligned} \quad (3.18)$$

Επιπλέον στη σταθερή κατάσταση $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ και άρα $\mathbf{E} = -\nabla\Psi$ οπότε η (3.18) γίνεται:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \hat{\epsilon} \cdot (-\nabla\Psi) &= \rho \Rightarrow \\ \nabla \cdot \nabla\Psi &= -\frac{\rho}{\epsilon} \Rightarrow \\ \nabla^2\Psi &= -\frac{\rho}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Στους ημιαγωγούς $\rho = e(p - n + N_D^+ - N_A^-)$ όπου p, n η συγκέντρωση οπών και ηλεκτρονίων, N_D^+ , N_A^- η συγκέντρωση ιονισμένων δοτών και αποδεκτών. Οπότε η (3.19) γίνεται:

$$\nabla^2\Psi = -\frac{e}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} (p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (3.20)$$

Το δυναμικό Ψ είναι το δυναμικό λόγω του χωρικού φορτίου και της τάσης που εφαρμόζεται στη διάταξη εξωτερικά, χωρίς να συμπεριλαμβάνεται το δυναμικό των πυρήνων και των ηλεκτρονίων του ημιαγωγού. Σε ομοιογενή ημιαγωγό ισχύει ότι $N_D^+ + p = N_A^- + n$ άρα το δεύτερο μέλος είναι μηδέν και ο ημιαγωγός είναι ηλεκτρικά ουδέτερος. Σε μη ομοιογενείς ημιαγωγούς, που είναι και αυτοί που μελετώνται σε αυτή την εργασία, ο ημιαγωγός δεν είναι ηλεκτρικά ουδέτερος καθώς συμβαίνει μεταφορά φορτίου. Η μεταφορά φορτίου δίνεται από το δεξί μέλος της εξίσωσης Poisson.

Η γενική μορφή της Poisson (3.18) με τη βοήθεια της (3.17) γίνεται:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{E} &= \rho \Rightarrow \text{λόγω της 2.86} \\ \nabla \cdot (\epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{E}) &= \rho \end{aligned} \quad (3.21)$$

Εάν όμως το υλικό αλλάζει, όπως συμβαίνει στις ετεροεπαφές όπου αλλάζει απότομα η ηλεκτρική διαπερατότητα ϵ_r η (3.21) γράφεται:

$$\varepsilon_r \varepsilon_o \nabla \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \nabla(\varepsilon_r \varepsilon_o) = \rho \quad (3.22)$$

$$\text{για } \mathbf{E} = -\nabla\Psi \Rightarrow$$

$$\nabla^2\Psi = -\frac{e}{\varepsilon_r \varepsilon_o} (p - n + N_D^+ - N_A^-) - \frac{1}{\varepsilon_r \varepsilon_o} (\nabla\varepsilon_r \varepsilon_o) \cdot \nabla\Psi \quad (3.23)$$

και αποτελείται από δύο όρους από τους οποίους ο δεύτερος είναι μηδενικός για ομοιογενή διάταξη αλλά σημαντικός για ετεροεπαφές.

3.3 Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών

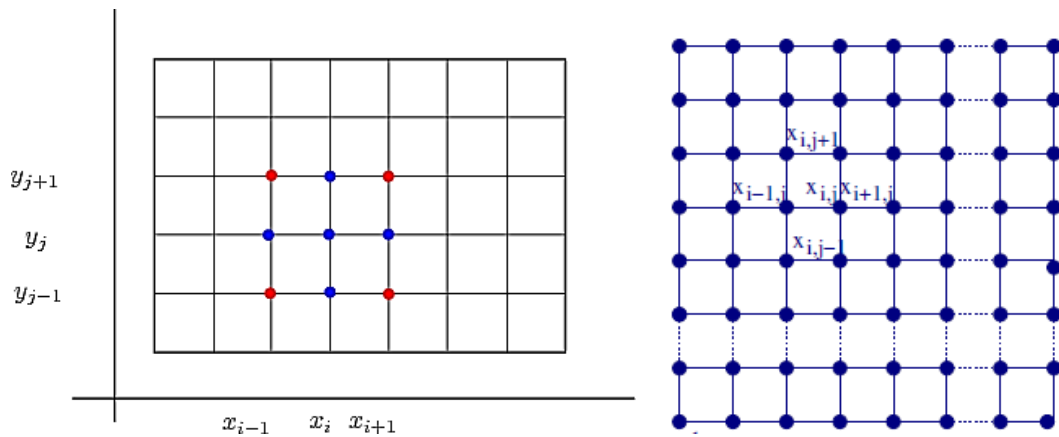
Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών είναι μία αριθμητική μέθοδος για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Στη συγκεκριμένη μέθοδο οι διαφορικές εξισώσεις προσεγγίζονται με εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών (γραμμικοί συνδιασμοί των τιμών της συνάρτησης) στα σημεία του πλέγματος, οι οποίες προσεγγίζουν τις αντίστοιχες παραγώγους. Σύμφωνα με τα παραπάνω, η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών αποτελεί μία μέθοδο διακριτοποίησης ενός αριθμητικού προβλήματος και πλέον τον κυρίαρχο τρόπο προσέγγισης στην αριθμητική επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών χρησιμοποιείται συχνά στη διακριτοποίηση των εξισώσεων για ημιαγωγούς σε προγράμματα προσομοίωσης [70-75] [101]. Στη συγκεκριμένη εργασία γίνεται χρήση της μεθόδου για την επίλυση του συστήματος των εξισώσεων Poisson-Schrodinger-Continuity (PSC) αυτοσυνεπώς. Ο κώδικας κατασκευάζεται σε Matlab.

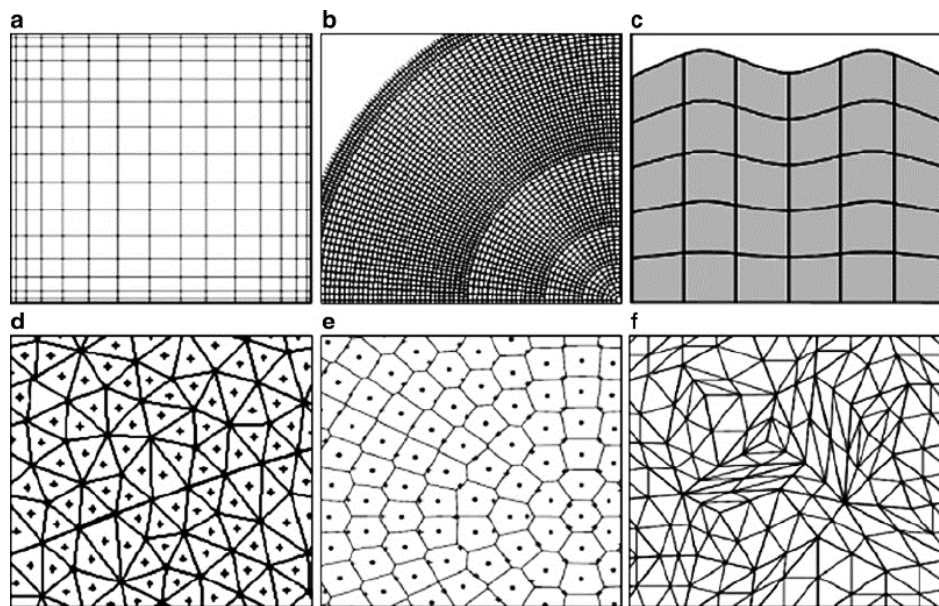
Η περιοχή της προσομοίωσης (simulation domain) μπορεί να εκτείνεται σε μία, δύο ή τρεις διαστάσεις. Η προσομοίωση σε μία διάσταση χρησιμοποιείται σε αρκετά συμπαγή μοντέλα. Αν και είναι πολύ πιο γρήγορη, δεν προβλέπει την εμφάνιση φαινομένων μικρού διαύλου (short-channel effects). Σε αντίθεση, η τρισδιάστατη προσομοίωση απαιτεί μεγάλο χρόνο υπολογισμού και αρκετή μνήμη. Ωστόσο, η θεώρηση σε ένα FET ότι το μήκος της πύλης είναι πολύ μικρότερο από το πλάτος ($L_G \ll W_G$) επιτρέπει την προσομοίωση δύο διαστάσεων με ικανοποιητική προσέγγιση.

Το πεδίο προσομοίωσης επιλέγεται ώστε να περιγράφεται η διάταξη με τρόπο επαρκή και με τη λιγότερο δυνατή υπολογιστική επιβάρυνση. Στο πεδίο προσομοίωσης ορίζεται ένα ορθογώνιο πλέγμα. Ο χώρος χωρίζεται σε μικρές περιοχές οι οποίες οριοθετούνται από κάποια σημεία, τα σημεία του πλέγματος. Κάθετες και οριζόντιες

γραμμές μεταξύ των σημείων σχηματίζουν τις αντίστοιχες μικρές περιοχές. Σε κάθε σημείο (i,j) αντιστοιχεί μία πυκνότητα ηλεκτρονίων n και ένα δυναμικό Ψ . Όσο πιο πυκνό πλέγμα επιλέγεται τόσο αυξάνει η ακρίβεια υπολογισμού των παραμέτρων αλλά ταυτόχρονα και η υπολογιστή επιβάρυνση. Τα πλέγματα που επιλέγονται ανάλογα με τη γεωμετρία και την πολυπλοκότητα της διάταξης μπορεί να είναι ομοιόμορφα ορθογώνια (βλ.Σχ.3.1) ή ανομοιόμορφα (βλ.Σχ.3.2). Τα ομοιόμορφα ορθογώνια πλέγματα χαρακτηρίζονται από ίσες αποστάσεις στους άξονες x,y (βλ.Σχ.3.1). Σε αντίθεση, στα ανομοιόμορφα πλέγματα δεν υπάρχει συμμετρία. Τα πλέγματα μπορεί να είναι ορθογώνια ανομοιόμορφα (βλ.Σχ.3.2.α), σε σφαιρικές συντεταγμένες (βλ.Σχ.3.2.β), καμπτόμενα (βλ.Σχ.3.2.γ), τριγωνικά (βλ.Σχ.3.2.δ και ζ) και σε δομή κυψέλης (βλ.Σχ.3.2.ε).



Σχήμα 3.1: Ομοιόμορφο πλέγμα σε δυδιάστατο χώρο με ίσες αποστάσεις στους άξονες x,y .



Σχήμα 3.2: Ανομοιόμορφα πλέγματα σε δυδιάστατο χώρο. α) Τα πλέγματα μπορεί να είναι ορθογώνια ανομοιόμορφα β) σε σφαιρικές συντεταγμένες γ) καμπτόμενα δ,ζ) τριγωνικά και ε) σε δομή κυψέλης [63].

Στα ομοιόμορφα πλέγματα οι συντεταγμένες ενός σημείου (i, j) δίνονται από τις σχέσεις:

$$x_i = (i - 1)\Delta x \quad y_i = (j - 1)\Delta y \quad (3.24)$$

Στα ανομοιόμορφα:

$$ax_i = x_{i+1} - x_i \quad ay_i = y_{i+1} - y_i \quad (3.25)$$

Υπάρχουν διάφοροι τρόποι σχηματισμού διαφορών. Ο πρώτος τρόπος είναι οι προηγούμενες διαφορές. Οι προηγούμενες διαφορές οποιασδήποτε τάξης εκφράζονται με τιμές στο σημείο i και σε σημεία προηγούμενα αυτού, δηλαδή σε σημεία με τετμημένη μικρότερη της τετμημένης u_i ($\Delta u_i = u_i - u_{i-1}$) (βλ.Σχ.3.3). Δηλαδή:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \quad (3.26)$$

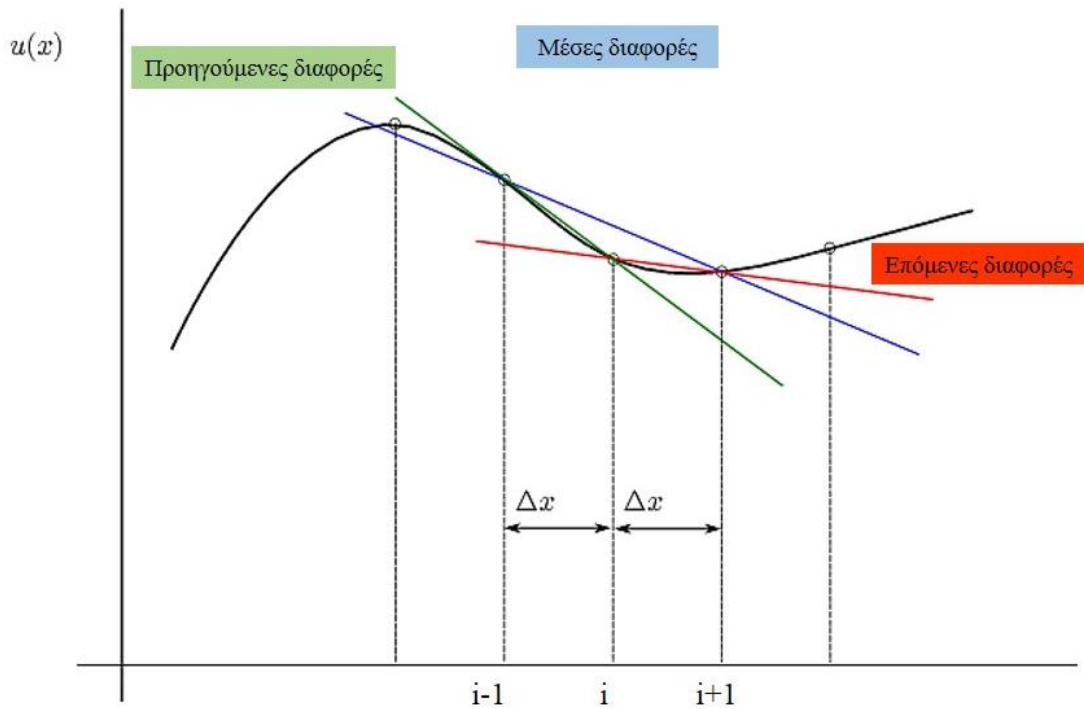
Ο δεύτερος τρόπος είναι οι επόμενες διαφορές. Οι τετμημένες των σημείων που χρησιμοποιούνται στις επόμενες διαφορές είναι μεγαλύτερες του κόμβου αναφοράς:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \quad (3.27)$$

Ο τρίτος τρόπος είναι οι μέσες διαφορές που κάνουν χρήση συμμετρικά διατεταγμένων σημείων:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (3.28)$$

Στην συγκεκριμένη εργασία θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος των μέσων διαφορών.



Σχήμα 3.3: Διαφορετικά είδη διαφορών: α) Η πράσινη ευθεία αναπαριστά τη μέθοδο προηγούμενων διαφορών β) Η γαλάζια ευθεία αναπαριστά τη μέθοδο των μέσων διαφορών γ) Η κόκκινη ευθεία αναπαριστά τη μέθοδο των επόμενων διαφορών.

Εάν αναπτυχθούν οι συναρτήσεις $u(x)$ κατά Taylor προκύπτει:

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x - x_i)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i \Rightarrow$$

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots + \frac{(\Delta x)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i \quad (3.29)$$

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(\Delta x)^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots + \frac{(-\Delta x)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i \quad (3.30)$$

Αφαιρώντας κατά μέλη τις 3.29 και 3.30 προκύπτει η έκφραση πρώτης παραγώγου:

$$u_{i+1,j} - u_{i-1,j} \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} - \frac{(\Delta x)^2}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + \sigma(\Delta x)^2 \quad (3.31)$$

Προσθέτοντας κατά μέλη τις 3.29 και 3.30 προκύπτει η έκφραση δεύτερης παραγώγου:

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \sigma(\Delta x)^2$$
(3.32)

Οι αντίστοιχες σχέσεις για ανομοιόμορφο πλέγμα γίνονται:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{x_{i+1} - x_i} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{ax_i + ax_{i-1}}$$
(3.33)

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{ax_i} - \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{ax_{i-1}}}{\frac{ax_i + ax_{i-1}}{2}}$$
(3.34)

Για κάθε εσωτερικό σημείο του πλέγματος (i, j) με i=2, 3, ..., n-1 και j=2, 3, ..., m-1 προκύπτει μια αλγεβρική εξίσωση με αγνώστους το $u_{i,j}$ και τις τιμές της u στα 4 γειτονικά σημεία του πλέγματος (πάνω $u_{i+1,j}$, κάτω $u_{i-1,j}$, δεξιά $u_{i,j+1}$, αριστερά $u_{i,j-1}$:

$$G(u_{i,j}, u_{i+1,j}, u_{i-1,j}, u_{i,j+1}, u_{i,j-1}) = 0$$
(3.35)

Στα όρια της περιοχής προσομοίωσης πρέπει να εφαρμοστούν κατάλληλες συνοριακές συνθήκες. Για πλέγμα με $N=n \cdot m$ σημεία η επίλυση καταλήγει σε αλγεβρικό σύστημα με N εξισώσεις και N αγνώστους. Με κατάλληλες προσεγγίσεις δημιουργείται γραμμικό $N \times N$ σύστημα το οποίο γράφεται στη μορφή:

$$[A] \cdot u = b$$
(3.36)

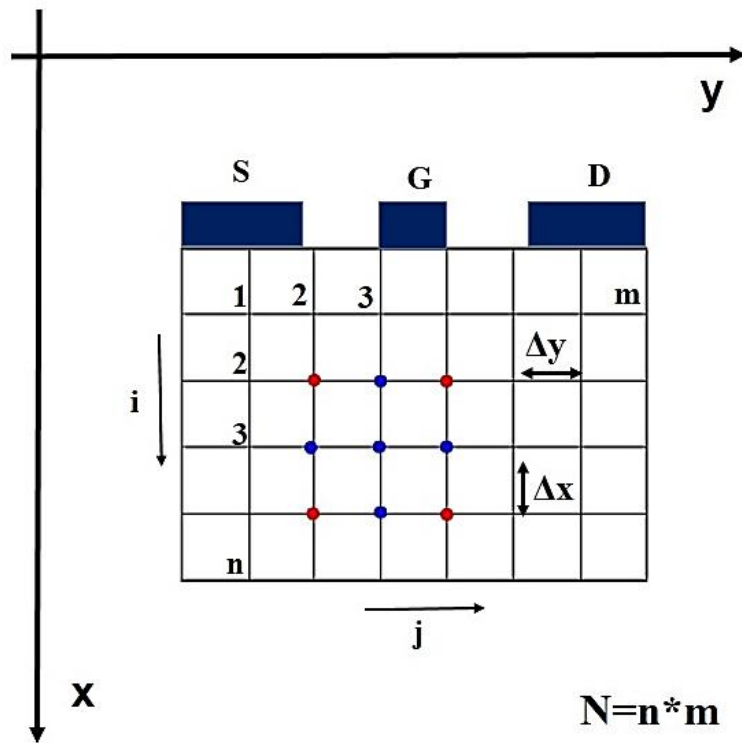
Το διάνυσμα u είναι ένα $N \times 1$ διάνυσμα και περιέχει τις τιμές $u_{i,j}$. Ο πίνακας $[A]$ είναι αραιός και πενταδιαγώνιος, δηλαδή έχει μη μηδενικά στοιχεία μόνο σε 5 διαγώνιους του. Η λύση του συστήματος δίνεται από κάποιο άμεσο ή επαναληπτικό αλγόριθμο για επίλυση αραιών συστημάτων.

3.3.1 Εφαρμογή των πεπερασμένων διαφορών στην εξίσωση Poisson

Η Poisson θα επιλυθεί για γνωστή κατανομή φορτίου και με γνωστές συνοριακές συνθήκες για το ηλεκτροστατικό δυναμικό Ψ , σε δύο διαστάσεις. Γίνεται η θεώρηση ότι η διάταξη βρίσκεται στο επίπεδο (x,y) και εκτείνεται στο άπειρο στην κατεύθυνση του άξονα z.

Για την επίλυση θα χρησιμοποιηθεί ομοιόμορφο ορθογώνιο πλέγμα δύο διαστάσεων που φαίνεται στο σχήμα 3.4. Η τιμή του ηλεκτροστατικού δυναμικού Ψ σε

ένα τυχαίο σημείο x, y προσεγγίζεται με την τιμή στο πλησιέστερο σημείο του πλέγματος, δηλ. $\Psi(x,y) = A_{k,l}$ όπου $k=\text{round}(x/\Delta x)+1$, $l=\text{round}(y/\Delta y)+1$.



Σχήμα 3.4: Δυδιάστατο ορθογώνιο ομοιόμορφο πλέγμα για τη διακριτοποίηση της εξίσωσης Poisson.

Η εξίσωση Poisson (σχέση 3.20) επιλύεται σε δύο διαστάσεις.

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{e}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} (p - n + N_D^+ - N_A^-) \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}\right) = -\frac{e}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} (p - n + N_D^+ - N_A^-) \Rightarrow \text{λόγω της σχέσης 3.32}$$

$$\frac{\Psi_{i+1,j} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\Psi_{i,j+1} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \sigma(\Delta x)^2$$

$$= -\frac{e}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} (p - n + N_D^+ - N_A^-)$$

(3.37)

Αντίστοιχα, για ανομοιομορφο πλέγμα (λόγω της 3.34):

$$\begin{aligned} & \frac{\frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i,j}}{ax_i} - \frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i-1,j}}{ax_{i-1}}}{\frac{ax_i + ax_{i-1}}{2}} + \frac{\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{ay_j} - \frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j-1}}{ay_{j-1}}}{\frac{ay_j + ay_{j-1}}{2}} \\ & = -\frac{e}{\varepsilon_r \cdot \varepsilon_o} (p - n + N_D^+ - N_A^-) \end{aligned} \quad (3.38)$$

Για πλέγμα δύο διαστάσεων $N = n \cdot m$ προκύπτει

$$\Psi_{i,j} = \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \cdots & \Psi_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_{n1} & \Psi_{n2} \cdots & \Psi_{nm} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} & \begin{matrix} \Psi_{11} \\ \Psi_{12} \\ \Psi_{13} \\ \vdots \\ \Psi_{1m} \\ \Psi_{21} \\ \Psi_{22} \\ \Psi_{23} \\ \vdots \\ \Psi_{2m} \\ \Psi_{31} \\ \Psi_{32} \\ \vdots \\ \Psi_{3m} \\ \vdots \\ \Psi_{n1} \\ \vdots \\ \Psi_{nm} \end{matrix} & \begin{matrix} f_{11} \\ f_{12} \\ f_{13} \\ \vdots \\ f_{1m} \\ f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ \vdots \\ f_{2m} \\ f_{31} \\ f_{32} \\ \vdots \\ f_{3m} \\ \vdots \\ f_{n1} \\ \vdots \\ f_{nm} \end{matrix} \\ \underline{\hat{u}} = & \underline{\hat{F}} \end{aligned} \quad (3.40)$$

όπου

$$f_{i,j} = -\frac{e}{\varepsilon_r \cdot \varepsilon_o} (p - n + N_D^+ - N_A^-)_{i,j} \quad (3.41)$$

Θα επιλυθεί το γραμμικό σύστημα

$$[L] \cdot \underline{\hat{u}} = \underline{\hat{F}}$$

Σε κάθε σημείο (i,j) του πλέγματος αντιστοιχεί η γραμμή $k=(i-1)*m+j$ του πίνακα \hat{u} . Από την σχέση (3.37) φαίνεται ότι για τα εσωτερικά σημεία του πλέγματος ο πίνακας L φτιάχνεται ως εξής:

$$L(k, k) = -\frac{2}{\Delta x^2} - \frac{2}{\Delta y^2} \quad L(k, k+1) = L(k, k-1) = \frac{1}{\Delta y^2}$$

$$L(k, k+m) = L(k, k-m) = \frac{1}{\Delta x^2}$$

(3.42)

Επιπλέον $L(k, j) = 0$ για τα υπόλοιπα j .

Όσον αφορά στις οριακές συνθήκες, εφαρμόζεται οριακή συνθήκη Dirichlet για τα σημεία του πλέγματος που ανήκουν σε μεταλλική επιφάνεια, δηλαδή θέτουμε το δυναμικό V ίσο με το εξωτερικό δυναμικό V_0 . Για την γραμμή k του πίνακα L που αντιστοιχεί στο οριακό σημείο ισχύει $L(k,k)=1$, $L(k,j)=0$ για $j \neq k$ και $b(k)=V_0$.

Για τις ελεύθερες επιφάνειες έχουμε οριακή συνθήκη Neumann, δηλαδή μηδενική τιμή της παραγώγου του δυναμικού κάθετα στην επιφάνεια. Για την πρώτη παράγωγο του δυναμικού στα σημεία $(i = 1, n \leq j \leq m)$ εφαρμόζεται η παρακάτω προσέγγιση:

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)_{i=1,j} = \frac{4\Psi_{2,j} - 3\Psi_{1,j} - \Psi_{3,j}}{2\Delta x}$$

(3.43)

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)_{i=1,j} = 0 \Rightarrow \Psi_{1,j} = \frac{(4\Psi_{2,j} - \Psi_{3,j})}{3}$$

(3.44)

Άρα η γραμμή k του πίνακα L για τα σημεία $(i = 1, n \leq j \leq m)$ δίνει:

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k+m) = -4, \quad L(k, k+2 \cdot m) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

(3.45)

Στη συνέχεια επιλύεται το παρακάτω γραμμικό σύστημα:

$$[L] \cdot \hat{u} = \underline{F}$$

Η αριθμητική μέθοδος που επιλέγεται είναι η μέθοδος Gauss Seidel και υπολογίζεται το δυναμικό για όλα τα σημεία του πλέγματος. Στη μέθοδο Gauss Seidel χρησιμοποιείται η εξής επαναληπτική σχέση:

$$\Psi_{i,j}^r = \left(\frac{\Psi_{i-1,j}^r + \Psi_{i+1,j}^{r-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\Psi_{i,j-1}^r + \Psi_{i,j+1}^{r-1}}{(\Delta y)^2} - F_{i,j} \right) \cdot \left(\frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{2}{(\Delta y)^2} \right)^{-1} \quad (3.46)$$

όπου $\Psi_{i,j}^r$ ισοδυναμεί με την εκτίμηση του δυναμικού μετά από r επαναλήψεις. Σε κάθε επανάληψη η νέα εκτίμηση προκύπτει από τις τιμές που έχουν τα τέσσερα γειτονικά σημεία. Για τις οριακές συθήκες ισχύει ότι:

$$\begin{aligned} \Psi_{i,j}^r &= V_o \quad \text{στις μεταλλικές επιφάνειες} \\ \frac{\partial \Psi_{i,j}}{\partial n} &= 0 \quad \text{στις ελεύθερες επιφάνειες} \\ \Psi_{i,j}^r &= \frac{4 \cdot \Psi_{2,j}^{r-1} - \Psi_{3,j}^{r-1}}{3} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Το κριτήριο σύγκλισης μεταξύ των επαναλήψεων $r-1$ και r προκύπτει από την παρακάτω σχέση:

$$\frac{\text{norm}([\Psi]^r - [\Psi]^{r-1})}{\text{norm}([\Psi]^{r-1})} \leq 0.001 \quad \text{όπου} \quad \text{norm}([\Psi]) = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \Psi_{i,j}^2 \right)^{1/2} \quad (3.48)$$

Στην περίπτωση ανομοιόμορφου πλέγματος και με γνωστή την κατανομή ηλεκτρονίων $n_{i,j}$ στα σημεία του πλέγματος προκύπτουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$\begin{aligned} [L] \cdot \underline{\hat{u}} &= \underline{F} \\ F(k) &= -Q_{i,j} = -(N_D - n_{i,j}) \cdot \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} \end{aligned} \quad (3.49)$$

Στα εσωτερικά σημεία $i = 2, 3, 4, \dots, n-1$ και $j = 2, 3, \dots, m-1$ ο πίνακας L γίνεται:

$$\begin{aligned} L(k, k) &= -\frac{2}{ax_i \cdot ax_{i-1}} - \frac{2}{ay_j \cdot ay_{j-1}} \\ L(k, k+1) &= \frac{2}{ay_j \cdot (ay_j + ay_{j-1})} & L(k, k-1) &= \frac{2}{ay_{j-1} \cdot (ay_j + ay_{j-1})} \\ L(k, k+m) &= \frac{2}{ax_i \cdot (ax_i + ax_{i-1})} & L(k, k-m) &= \frac{2}{ax_{i-1} \cdot (ax_i + ax_{i-1})} \end{aligned} \quad (3.50)$$

Να σημειωθεί σε αυτό το σημείο ότι στα σημεία του πλέγματος που αντιστοιχούν στις επιφάνειες ετεροεπαφών (έστω $i=ih$) και όπου υπάρχει απότομη αλλαγή υλικού

χρειάζεται να προστεθεί ένας ακόμη όρος. Ο όρος αυτός είναι ο δεύτερος όρος της εξίσωσης (3.23). Σε αυτά τα σημεία υπάρχει αλλαγή της ηλεκτρικής διαπερατότητας από ε_- σε ε_+ . Οι σχέσεις για τον πίνακα L σύμφωνα με την εξίσωση (3.23) γίνονται:

Για $i = ih - 1$ και $j = 2, 3, \dots, m - 1$:

$$\begin{aligned} L(k, k - m) &= L(k, k - m) - \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_- \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2} \\ L(k, k + m) &= L(k, k + m) + \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_- \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2} \end{aligned} \quad (3.51)$$

Για $i = ih$ και $j = 2, 3, \dots, m - 1$:

$$\begin{aligned} L(k, k - m) &= L(k, k - m) - \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_+ \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2} \\ L(k, k + m) &= L(k, k + m) + \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_+ \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2} \end{aligned} \quad (3.52)$$

Αντίστοιχα για ετεροεπαφές όπου η αλλαγή υλικού γίνεται κατά τη διεύθυνση του άξονα y, δηλαδή για $j = jh - 1$ και $i = 2, 3, \dots, m - 1$:

$$\begin{aligned} L(k, k - 1) &= L(k, k - 1) - \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_- \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \\ L(k, k + 1) &= L(k, k + 1) + \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_- \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \end{aligned} \quad (3.53)$$

και για $j = jh$ και $i = 2, 3, \dots, m - 1$:

$$\begin{aligned} L(k, k - 1) &= L(k, k - 1) - \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_+ \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \\ L(k, k + 1) &= L(k, k + 1) + \frac{(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{\varepsilon_+ \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \end{aligned} \quad (3.54)$$

Οι συνθήκες Dirichlet κατά μήκος της πηγής και του απαγωγού εφαρμόζονται στο σύστημα ως εξής

Για $k = j_s$: $L(k, k) = 1$ και $F(k) = \Psi_s$

Για $k = j_D$: $L(k, k) = 1$ και $F(k) = \Psi_s + V_{DS}$ (3.55)

Στα υπόλοιπα σημεία εφαρμόζονται οι συνθήκες Neumann:

Για $i = 1, 2, \dots, n$ και $j = 1$ (αριστερό όριο):

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k + 1) = -4, \quad L(k, k + 2) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

Για $i = 1, 2, \dots, n$ και $j = m$ (δεξί όριο):

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k - 1) = -4, \quad L(k, k - 2) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

Για $i = 1$ και $j = 1, 2, \dots, m$ εκτός j_S, j_D, j_G (πάνω όριο) :

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k + n) = -4, \quad L(k, k + 2n) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

Για $i = n$ και $j = 1, 2, \dots, m$ (κάτω όριο) :

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k - n) = -4, \quad L(k, k - 2n) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

3.3.2 Εφαρμογή των πεπερασμένων διαφορών στην εξίσωση Schroedinger

Η εξίσωση Schroedinger σε δύο διαστάσεις γράφεται ως εξής:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \varphi + V \cdot \varphi = E \cdot \varphi \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) + V_{x,y} \cdot \varphi = E_{x,y} \cdot \varphi$$

όπου φ η άγνωστη κυματοσυνάρτηση, $V_{x,y}$ το εξωτερικό δυναμικό και $E_{x,y}$ η απόσταση των ενεργειακών σταθμών από το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας. Λόγω της σχέσης (3.9) η παραπάνω μετασχηματίζεται ως εξής:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) + V_{i,j} \cdot \varphi_{i,j} = E_{i,j} \cdot \varphi_{i,j}$$

(3.56)

και για ανομοιόμορφο πλέγμα:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\Delta x_i} - \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}}}{\frac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2}} + \frac{\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\Delta y_j} - \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}}}{\frac{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}}{2}} \right) + V_{i,j} \cdot \varphi_{i,j} = E_{i,j} \cdot \varphi_{i,j}$$

(3.57)

Η εξίσωση (3.56) για ομοιόμορφο πλέγμα μπορεί γραφτεί ως εξής:

$$\left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + V^* \right) \cdot \varphi_{i,j} - \frac{1}{\Delta x^2} (\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}) - \frac{1}{\Delta y^2} (\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j-1}) = E_{i,j}^* \cdot \varphi_{i,j}$$

(3.58)

όπου

$$V^*_{i,j} = \frac{V_{i,j}}{\hbar^2} \quad E_{i,j}^* = \frac{E_{i,j}}{2m^*}$$

(3.59)

Το πρόβλημα αναγάγεται στην επίλυση ενός γραμμικού συστήματος N εξισώσεων με N αγνώστους ως εξής:

$$[L] \cdot \underline{\hat{u}} = E^* \underline{\hat{u}} \quad (3.60)$$

όπου $L = NxN$ τετραγωνικός πενταδιαγώνιος πίνακας. Σε κάθε σημείο (i,j) του πλέγματος αντιστοιχεί η γραμμή $k=(i-1)*m+j$ του πίνακα $\underline{\hat{u}}$:

$$\begin{array}{l} \varphi_{11} \\ \varphi_{12} \\ \varphi_{13} \\ \vdots \\ \varphi_{1m} \\ \varphi_{21} \\ \varphi_{22} \\ \varphi_{23} \\ \vdots \\ \underline{\hat{u}} = \varphi_{2m} \\ \varphi_{31} \\ \varphi_{32} \\ \vdots \\ \varphi_{3m} \\ \vdots \\ \varphi_{n1} \\ \vdots \\ \varphi_{nm} \end{array} \quad \begin{array}{l} L(k, k) = \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + V^* \quad L(k, k+1) = L(k, k-1) = -\frac{1}{\Delta y^2} \\ \\ \\ L(k, k+m) = L(k, k-m) = -\frac{1}{\Delta x^2} \end{array} \quad (3.61)$$

Στην περίπτωση της επίλυσης της εξίσωσης Schroedinger σε μία διάσταση η εξίσωση γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \varphi + V \cdot \varphi &= E \cdot \varphi \Rightarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + V_x \cdot \varphi &= E_x \cdot \varphi \end{aligned}$$

η οποία με τη βοήθεια της (3.31) γράφεται:

$$\left(\frac{2}{\Delta x^2} + V^* \right) \varphi_i - \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}}{\Delta x^2} = E^* \varphi_i \quad (3.62)$$

και ο πίνακας L φαίνεται παρακάτω:

$$[L] = \begin{bmatrix} \frac{2}{\Delta x^2} + V^*_1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + V^*_2 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + V^*_3 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{2}{\Delta x^2} + V^*_N \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

Η εξίσωση Schroedinger επιλύεται σε αυτό το σημείο σε δύο διαστάσεις για ανομοιόμορφο πλέγμα, αλλά όχι σε όλη την περιοχή προσομοίωσης. Επιλύεται σε μία περιοχή (domain) η οποία ονομάζεται κβαντικό κουτί (quantum box). Το κβαντικό κουτί περιλαμβάνει το κανάλι και επεκτείνεται και μερικά nm κάτω από το κανάλι (ως προς το βάθος) αλλά και μερικά nm (5nm) μέσα στις ωμικές επαφές κάτω από την πηγή και τον απαγωγό (βλ.Σχ.4.1). Σε αυτή την περιοχή θεωρείται ότι τα ηλεκτρόνια εγκλωβίζονται στο πηγάδι δυναμικού που σχηματίζεται μέσα στο κανάλι και καταλαμβάνουν διακριτές ενεργειακές στάθμες. Στα άκρα του κβαντικού κουτιού ισχύει ότι $\varphi=0$ (η κυματοσυνάρτηση των ηλεκτρονίων μηδενίζεται έξω από την κβαντική περιοχή). Η συγκέντρωση φορέων έξω από το κβαντικό κουτί υπολογίζεται κλασικά με βάση τη σχέση της τρισδιάστατης συγκέντρωσης ηλεκτρονίων (σχέση4.6).

Η εξίσωση Schroedinger επιλύεται με γνωστές τιμές για το ηλεκτροστατικό δυναμικό $\Psi_{i,j}$, που προκύπτει από την επίλυση της Poisson και εισέρχεται ως είσοδος στην Schroedinger. Η επίλυση γίνεται ως προς την περιβάλλουσα κυματοσυνάρτηση $\varphi(x,y)$ και την απόσταση των ενεργειακών σταθμών από το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας. Θα επιλυθεί το γραμμικό σύστημα (3.60):

$$[L] \cdot \underline{\hat{u}} = E^* \underline{\hat{u}}$$

Στην επίλυση του γραμμικού συστήματος ο πίνακας L είναι μικρότερος από τον αντίστοιχο της Poisson. Έχει διαστάσεις $M_q \times M_q$. Η κβαντική περιοχή έχει διαστάσεις $M_q = n_q \cdot m_q$ όπου $m_q = j_{qe} - j_{qs} + 1$ και $n_q = i_{qe} - i_{qs} + 1$.

$$k = (i - 1) * m_q + j$$

$$\begin{array}{ll}
i_o = i + i_{qs} - 1 & \varphi_{11} \\
& \varphi_{12} \\
& \varphi_{13} \\
& \vdots \\
j_o = j + j_{qs} - 1 & \varphi_{1m_q} \\
& \varphi_{21} \\
axq_i = A_x(i_o + 1) - A_x(i_o) & \varphi_{22} \\
& \varphi_{23} \\
& \vdots \\
ayq_j = A_y(j_o + 1) - A_y(j_o) & \hat{u} = \varphi_{2m_q} \\
& \varphi_{31} \\
& \varphi_{32} \\
& \vdots \\
& \varphi_{3m_q} \\
& \vdots \\
V_{i,j} = \frac{-e\Psi(i_o, j_o) - \Delta Ec}{\frac{\hbar^2}{2m_o}} & \varphi_{n1} \\
& \vdots \\
& \varphi_{n_q m_q}
\end{array}$$

$$L(k, k) = \left(\frac{2}{ax_i \cdot ax_{i-1}} + \frac{2}{ay_j \cdot ay_{j-1}} \right) \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} + V_{i,j} \quad (3.64)$$

$$L(k, k+1) = \frac{-2}{ay_j \cdot (ay_j + ay_{j-1})} \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} \quad L(k, k-1) = \frac{-2}{ay_{j-1} \cdot (ay_j + ay_{j-1})} \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} \quad (3.65)$$

$$L(k, k+m_q) = \frac{-2}{ax_i \cdot (ax_i + ax_{i-1})} \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} \quad L(k, k-m_q) = \frac{-2}{ax_{i-1} \cdot (ax_i + ax_{i-1})} \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} \quad (3.66)$$

Στην επίλυση της Schroedinger για τα σημεία του πλέγματος που αντιστοιχούν στις επιφάνειες ετεροεπαφών (έστω $i=ih$) χρειάζεται να προστεθεί ο δεύτερος όρος της εξίσωσης (3.23) για τη μεταβολή της ενεργού μάζας από m_- σε m_+ . Οι σχέσεις για τον πίνακα L σύμφωνα με την εξίσωση (3.23) γίνονται:

Για $i = ih - 1$ και $j = 2, 3, \dots, m_q - 1$:

$$\begin{aligned}
L(k, k - m_q) &= L(k, k - m_q) - \frac{(m_+ - m_-)}{m_-^2 \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2} \\
L(k, k + m_q) &= L(k, k + m_q) + \frac{(m_+ - m_-)}{m_-^2 \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2}
\end{aligned} \quad (3.67)$$

Για $i = ih$ και $j = 2, 3, \dots, m_q - 1$:

$$\begin{aligned} L(k, k - m_q) &= L(k, k - m_q) - \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_+ \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2} \\ L(k, k + m_q) &= L(k, k + m_q) + \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_+ \cdot (ax_i + ax_{i-1})^2} \end{aligned} \quad (3.68)$$

Αντίστοιχα για ετεροεπαφές όπου η αλλαγή υλικού γίνεται κατά τη διεύθυνση του άξονα y , δηλαδή για $j = jh - 1$ και $i = 2, 3, \dots, n_q - 1$:

$$\begin{aligned} L(k, k - n_q) &= L(k, k - n_q) - \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_- \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \\ L(k, k + n_q) &= L(k, k + n_q) + \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_- \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \end{aligned} \quad (3.69)$$

και για $j = jh$ και $i = 2, 3, \dots, n_q - 1$:

$$\begin{aligned} L(k, k - n_q) &= L(k, k - n_q) - \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_+ \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \\ L(k, k + n_q) &= L(k, k + n_q) + \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_+ \cdot (ay_j + ay_{j-1})^2} \end{aligned} \quad (3.70)$$

Για να εφαρμοστεί η συνθήκη $\varphi=0$ για τα σημεία στο σύνορο ακριβώς έξω από την κβαντική περιοχή θα παραλειφθούν οι όροι στις γραμμές k του πίνακα L που αντιστοιχούν σε εξωτερικά σημεία. Θα ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

Για $i=1, 2, \dots, n_q$ και $j=1$ (αριστερό όριο):

$$L(k, k), L(k, k + m_q), L(k, k - m_q), L(k, k + 1) \text{ όπως στα εσωτερικά σημεία}$$

Για $i=1, 2, \dots, n_q$ και $j=m_q$ (δεξί όριο):

$$L(k, k), L(k, k + m_q), L(k, k - m_q), L(k, k - 1) \text{ όπως στα εσωτερικά σημεία}$$

Για $i=1$ και $j=1, 2, \dots, m_q$ (πάνω όριο):

$$L(k, k), L(k, k + m_q), L(k, k + 1), L(k, k - 1) \text{ όπως στα εσωτερικά σημεία}$$

Για $i=n_q$ και $j=1, 2, \dots, m_q$ (κάτω όριο):

$$L(k, k), L(k, k - m_q), L(k, k + 1), L(k, k - 1) \text{ όπως στα εσωτερικά σημεία} \quad (3.71)$$

Για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Schroedinger:

$$[L] \cdot \underline{\hat{u}} = E^* \underline{\hat{u}}$$

όπου

$$\underline{\hat{u}} = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \vdots \\ \varphi_{n_q} \end{pmatrix}$$

Για $i = 2, 3, \dots, n_q - 1$:

$$i_o = i + i_{qs} - 1$$

$$ax_{q_i} = A_x(i_o + 1) - A_x(i_o)$$

$$V_{i,j} = \frac{-e\Psi(i_o, j_o) - \Delta E c}{\frac{\hbar^2}{2m_o}}$$

$$L(i, i) = \frac{2}{ax_i \cdot ax_{i-1}} \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} + V_{i,jq}$$

$$L(i, i+1) = \frac{-2}{ax_i \cdot (ax_i + ax_{i-1})} \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} \quad L(i, i-1) = \frac{-2}{ax_{i-1} \cdot (ax_i + ax_{i-1})} \cdot \frac{1}{m^*_{nl}} \quad (3.72)$$

Στα σημεία που αντιστοιχούν στο σύνορο θα ισχύουν:

$$L(1,1) = \frac{2}{ax_1 \cdot ax_0} \cdot \frac{1}{m^*_{n1}} + V_{i,jq}$$

$$L(1,2) = \frac{-2}{ax_1 \cdot (ax_1 + ax_0)} \cdot \frac{1}{m^*_{n1}}$$

$$L(N, N) = \frac{2}{ax_N \cdot ax_{N-1}} \cdot \frac{1}{m^*_{n3}} + V_{N,jq}$$

$$L(N, N-1) = \frac{-2}{ax_{N-1} \cdot (ax_{N-1} + ax_N)} \cdot \frac{1}{m^*_{n3}} \quad (3.73)$$

Στις ετεροεπαφές ($i=ih$) όπου και υπάρχει αλλαγή της ενεργού μάζας από $ih-1$ στο ih χρειάζεται να προστεθεί ο δεύτερος όρος της εξίσωσης (3.23) για τη μεταβολή της ενεργού μάζας από m_- σε m_+ . Προκύπτουν επομένως οι παρακάτω σχέσεις:

$$L(ih-1, ih-2) = L(ih-1, ih-2) - \frac{(m_+ - m_-)}{m_-^2 \cdot (ax_{ih-1} + ax_{ih-2})^2}$$

$$\begin{aligned}
L(ih - 1, ih) &= L(ih - 1, ih) + \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_- \cdot (ax_{ih-1} + ax_{ih-2})^2} \\
L(ih, ih - 1) &= L(ih, ih - 1) - \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_+ \cdot (ax_{ih} + ax_{ih-1})^2} \\
L(ih, ih + 1) &= L(ih, ih + 1) + \frac{(m_+ - m_-)}{m^2_+ \cdot (ax_{ih} + ax_{ih-1})^2}
\end{aligned} \tag{3.74}$$

3.3.3 Η εφαρμογή των Πεπερασμένων διαφορών στην εξίσωση Συνέχειας.

Η εξίσωση συνέχειας στη μόνιμη κατάσταση περιγράφεται από τη σχέση: $\nabla \mathbf{J}_n = 0$. Με γνωστά την πυκνότητα των ηλεκτρονίων $n_{i,j}$ στη ζώνη αγωγιμότητας και το δυναμικό $\Psi_{i,j}$ από την εξίσωση Poisson η εξίσωση επιλύεται ως προς τη στάθμη Fermi E_{fn} . Θεωρούμε τη συγκέντρωση οπών αμελητέα και μηδενικό τον όρο επανασύνδεσης φορέων δηλ. $R_n=0$. Η πυκνότητα ρεύματος υπολογίζεται από την εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης: $\mathbf{J}_n = n \cdot \mu_n \cdot \nabla E_{fn}$. Για τη διακριτοποίηση εφαρμόζεται η προσέγγιση Scharfetter-Gummel. Επιλύεται και πάλι το γραμμικό σύστημα:

$$[L] \cdot \underline{\hat{u}} = \underline{F} \tag{3.75}$$

Στα εσωτερικά σημεία:

$$i = 2, 3, 4, \dots, n - 1$$

$$j = 2, 3, \dots, m - 1$$

$$k = (i - 1) * m + j$$

$$F(k) = 0$$

$$\begin{aligned}
d\Psi_i &= \frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i,j}}{kT} & d\Psi_j &= \frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{kT} \\
g_i &= \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{d\Psi_i}{2}\right)} & g_j &= \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{d\Psi_j}{2}\right)}
\end{aligned}$$

$$n_{i+\frac{1}{2},j} = (1 - g_i) \cdot n_{i,j} + g_i \cdot n_{i+1,j}$$

$$n_{i-\frac{1}{2},j} = (1 - g_{i-1}) \cdot n_{i-1,j} + g_{i-1} \cdot n_{i,j}$$

$$n_{i,j+\frac{1}{2}} = (1 - g_j) \cdot n_{i,j} + g_j \cdot n_{i,j+1}$$

$$n_{i,j-\frac{1}{2}} = (1 - g_{j-1}) \cdot n_{i,j-1} + g_{j-1} \cdot n_{i,j}$$

$$L(k, k) = -\frac{2\mu_{n_{i+\frac{1}{2},j}} \cdot n_{i+\frac{1}{2},j}}{ax_i \cdot (ax_{i-1} + ax_i)} - \frac{2\mu_{n_{i-\frac{1}{2},j}} \cdot n_{i-\frac{1}{2},j}}{ax_{i-1} \cdot (ax_{i-1} + ax_i)} - \frac{2\mu_{n_{i,j+\frac{1}{2}}} \cdot n_{i,j+\frac{1}{2}}}{ay_j \cdot (ay_{j-1} + ay_j)} - \frac{2\mu_{n_{i,j-\frac{1}{2}}} \cdot n_{i,j-\frac{1}{2}}}{ay_{j-1} \cdot (ay_{j-1} + ay_j)} \quad (3.76)$$

$$L(k, k+1) = \frac{2\mu_{n_{i,j+\frac{1}{2}}} \cdot n_{i,j+\frac{1}{2}}}{ay_j \cdot (ay_{j-1} + ay_j)} \quad (3.77)$$

$$L(k, k-1) = \frac{2\mu_{n_{i,j-\frac{1}{2}}} \cdot n_{i,j-\frac{1}{2}}}{ay_{j-1} \cdot (ay_{j-1} + ay_j)} \quad (3.78)$$

$$L(k, k+m) = \frac{2\mu_{n_{i+\frac{1}{2},j}} \cdot n_{i+\frac{1}{2},j}}{ax_i \cdot (ax_{i-1} + ax_i)} \quad (3.79)$$

$$L(k, k-m) = \frac{2\mu_{n_{i-\frac{1}{2},j}} \cdot n_{i-\frac{1}{2},j}}{ax_{i-1} \cdot (ax_{i-1} + ax_i)} \quad (3.80)$$

Η κινητικότητα μ περιγράφεται από εμπειρική σχέση στα ενδιάμεσα σημεία του πλέγματος ως εξής:

$$\mu_{n_{i+\frac{1}{2},j}} = \frac{\mu_{n_{0,1}}}{\sqrt{1 + \left(\mu_{n_{0,1}} \cdot \frac{|dV_{i+\frac{1}{2},j}|}{V_{sat1}} \right)^2}} \quad (3.81)$$

$$|dV_{i+\frac{1}{2},j}| = \sqrt{\left(\frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i,j}}{ax_i} \right)^2 + \left(\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1}}{ay_j + ay_{j-1}} \right)^2} \quad (3.82)$$

$$\mu_{n,i,j+\frac{1}{2}} = \frac{\mu_{n0,1}}{\sqrt{1 + \left(\mu_{n0,1} \cdot \frac{|dV_{i,j+\frac{1}{2}}|}{V_{sat1}} \right)^2}} \quad (3.83)$$

$$\left| dV_{i,j+\frac{1}{2}} \right| = \sqrt{\left(\frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j}}{ax_i + ax_{i-1}} \right)^2 + \left(\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{ay_j} \right)^2} \quad (3.84)$$

Παρόμοιες σχέσεις ισχύουν για $\mu_{n,i-\frac{1}{2},j}$ και $\mu_{n,i,j-\frac{1}{2}}$.

Κατά αναλογία με την εξίσωση Poisson θα εφαρμοστούν συνοριακές συνθήκες Dirichlet στην πηγή και στον απαγωγό. Δηλαδή:

$$E_{fnS} = 0 \text{ και } E_{fnD} = -V_{DS} \Rightarrow$$

$$\text{Για } k = j_S \Rightarrow L(k, k) = 1 \quad F(k) = 0$$

$$\text{Για } k = j_D \Rightarrow L(k, k) = 1 \quad F(k) = -V_{DS}$$

(3.85)

Για τις υπόλοιπες επιφάνειες στα συνοριακά σημεία εφαρμόζεται η συνθήκη Neumann $\frac{\partial E_{fn}}{\partial s} = 0$ για διεύθυνση κάθετη στη συνοριακή επιφάνεια. Κατ'αντιστοιχία πάλι με τις εξισώσεις της Poisson προκύπτουν:

Για $i = 1, 2, \dots, n$ και $j = 1$ (αριστερό όριο):

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k+1) = -4, \quad L(k, k+2) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

Για $i = 1, 2, \dots, n$ και $j = m$ (δεξί όριο):

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k-1) = -4, \quad L(k, k-2) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

Για $i = 1$ και $j = 1, 2, \dots, m$ εκτός j_S, j_D, j_G (πάνω όριο) :

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k+n) = -4, \quad L(k, k+2n) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

Για $i = n$ και $j = 1, 2, \dots, m$ (κάτω όριο) :

$$L(k, k) = 3, \quad L(k, k-n) = -4, \quad L(k, k-2n) = 1 \text{ και } f(k) = 0$$

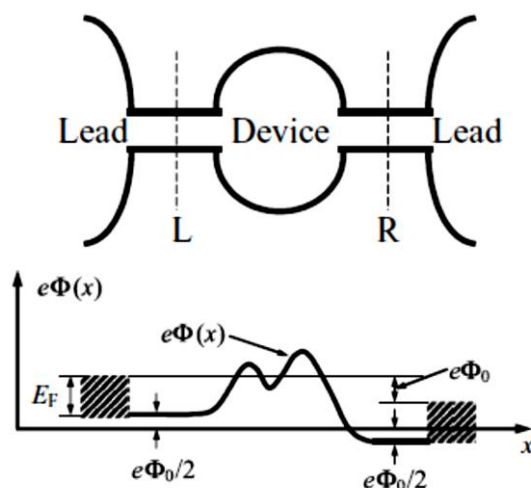
(3.86)

3.4 Κβαντική Μεταφορά Ηλεκτρονίων

3.4.1 Η Θεωρία Landauer

Η εξίσωση του Schroedinger είναι ένα επαρκές εργαλείο για την περιγραφή ενός συστήματος με ένα μόνο ηλεκτρόνιο ή για την περιγραφή ενός συστήματος με πολλά ηλεκτρόνια τα οποία δεν αλληλεπιδρούν. Είναι ωστόσο προφανές ότι η ολοκληρωμένη κινητική θεωρία των ηλεκτρονίων στα στερεά απαιτεί μία ευρύτερη προσέγγιση από αυτήν όπου η εξίσωση του Schroedinger περιορίζεται σε πρόβλημα ενός μόνο ηλεκτρονίου. Στα πλαίσια αυτής της προσέγγισης έχει αναπτυχθεί η θεωρία μεταφοράς ηλεκτρονίων σε δύο περιοχές. Στην περιοχή όπου η μεταφορά ακολουθεί την κλασική θεωρία και στην καθαρά κβαντική μεταφορά. Σε αυτό το κεφάλαιο γίνεται μία περιγραφή της καθαρά κβαντικής μεταφοράς. Για λόγους απλοποίησης θα μελετηθεί η χρονοανεξάρτητη κβαντική μεταφορά στην οποία οι ανελαστικές διαδικασίες παραλείπονται.

Η μεταφορά στις νανοηλεκτρονικές διατάξεις εξαρτάται τόσο από τη γεωμετρία της διάταξης, όσο και από τους ακροδέκτες (leads) οι οποίοι συνδέουν τη διάταξη (Device) με ένα εξωτερικό ηλεκτρικό κύκλωμα [28]. Έτσι μπορεί να γίνει η εξής απλοποίηση, να θεωρηθεί ότι όλο το σύστημα αποτελείται από την διάταξη και τους δύο ακροδέκτες (Σχ.3.5).



Σχήμα 3.5: α) Διάγραμμα νανοδομής η οποία περιλαμβάνει μία νανοδιάταξη η οποία συνδέεται με δύο επαφές β) Αντίστοιχο ενεργειακό διάγραμμα για ένα ηλεκτρόνιο σε μία νανοδομή.

Θα υποθεθεί ότι και οι δύο ακροδέκτες αποτελούν δύο ρεζερβουάρ ηλεκτρονίων στα οποία οι διαδικασίες χαλάρωσης της ενέργειας και της ορμής είναι αρκετά γρήγορες, ώστε το σύστημα να παραμένει σε ισορροπία ακόμα και όταν εφαρμόζεται ένα αρκετά

υψηλά δυναμικό. Αυτό σημαίνει ότι οι συνοριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια μεταξύ των ακροδεκτών και της διάταξης καθορίζονται από την κατανομή Fermi για συνθήκες θερμοδυναμικής ισορροπίας. Η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων στους ακροδέκτες είναι τόσο υψηλή, ώστε το ηλεκτροστατικό δυναμικό σε κάθε ακροδέκτη να μπορεί να θεωρηθεί σταθερό όπως στην περίπτωση ενός μετάλλου. Έστω E_f η ενέργεια Fermi των ηλεκτρονίων στους ακροδέκτες απουσία δυναμικού. Όταν ένα δυναμικό Φ εφαρμόζεται, το επίπεδο Fermi στον ένα ακροδέκτη γίνεται $(E_f - e\Phi/2)$ και στον δεύτερο ακροδέκτη γίνεται $(E_f + e\Phi/2)$, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.5.β. Κατ'επέκταση οι συναρτήσεις κατανομής ηλεκτρονίων στον αριστερό και στον δεξιό ακροδέκτη αντίστοιχα θα είναι:

$$\mathcal{F}_{FL} \left[E - \left(E_f - \frac{1}{2} e\Phi \right) \right] = \left[1 + \exp \left(E - E_f - \frac{e\Phi}{2} \right) \right]^{-1} \quad (3.87)$$

$$\mathcal{F}_{FR} \left[E - \left(E_f + \frac{1}{2} e\Phi \right) \right] = \left[1 + \exp \left(E - E_f + \frac{e\Phi}{2} \right) \right]^{-1} \quad (3.88)$$

E είναι η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων.

Το σύστημα μπορεί να επιλυθεί με ικανοποιητική ακρίβεια με τη μέθοδο των χωριζόμενων μεταβλητών. Το δυναμικό χωρίζεται σε δύο όρους. Ο πρώτος περιγράφει την ύπαρξη δυναμικού παράλληλα στη διεύθυνση αγωγής του φορτίου $V_1(x)$ και ο άλλος περιγράφει την ύπαρξη δυναμικού κάθετα στη διεύθυνση αγωγής του φορτίου $V_2(y, z)$. Επομένως η συνάρτηση του δυναμικού γράφεται ως εξής:

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y, z) \quad (3.89)$$

και αντίστοιχα η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί:

$$\psi(x, y, z) = \psi_{\parallel}(x)\psi_T(y, z) \quad (3.90)$$

Επειδή η μεταφορά φορτίου συμβαίνει κατά τη διεύθυνση x απαιτείται να αναλυθεί η κυματοσυνάρτηση $\psi_{\parallel}(x)$ ως άθροισμα δύο κυμάτων. Για την κυματοσυνάρτηση των ηλεκτρονίων που εισέρχονται από τον αριστερό ακροδέκτη (left- ℓ) ισχύει:

$$\psi_{\parallel, \ell} = \begin{cases} e^{ik_{\ell}(x-x_{\ell})} + r_{\ell} e^{-ik_{\ell}(x-x_{\ell})} & x < x_{\ell} \\ t_r e^{ik_r(x-x_r)} & x > x_r \end{cases} \quad (3.91)$$

Άρα στο αριστερό τμήμα της διάταξης ℓ υπάρχουν τα εισερχόμενα και ανακλώμενα κύματα (r_{ℓ} ο συντελεστής ανάκλασης), ενώ στο δεξιό τμήμα της διάταξης r υπάρχει μόνο το κύμα που έχει διαπεράσει τη διάταξη με συντελεστή διέλευσης t_r .

Για την κυματοσυνάρτηση των ηλεκτρονίων που εισέρχονται από τον δεξιό ακροδέκτη (right- r) ισχύει:

$$\psi_{\parallel,r} = \begin{cases} t_l e^{-ik_l(x-x_l)} & x < x_l \\ e^{-ik_r(x-x_r)} + r_r e^{ik_r(x-x_r)} & x > x_r \end{cases} \quad (3.92)$$

Επιπλέον k_l, k_r είναι οι παράλληλες συνιστώσες των κυματοσυναρτήσεων k_{\parallel} στο αριστερό και δεξί τμήμα της διάταξης αντίστοιχα, κατά τη διεύθυνση x .

Η εισερχόμενη και εξερχόμενη ροή από ένα ηλεκτρόνιο από αριστερά προς τα δεξιά θα είναι:

$$i_{in} = u_l \quad (3.93)$$

$$i_{out} = u_r |t_r|^2 \quad (3.94)$$

όπου

$$u_l = \frac{\hbar k_l}{m^*} \text{ και } u_r = \frac{\hbar k_r}{m^*} \quad (3.95)$$

είναι οι ταχύτητες στο αριστερό και στο δεξί τμήμα της διάταξης αντίστοιχα. Από τον ορισμό του συντελεστή διέλευσης:

$$T_{l \rightarrow r}(E) = \frac{i_{out}}{i_{in}} = \frac{k_r}{k_l} |t_r|^2 \quad (3.96)$$

και αντίστοιχα

$$T_{r \rightarrow l}(E) = \frac{k_l}{k_r} |t_l|^2 \quad (3.97)$$

Επομένως $T_{l \rightarrow r}(E) = T_{r \rightarrow l}(E) = T(E_{\parallel})$ όπου $E_{\parallel} = \frac{\hbar k_{\parallel}^2}{2m^*}$ είναι η κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στην παράλληλη συνιστώσα της ηλεκτρονιακής ορμής. Αντίστοιχα για τον συντελεστή ανάκλασης θα ισχύει:

$$R(E) = \frac{i_r}{i_{in}} = |r_l|^2 = |r_r|^2 \quad (3.98)$$

Από τις σχέσεις (3.11) και (3.12) είναι εμφανές ότι $T(E) + R(E) = 1$.

Σε αυτό το σημείο θα υπολογιστεί το συνολικό ρεύμα της διάταξης λαμβάνοντας υπόψη τις συνεισφορές από όλα τα ηλεκτρόνια που εισέρχονται στην διάταξη και από τους δύο ακροδέκτες. Το συνολικό ρεύμα αθροίζεται ως προς τους κβαντικούς αριθμούς n, m (όλες τις καταστάσεις n, m) που αναφέρονται στο δυναμικό $\psi_T(y, z)$.

Έστω μία κατάσταση στον αριστερό ακροδέκτη με κβαντικούς αριθμούς k_{\parallel}, n και m . Ο αριθμός των ηλεκτρονίων σε αυτήν την κατάσταση θα είναι $2\mathcal{F}_F \left[E(k_{\parallel}, n, m) - \frac{1}{2}e\Phi - E_F \right]$ όπου ο παράγοντας 2 εμπεριέχεται λόγω του σπίν. Εάν το μήκος της σύνδεσης είναι L_c , τότε ο αριθμός των ηλεκτρονίων ανα μονάδα μήκους

θα είναι $2\mathcal{F}/L_c$ και η συνολική συνεισφορά στο ρεύμα από τα ηλεκτρόνια που εισέρχονται από αριστερά θα είναι:

$$I_l = -\frac{2e}{L_c} \sum_{n,m} \sum_{k_{\parallel}>0} u_{\parallel} T(E_{\parallel}) \mathcal{F}_F \left[E(k_{\parallel}, n, m) - \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right] \quad (3.99)$$

Αντίστοιχα η συνολική συνεισφορά στο ρεύμα από τα ηλεκτρόνια που εισέρχονται από δεξιά θα είναι:

$$I_r = \frac{2e}{L_c} \sum_{n,m} \sum_{k_{\parallel}>0} u_{\parallel} T(E_{\parallel}) \mathcal{F}_F \left[E(k_{\parallel}, n, m) + \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right] \quad (3.100)$$

Άρα

$$\begin{aligned} I_{ολικό} &= I_l + I_r \Rightarrow \\ I_{ολικό} &= \frac{2e}{L_c} \sum_{n,m} \sum_{k_{\parallel}>0} u_{\parallel} T(E_{\parallel}) \left\{ \mathcal{F}_F \left[E(k_{\parallel}, n, m) + \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right] \right. \\ &\quad \left. - \mathcal{F}_F \left[E(k_{\parallel}, n, m) - \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.101)$$

Επειδή η ταχύτητα των ηλεκτρονίων u_{\parallel} και ο συντελεστής διάδοσης T είναι ανεξάρτητα από τους κβαντικούς αριθμούς n και m θα υπολογιστούν πρώτα τα αθροίσματα ως προς n και m .

Επιπλέον

$$\mathcal{F}(E) = 2 \sum_{n,m} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + E_{n,m}}{k_B T}\right)} \quad (3.102)$$

Η άθροιση ως προς k_{\parallel} μπορεί να μετατραπεί σε ολοκλήρωση ως προς E_{\parallel} με τη βοήθεια της σχέσης $\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = v(k)$ η οποία μετατρέπει το ολοκλήρωμα ως εξής:

$$\sum_{k_{\parallel}} \{ \dots \} \rightarrow L_c \int \frac{dk_{\parallel}}{2\pi} \{ \dots \} = L_c \int \frac{dE_{\parallel}}{2\pi\hbar v_{\parallel}} \{ \dots \} \quad (3.103)$$

Με τη βοήθεια των παραπάνω η σχέση (3.101) καταλήγει:

$$I = e \int \frac{dE_{\parallel}}{2\pi\hbar} T(E_{\parallel}) \left[\mathcal{F} \left(E_{\parallel} + \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right) - \mathcal{F} \left(E_{\parallel} - \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right) \right] \quad (3.104)$$

όπου \mathcal{F} η πυκνότητα των ηλεκτρονίων στο ρεζερβουάρ σε κατάσταση ισορροπίας. Επίσης $\mathcal{F}(E_{\parallel})$ είναι η πυκνότητα των ηλεκτρονίων με παράλληλη ενέργεια E και όχι με συνολική ενέργεια E .

$$E = E_{\parallel} + E_{n,m} \Rightarrow \mathcal{F}(E_{\parallel}) = \sum_{n,m} \mathcal{F}_{F_{m,n}}(E_{\parallel}, (n, m)) \quad (3.105)$$

3.4.2 Η αγωγιμότητα της διάταξης σε χαμηλές θερμοκρασίες - Η σχέση Landauer

Σε χαμηλές θερμοκρασίες κοντά στους $T=0K$, δηλαδή κοντά στη θερμοδυναμική ισορροπία, μπορεί να γίνει η απλοποίηση της κατανομής Fermi ως μία βηματική συνάρτηση:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{F}_F(E - E_F) = \theta(E_F - E) \quad (3.106)$$

και για εφαρμογή μικρού δυναμικού Φ ισχύει η εξής προσέγγιση:

$$\left\{ \mathcal{F}_F \left[E(k_{\parallel}, n, m) + \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right] - \mathcal{F}_F \left[E(k_{\parallel}, n, m) - \frac{1}{2} e\Phi - E_F \right] \right\} = -e\Phi \delta(E_F - E) \quad (3.107)$$

όπου έχει ληφθεί η προσέγγιση ότι η παράγωγος της συνάρτησης Fermi ως βηματικής είναι μία συνάρτηση δέλτα. Άρα το ρεύμα είναι ανάλογο του εφαρμοζόμενου δυναμικού. Οπότε η αγωγιμότητα μιας νανοδιάταξης είναι:

$$G = \frac{I}{\Phi} \quad (3.108)$$

Με τη βοήθεια των σχέσεων (3.101), (3.103), (3.107) και (3.108) προκύπτει η αγωγιμότητα σε χαμηλές θερμοκρασίες στη μορφή:

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{n,m,s} T(E_F, n, m) = 2 \frac{e^2}{h} \sum_{n,m} T(E_F, n, m) \quad (3.109)$$

όπου το άθροισμα εκτείνεται μόνο για τις καταστάσεις n, m στις οποίες $E < E_F$. Ο παράγοντας:

$$G_0 = \frac{e^2}{h} \quad (3.110)$$

ονομάζεται κβάντο της αγωγιμότητας και ισούται με $39.6 \mu S$. Η αντίστροφη τιμή είναι ίση με $25.2 k\Omega$.

3.4.3 Βαλλιστικό μοντέλο τρανζίστορ MOSFET σύμφωνα με τη θεωρία Kenji Natori

I. Εισαγωγή

Η ανάγκη δημιουργίας ταχύτερων συσκευών επέφερε την απαιτούμενη μείωση διαστάσεων των μικροκυκλωμάτων και των τρανζίστορς που χρησιμοποιούνται σε αυτές, όπως έχει αναφερθεί και στο πρώτο κεφάλαιο. Καθώς όμως τα τρανζίστορς συρρικνώνονται συνεχώς, αποτελεί επιτακτική ανάγκη η λειτουργία σε περιβάλλον χαμηλών θερμοκρασιών προς αποφυγή των υπερθερμάνσεων. Η μεταφορά των

ηλεκτρονίων σε πολύ μικρές διατάξεις σε χαμηλές θερμοκρασίες απαιτεί κβαντομηχανική θεώρηση.

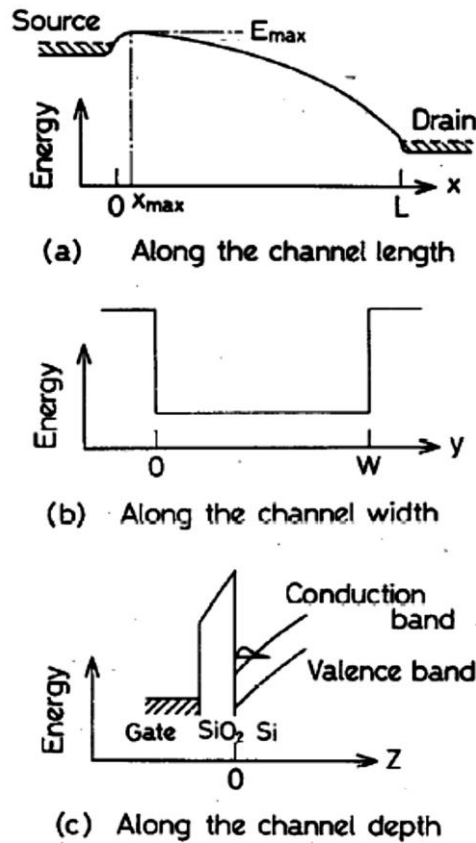
Στις συμβατικές μακροσκοπικές διατάξεις, όπου το μέγεθος των διατάξεων είναι αρκετά μεγαλύτερο από το μήκος ανελαστικής σκέδασης, οι φορείς υπόκεινται σε μεγάλο αριθμό διαδικασιών ανελαστικών σκεδάσεων και άρα η κίνηση λόγω διάχυσης περιγράφεται επαρκώς από την θεωρία κινητικότητας των φορέων. Έστω ότι το μέγεθος μειώνεται αρκετά ώστε να είναι αρκετά μικρός ο αριθμός των σκεδάσεων που υπόκειται ένας φορέας κινούμενος από την πηγή στον απαγωγό αλλά και μικρός ο αριθμός των φορέων που κινούνται και πραγματοποιούν τη λειτουργία του διακόπτη. Τότε στατιστικές διακυμάνσεις τυχαίων σκεδάσεων στη διάταξη επιφέρουν διακυμάνσεις των χαρακτηριστικών τους και οι διατάξεις είναι δύσκολο να ελεγχθούν από κάποιο κύκλωμα. Εάν όμως το μέγεθός των διατάξεων μειωθεί σε τέτοιο βαθμό ώστε να γίνει μικρότερο από το μήκος σκέδασης, τότε κυριαρχεί η βαλλιστική κίνηση φορέων στην μεταφορά, οι φορείς ταξιδεύουν από την πηγή στον απαγωγό σχεδόν χωρίς καθόλου σκεδάσεις και άρα οι στατιστικές διακυμάνσεις σχεδόν εξαφανίζονται.

II Ανάλυση σε Si-MOSFET

Στη βαλλιστική μεταφορά οι φορείς μεταφέρονται από την πηγή στον απαγωγό χωρίς να σκεδάζονται. Οι αλληλεπιδράσεις που απομένουν εκτός από τις σκεδάσεις μπορούν να προσεγγιστούν και να μετασχηματιστούν σε ένα μέσο δυναμικό πεδίου. Σε αυτήν την περίπτωση οι ηλεκτρονιακές καταστάσεις του καναλιού απλοποιούνται σε μεγάλο βαθμό και μία κβαντομηχανική λύση μπορεί να δοθεί, με την προϋπόθεση ότι αναγνωρίζεται ένα μέσο δυναμικό πεδίου. Η ενέργεια δυναμικού ενός φορέα θα αναφέρεται ως δυναμικό στη συνέχεια.

Η καμπύλη δυναμικού η οποία υποδηλώνεται από την χωρική μεταβολή του ελάχιστου της ενέργειας της ζώνης αγωγιμότητας στο Si φαίνεται στο σχήμα 3.2. Κατά μήκος του άξονα x το δυναμικό μεταβάλλεται αργά από την πηγή στον απαγωγό με ένα μέγιστο συνήθως κοντά στην πηγή (E_{\max} στο x_{\max} βλ. Σχ.3.6.α) και μία πιο απότομη κλίση κοντά στον απαγωγό. Αυτή η καμπύλη δυναμικού προκύπτει συνήθως από προσομοιώσεις στις οποίες επιλύεται αυτοσυνεπώς η κατανομή φορτίου με την εξίσωση Poisson. Ωστόσο, τα αποτελέσματα της βαλλιστικής μεταφοράς μπορεί να διαφέρουν αρκετά από τους κλασσικούς υπολογισμούς. Εδώ γίνεται υπόθεση μόνο για κάποια βασικά χαρακτηριστικά που είναι προφανή. Πιο συγκεκριμένα, το δυναμικό στο

κανάλι θεωρείται ότι μεταβάλλεται αργά από το υψηλό επίπεδο της πηγής στο χαμηλό του απαγωγού με ένα μέγιστο στο ενδιάμεσο (E_{max} στο x_{max}). Κατά μήκος του πλάτους του καναλιού, που υποδηλώνεται από τον άξονα y , οι φορείς περιορίζονται μέσα στο κανάλι από απότομα φράγματα στην άκρη (βλ.Σχ.3.6.β). Το δυναμικό προσεγγίζεται με καλή ακρίβεια από ένα τετράγωνο πηγάδι δυναμικού, εάν το πλάτος του καναλιού W είναι αρκετά μεγάλο σε σύγκριση με το εύρος πάνω στο οποίο το δυναμικό μεταβάλλεται. Κατά μήκος του βάθους του καναλιού που υποδηλώνεται από τον άξονα z , οι φορείς περιορίζονται στη διεπιφάνεια του MOS από ένα απότομο τριγωνικό δυναμικό και οι καταστάσεις των ηλεκτρονίων εκφράζονται από διακριτά ενεργειακά επίπεδα.



Σχήμα 3.6: Κατανομή της ενέργειας ηλεκτρονιακού δυναμικού σε μία διάταξη MOSFET. α) Η κατανομή του δυναμικού κατά μήκος του καναλιού. β) Η κατανομή ως προς το πλάτος W γ) Η κατανομή ως προς τη διεύθυνση βάθους z .

Σύμφωνα με τα παραπάνω, οι καταστάσεις των ηλεκτρονίων δίνονται από την επίλυση της παρακάτω εξίσωσης ενεργού μάζας:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(x, z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (3.111)$$

με οριακές συνθήκες:

$$\Psi(x, 0, z) = \Psi(x, W, z) = 0 \quad (3.112)$$

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, y, z)$ θα είναι της μορφής:

$$\Psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) \quad (3.113)$$

Με την προσέγγιση Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) για επίλυση κατά τη διεύθυνση x οι ηλεκτρονιακές καταστάσεις με ενέργεια μεγαλύτερη από E_{\max} εκφράζονται ως εξής:

$$X(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^x p(x) dx\right) \quad (3.114)$$

όπου στην εξίσωση υπάρχει μόνο το προσπίπτον κύμα καθώς για ενέργειες μεγαλύτερες από E_{\max} τα ηλεκτρόνια δεν βλέπουν φράγμα όπου και θα γινόταν ανάκλαση. Στη διεύθυνση y ισχύει η ανάλυση για μονοδιάστατο άπειρο πηγάδι δυναμικού με λύσεις τις παρακάτω:

$$Y(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n_y \pi}{W} \cdot y\right) \quad (3.115)$$

Στη διεύθυνση z (κατά βάθος της διάταξης- $Z(z) = \varphi_{n_z}(x, z)$) επιλύεται η μονοδιάστατη εξίσωση Schroedinger σύμφωνα με παρακάτω:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(x, z)\right) \varphi_{n_z}(x, z) = E_{n_z}(x) \varphi_{n_z}(x, z) \quad (3.116)$$

Τελικά προκύπτει ότι η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x, y, z)$ είναι της μορφής:

$$\Psi(x, y, z) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^x p(x) dx\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n_y \pi}{W} \cdot y\right) \cdot \varphi_{n_z}(x, z) \quad (3.117)$$

Αντίστοιχα,

$$p(x) = \sqrt{2m_x [E - E_n(y) - E_{n_z}(x)]} = \sqrt{2m_x \left[E - \frac{\hbar^2}{2m_y} \left(\frac{n_y \pi}{W}\right)^2 - E_{n_z}(x) \right]} \quad (3.118)$$

Μάλιστα γύρω από το x_{\max} η εξίσωση (3.117) προσεγγίζεται από την έκφραση ενός επίπεδου κύματος ως εξής:

$$\Psi(x, y, z) = \frac{A'}{\sqrt{\hbar k_m}} \exp(ik_m x) \cdot \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n_y \pi}{W} \cdot y\right) \cdot \varphi_{n_z}(x, z) \quad (3.119)$$

με τον κυματαριθμό k_m να είναι:

$$k_m = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_x \left[E - \frac{\hbar^2}{2m_y} \left(\frac{n_y \pi}{W} \right)^2 - E_{n_z}(x_{max}) \right]} \quad (3.120)$$

Η λύση της εξίσωσης (3.111) ικανοποιεί την εξίσωση συνέχειας και θεωρητικά το ρεύμα του MOSFET υπολογιζόμενο σε κάθε σημείο του καναλιού θα πρέπει να δίνει το ίδιο αποτέλεσμα. Ωστόσο, αυτό δεν είναι ακριβές, όπως θα δείξουμε σε επόμενο κεφάλαιο των αποτελεσμάτων και ισχύει μόνο για την περίπτωση ιδανικών συσκευών που δεν έχουν καθόλου παρασιτικά ρεύματα.

Ο Natori [29] υπολογίζει το ρεύμα της διάταξης μέσα στο κανάλι χρησιμοποιώντας τη μέθοδο που προτείνει ο Landauer με έναν τρόπο που εκφράζει το ρεύμα ως ένα άθροισμα πολλών μονοδιάστατων υπο-καναλιών. Κάθε συνιστώσα ρεύματος από κάθε υπο-κανάλι που ρέει σε μία διάσταση δίνεται από το γινόμενο του μοναδιαίου φορτίου επί τον αριθμό των φορέων που ρέουν στο υπο-κανάλι ανά μονάδα χρόνου, επί τον συντελεστή διάδοσης σε κάθε υπο-κανάλι, επί την πιθανότητα ο προορισμός να μην αποτελεί κατειλημμένη στάθμη. Τέλος όλες οι συνιστώσες αθροίζονται σε ένα ολοκλήρωμα ως προς την ενέργεια των φορέων (βλ. Σχέση 3.121).

$$I = q \sum_{valley} \sum_{n_y} \sum_{n_z} \int \left\{ \vec{v} \overline{D(E)} f(\varphi_{FS}, E) [1 - f(\varphi_{FD}, E)] - \vec{v} \overline{D(E)} f(\varphi_{FD}, E) [1 - f(\varphi_{FS}, E)] \right\} T(E) dE \quad (3.121)$$

όπου \vec{v} είναι η ταχύτητα ομάδας των φορέων ενός μονοδιάστατου ηλεκτρονιακού κύματος που διαδίδεται κατά τη διεύθυνση από την πηγή προς τον απαγωγό ενώ \vec{v} είναι η ταχύτητα ομάδας των φορέων ενός μονοδιάστατου ηλεκτρονιακού κύματος που διαδίδεται από τον απαγωγό προς την πηγή. $\overline{D(E)}$ είναι η πυκνότητα των καταστάσεων για αυτό το ηλεκτρονιακό κύμα υπολογισμένα κοντά στην περιοχή της πηγής και $\overline{D(E)}$ η πυκνότητα των καταστάσεων για αυτό το ηλεκτρονιακό κύμα υπολογισμένα κοντά στην περιοχή του απαγωγού, όσον αφορά στο κάθε υπο-κανάλι.

Η συνάρτηση Fermi δίνει την πιθανότητα κατάληψης μιας στάθμης από έναν φορέα και ορίζεται ως $f(\varphi_{FS}, E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E - \varphi_{FS}}{kT}\right) \right]^{-1}$ για την πηγή και $f(\varphi_{FD}, E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E - \varphi_{FD}}{kT}\right) \right]^{-1}$ για τον απαγωγό.

Το γινόμενο $\vec{v} \cdot \overline{D(E)} \cdot f(\varphi_{FS}, E)$ (της ταχύτητας ομάδας επί την πυκνότητα των καταστάσεων επί την πιθανότητα κατάληψης) δίνει τον αριθμό των φορέων της

πηγής που ρέουν σε κάθε υπο-κανάλι και πολλαπλασιάζεται με τον όρο $(1 - f(\varphi_{FD}, E))$ που είναι η πιθανότητα μη κατειλημμένης στάθμης στον απαγωγό. Κι αυτό γιατί οι φορείς μπορούν να μετακινούνται μόνο από κατειλημμένες ενεργειακές καταστάσεις της πηγής $(f(\varphi_{FS}, E))$ σε μη-κατειλημμένες ενεργειακές στάθμες του απαγωγού $(1 - f(\varphi_{FD}, E))$ και το αντίστροφο. Στη θεωρία WKB τα μεγέθη \vec{v} και $\overrightarrow{D(E)}$ εκφράζονται ως εξής:

$$\vec{v} = \frac{dE}{dp(x)} = \frac{p(x)}{m_x} \quad (3.122)$$

$$\overrightarrow{D(E)} = \left\{ \pi \hbar \left[\frac{dE}{dp(x)} \right] \right\}^{-1} = \frac{m_x}{\pi \hbar p(x)} \quad (3.123)$$

Το γινόμενο τους δίνει τη σταθερά $(\pi \hbar)^{-1}$. Επίσης $T(E)$ είναι ο συντελεστής διάδοσης στο υπο-κανάλι με ενέργεια E .

Σύμφωνα πάντα και με την προσέγγιση Landauer, η πηγή και ο απαγωγός θεωρούνται ιδανικά ρεζερβουάρ φορέων με ενέργειες Fermi φ_{FS} και φ_{FD} αντίστοιχα, τα οποία τροφοδοτούν με φορείς το κανάλι. Η βαλλιστική μεταφορά υποθέτει $T(E)=1$ για τις επιτρεπόμενες ενέργειες ($E > E_{n_z}(x_{max})$) που διαδίδονται κατά μήκος του καναλιού. Επίσης $\varphi_{FD} = \varphi_{FS} - qV_D$ όπου V_D είναι το εφαρμοζόμενο δυναμικό. Συνεισφορές από αποσβένοντα κύματα αγνοούνται. Όταν το πλάτος του καναλιού δεν είναι υπερβολικά μικρό, η άθροιση ως προς n_y αντικαθίσταται από ολοκλήρωση ως προς την ενέργεια με την μονοδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας καταστάσεων να πολλαπλασιάζεται. Τότε η εξίσωση (3.121) καταλήγει ως εξής:

$$I = W \frac{\sqrt{2}q(kT)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{n_z} \sqrt{m_y} \left[F_{1/2} \left(\frac{\varphi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{kT} \right) - F_{1/2} \left(\frac{\varphi_{FS} - E_{n_z}(x_{max}) - qV_D}{kT} \right) \right] \quad (3.124)$$

όπου

$$F_{1/2}(u) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{y}}{1 + \exp(y - u)} dy \quad (3.125)$$

είναι το ολοκλήρωμα Fermi-Dirac.

Η πυκνότητα φορτίου γύρω από το x_{max} εκτιμάται με τον ίδιο τρόπο. Οι ηλεκτρονιακές καταστάσεις των υπο-καναλιών που διαδίδονται από την πηγή στον

απαγωγό είναι γεμάτες έως το επίπεδο Fermi της πηγής, ενώ αυτές που διαδίδονται από τον απαγωγό στην πηγή είναι γεμάτες έως το επίπεδο Fermi του απαγωγού. Χρησιμοποιώντας τη δυδιάστατη πυκνότητα καταστάσεων και τη συνάρτηση κατανομής Fermi προκύπτει η εξής σχέση για την πυκνότητα φορτίου φορέων:

$$|Q| = \frac{qkT}{2\pi\hbar^2} \sum_{valley} \sum_{n_z} \sqrt{m_x m_y} \ln \left\{ \left[1 + \exp \left(\frac{\varphi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{kT} \right) \right] \right. \\ \left. \cdot \left[1 + \exp \left(\frac{\varphi_{FS} - E_{n_z}(x_{max}) - qV_D}{kT} \right) \right] \right\} \quad (3.126)$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Προσομοίωση δύο διαστάσεων με επίλυση των εξισώσεων Poisson-Schroedinger-Continuity αυτοσυνεπώς σε τρανζίστορς επίδρασης πεδίου (FETs) κβαντικού πηγαδιού (QW) μεγάλου και μικρού καναλιού από υλικά III-V.

4.1 Εισαγωγή

Πρόσφατα αποδείχτηκε ότι τα κβαντομηχανικά αποτελέσματα της θεωρίας του Landauer για την αγωγιμότητα, που εφαρμόζονται σε ένα απλό FET με ένα μόνο στρώμα-το κανάλι- μπορούν να παρουσιαστούν με νέο τρόπο. Πιο συγκεκριμένα, μπορούν να γραφτούν με την κλασσική μορφή της εξίσωσης ολίσθησης-διάχυσης αλλά με μία επαναπροσδιορισμένη κινητικότητα και ταχύτητα εισαγωγής (injection velocity). Με βάση αυτήν υπόθεση, στην παρούσα εργασία επιλύονται αυτοσυνεπώς σε δύο διαστάσεις οι τρεις διαφορικές εξισώσεις Poisson, Schroedinger και Continuity (PSC) για δύο διατάξεις FET κβαντικού πηγαδιού μεγάλου καναλιού $L_g=200\text{nm}$ και $L_g=65\text{nm}$, και μία διάταξη μικρού καναλιού. Τα αποτελέσματα δείχνουν πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα με την προϋπόθεση ότι η ταχύτητα κόρου v_{sat} και η κινητικότητα μ επαναπροσδιορίζονται στη διάταξη μικρού καναλιού ώστε το υπολογισμένο ρεύμα να συμφωνεί με το πειραματικό σε υψηλές τιμές δυναμικού V_G . Η συγκεκριμένη τιμή έχει χρησιμοποιηθεί για όλες τις τιμές δυναμικού V_G . Με τους συγκεκριμένους υπολογισμούς προκύπτουν χρήσιμες πληροφορίες για την περιοχή υπο-κατωφλίου και τα παρασιτικά ρεύματα. Οι πληροφορίες αυτές χάνονται στους αυστηρούς κβαντομηχανικούς υπολογισμούς (Landauer-Green Functions) συμπαγών μοντέλων οι οποίοι εφαρμόζονται σε FETs με ένα μόνο στρώμα (το κανάλι).

Τα MOSFETs με κανάλια III-V - που ονομάζονται και FETs κβαντικού πηγαδιού (Quantum Well FETs -QWFETs) αποτελούν πιθανόν την κυρίαρχη τεχνολογία μετά το Si [85], [90], [102], [105]. Αυτή η προσδοκία προκύπτει από την αυξημένη κινητικότητα των συγκεκριμένων υλικών όπως περιγράφονται λεπτομερώς στην [1]. Η έρευνα γύρω από αυτές τις διατάξεις είναι εντεταμένη [30-45]. Στην αρχή το ενδιαφέρον επικεντρωνόταν σε διατάξεις τύπου αντιστροφής (inversion type) [30-31] αλλά πολύ σύντομα οι συγκεκριμένες διατάξεις εγκαταλείφθηκαν για χάρη διατάξεων με ενδογενή-τύπου κανάλια (intrinsic) τα οποία γεμίζουν με ηλεκτρόνια από ένα στρώμα παροχής (supply layer) [32-40]. Επιπρόσθετα, τα FETs μεγάλου καναλιού [32] γρήγορα αντικαταστάθηκαν από νανομετρικής κλίμακας FETs [33-45] και προς

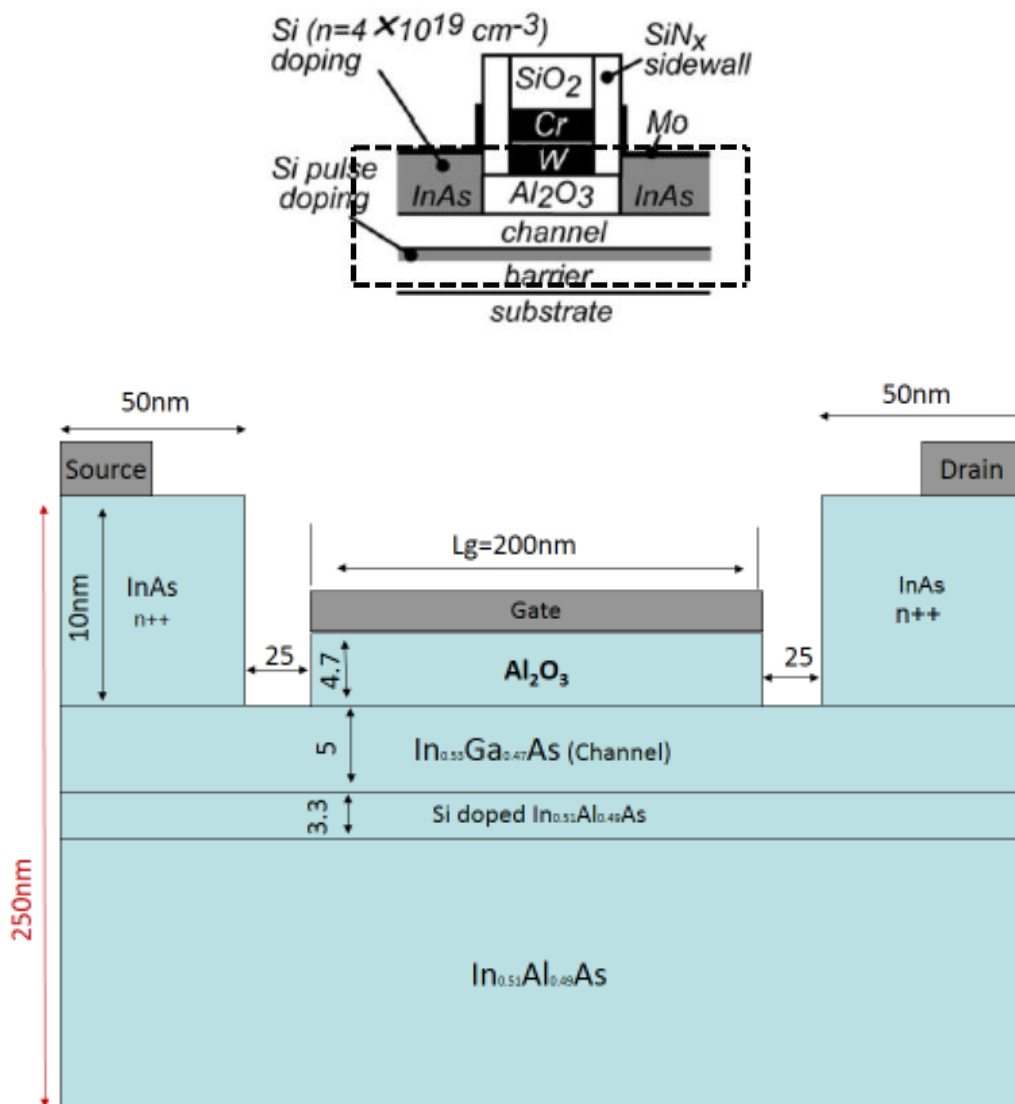
το παρόν υπάρχουν QWFETs με κανάλια από InGaAs με μήκος πύλης 30-60nm τα οποία παρουσιάζουν πολύ καλή απόδοση με κλίση της υποκατωφλίου περιοχής στα 96mV/dec και μία διαγωγιμότητα στα 2.4 mS/ μm [37-38]. Σε σύγκριση με πειραματικές εργασίες, οι θεωρητικές που έχουν γίνει πάνω στο συγκεκριμένο θέμα είναι σπάνιες. Υπάρχουν δύο που αντιμετωπίζουν τα παρασιτικά ρεύματα [43-44]. Υπάρχει μόνο μία εργασία που αναλύει όλη τη διάταξη ενός QWFET και χρησιμοποιεί στην ανάλυση όλα τα στρώματα της διάταξης από τους Hwang et.al. [45]. Εκεί χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις Poisson και Continuity αλλά όχι η Schroedinger και άρα δεν λαμβάνονται υπόψη φαινόμενα περιορισμού. Στην παρούσα εργασία επιλύονται αυτοσυνεπώς σε δύο διαστάσεις οι τρεις διαφορικές εξισώσεις Poisson, Schroedinger και Continuity για την ανάλυση των QW-FETs. Η μέθοδος είχε αρχικά εφαρμοστεί με επιτυχία σε Si MOSFETs [46-47] και στη συνέχεια τροποποιήθηκε για χρήση σε HEMTs [48-49] και σε απλά QW-FETs [50] καναλιού επιφανείας.

Η φυσική που διέπει τη μεταφορά φορτίου για τα τρανζίστορς νανομετρικής κλίμακας ($L_g=30\text{nm}$) είναι πολύ διαφορετική από αυτήν που διέπει τα FETs μεγάλου καναλιού ($L_g=65, L_g=200\text{nm}$) που ακολουθούν την εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης. Η μεταφορά στα FETs μικρού καναλιού είναι βαλλιστική και απαιτεί μία κβαντική προσέγγιση, όπως είναι η θεωρία του Landauer για να αναλυθεί.

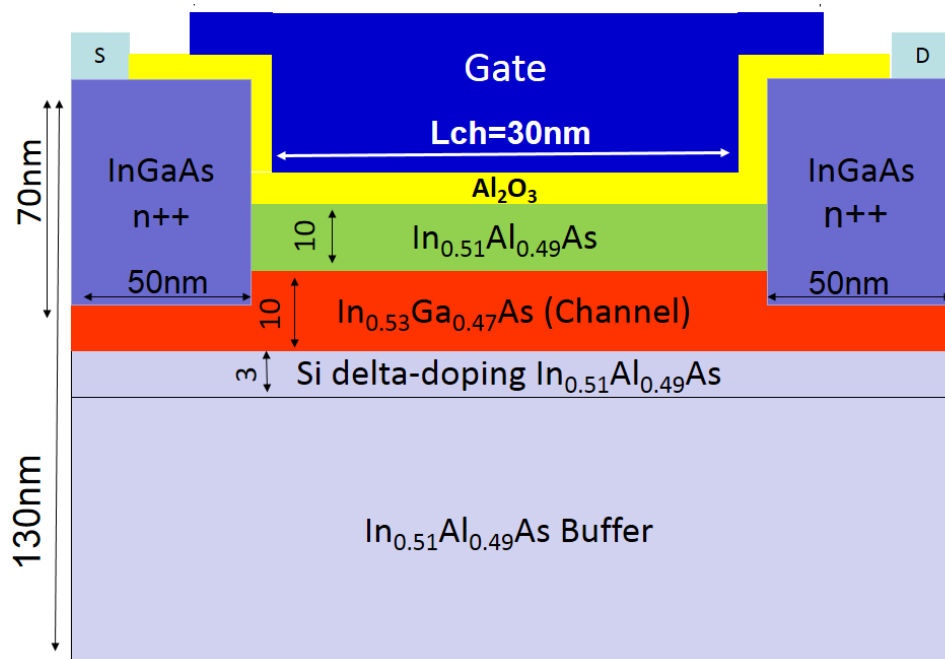
Ωστόσο, πρόσφατα, αναγνωρίστηκε το γεγονός ότι τα αποτελέσματα της θεωρίας του Landauer για μία απλή διάταξη που αποτελείται μόνο από ένα στρώμα που είναι και το κανάλι και το οποίο συνδέεται με δύο ρεζερβουάρς φορέων που είναι η πηγή και ο απαγωγός μπορούν να γραφτούν με τη μορφή της εξίσωσης ολίσθησης-διάχυσης με μία προϋπόθεση. Η προϋπόθεση είναι η κινητικότητα μ και η ταχύτητα κόρου v_{sat} να μεταφραστούν ως μία προφανής κινητικότητα μ_{app} και μία ταχύτητα εισαγωγής v_{inj} αντίστοιχα [51]. Η συγκεκριμένη ισοδυναμία αναφέρεται σε ένα απλό μοντέλο με ένα στρώμα, ενώ τα σύγχρονα QW-FETs αποτελούνται από πολλά στρώματα. Στην παρούσα εργασία θα αποδειχθεί ότι η κλασική ανάλυση στην οποία επιλύονται αυτοσυνεπώς σε δύο διαστάσεις οι τρεις διαφορικές εξισώσεις Poisson, Schroedinger και Continuity μπορεί να εφαρμοστεί και σε QW-FETs μικρού καναλιού πολλών στρωμάτων, αρκεί να προσαρμοστεί η αριθμητική τιμή της ταχύτητας κόρου κάθε στρώματος του τρανζίστορ σύμφωνα με την αρχή ισοδυναμίας που περιγράφηκε παραπάνω [51].

4.2 Μέθοδος

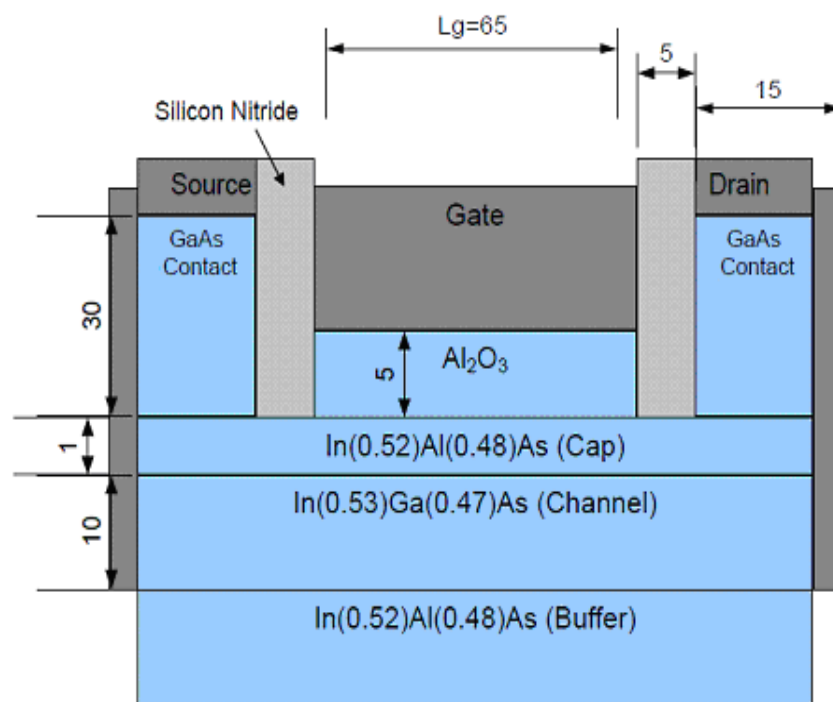
Θα αναλυθούν τρεις διατάξεις (βλ. Σχήμα 4.1). Μία μεγάλου καναλιού με μήκος καναλιού $L_g=200\text{nm}$ [32], μία μικρού καναλιού $L_g=30\text{nm}$ [36] και μία θεωρητική με μήκος καναλιού $L_g=65\text{nm}$ [50] για την οποία όμως δεν υπάρχουν πειραματικά δεδομένα. Η μέθοδος που αρχικά είχε χρησιμοποιηθεί σε Si-MOSFETs θα χρησιμοποιηθεί σε αυτήν την εργασία σε QW-FETs πολλών στρωμάτων.



α. Διάταξη Μεγάλου καναλιού



β. Διάταξη Μικρού καναλιού



γ. Θεωρητική Διάταξη

Σχήμα 4.1 Διατάξεις QW-FETs που αναλύθηκαν με προσομοίωση δύο διαστάσεων με την επίλυση των εξισώσεων Poisson-Schrodinger-Continuity. α) Διάταξη μεγάλου καναλιού $L_g=200\text{nm}$ β) Διάταξη μικρού καναλιού $L_g=30\text{nm}$ γ) Θεωρητική Διάταξη $L_g=65\text{nm}$.

Οι εξισώσεις Poisson-Schroedinger και Continuity (PSC) επιλύονται ως σύστημα τριών διαφορικών εξισώσεων με τρεις αγνώστους: το δυναμικό U , την πυκνότητα φορτίου n και τη στάθμη Fermi E_{Fn} . Γράφονται ως εξής:

1) Η εξίσωση Poisson

$$\nabla^2 U = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (4.1)$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα φορτίου.

2) Η εξίσωση Continuity

$$\nabla J_n = 0 \quad (4.2)$$

με

$$J_n = n \cdot \mu_n \nabla E_{Fn} \quad (4.3)$$

όπου J_n είναι η πυκνότητα του ρεύματος και E_{Fn} η στάθμη Fermi και

3) Η εξίσωση Schroedinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_n^*} \nabla^2 + U_{tot} \right) \Psi(r) = (E - E_C) \Psi(r) \quad (4.4)$$

όπου E_C είναι το κατώτερο άκρο της ζώνης αγωγιμότητας και m_n^* είναι η ενεργός μάζα της ζώνης αγωγιμότητας. Όλα τα άλλα σύμβολα έχουν τη συμβατική σημασία τους.

Οι παραπάνω εξισώσεις επιλύονται σε δύο διαστάσεις που είναι το βάθος και το μήκος της διάταξης όπου τα κβαντικά φαινόμενα είναι σημαντικά. Κατά μήκος της τρίτης διάστασης, που είναι το πλάτος, η διάταξη θεωρείται ότι βρίσκεται σε μακροσκοπική διάσταση ώστε οι ιδιοσυναρτήσεις κατά μήκος της συγκεκριμένης διάστασης να περιγράφονται από τη μονοδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας καταστάσεων. Οι οριακές συνθήκες δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις:

1) **Για την εξίσωση Poisson** (κατά μήκος των ελεύθερων επιφανειών):

$$\Psi_{GATE} = V_{GS} - \Phi_B, \Psi_D = \Psi_S + V_{DS}, \text{ και } \partial \Psi / \partial s = 0 \quad (4.5)$$

2) **Για την εξίσωση Continuity** (κατά μήκος των ελεύθερων επιφανειών και της επιφάνειας του οξειδίου):

$$E_{fn(SOURCE)} = 0, E_{fn(DRAIN)} = -V_{DS} \text{ and } \partial E_{fn} / \partial s = 0 \quad (4.6)$$

3) **Για την εξίσωση Schroedinger:**

$$\varphi=0 \text{ Στις οριακές επιφάνειες του κβαντικού κουτιού} \quad (4.7)$$

Στην επίλυση των εξισώσεων Schroedinger και Poisson αξίζει να σημειωθεί ότι η πυκνότητα φορτίου n μέσα στο κβαντικό πηγάδι προκύπτει (σε κάθε στάδιο μιας επανάληψης) χωρίζοντας το φάσμα ενεργειών της εξίσωσης Schroedinger σε δύο μέρη (βλ. Σχήμα 4.2):

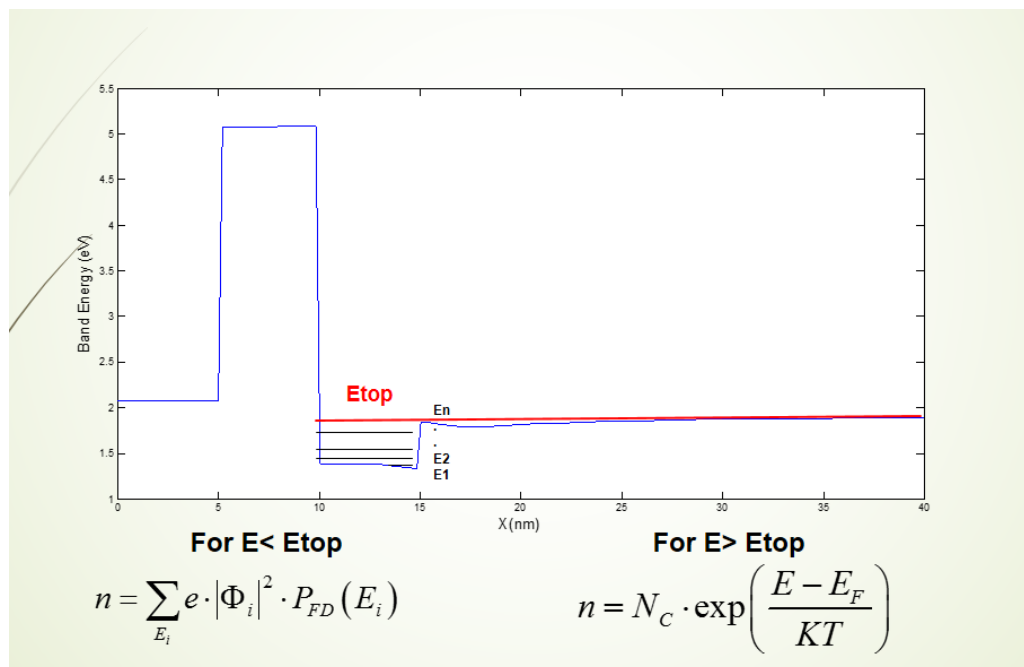
- 1) Στο φάσμα ενεργειών κάτω από το μέγιστο του φράγματος $E < E_{top}$, όπου και υπολογίζεται κβαντομηχανικά από την παρακάτω σχέση:

$$n = \sum_i |\Psi_i|^2 * P_{FD}(E_i) * D_{1D}(E_i) \quad (4.5)$$

όπου Ψ_i είναι οι ιδιοσυναρτήσεις, P_{FD} είναι η συνάρτησης κατάληψης Fermi-Dirac και $D_{1D}(E_i)$ είναι η μονοδιάστατη πυκνότητα καταστάσεων που έχει αναφερθεί και παραπάνω.

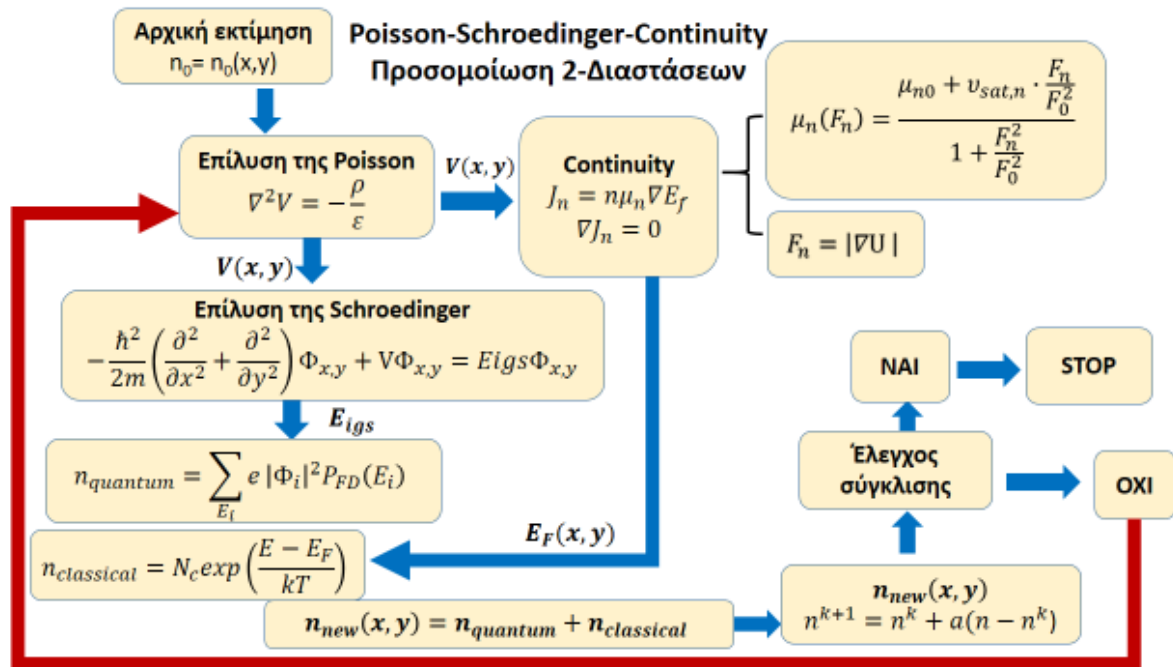
- 2) Στο φάσμα ενεργειών πάνω από το μέγιστο του φράγματος $E > E_{top}$, όπου η πυκνότητα φορτίου n συμπεριφέρεται ως τρισδιάστατη και προκύπτει από το σύνηθες ολοκλήρωμα Fermi της τάξεως $1/2$.

$$n = F_{1/2}(E_F - E_C) \quad (4.6)$$



Σχήμα 4.2: Η πυκνότητα φορτίου n αποτελείται από το κβαντικό φορτίο του πηγαδιού αθροιζόμενο για όλες τις ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις κάτω από το μέγιστο του πηγαδιού $E < E_{top}$ και ένα κλασσικό φορτίο σύμφωνα με τη γνωστή θεωρία των ημιαγωγών για όλες τις ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις πάνω από το μέγιστο του πηγαδιού $E > E_{top}$.

Επιπρόσθετα, το κβαντικό πηγάδι δεν λαμβάνεται μόνο μέσα στο στρώμα του καναλιού, αλλά περιλαμβάνει και μέρος των στρωμάτων κάτω από το οξειδίο ή το κανάλι μέσα στα οποία η κυματοσυνάρτηση φθίνει εκθετικά. Επίσης εκτείνεται μερικά nm μέσα στην περιοχή source και drain (βλ.Σχ.4.1).



Σχήμα 4.3: Διάγραμμα ροής επίλυσης του συστήματος των τριών διαφορικών εξισώσεων Poisson-Schroedinger-Continuity (PSC) σε δύο διαστάσεις αυτοσυνεπώς.

Η επίλυση των τριών εξισώσεων ακολουθεί το παραπάνω διάγραμμα ροής. Γίνεται μία αρχική εκτίμηση ενός φορτίου n_0 το οποίο εισάγεται μέσα στην Poisson και η εξίσωση επιλύεται ως προς το δυναμικό $V(x,y)$. Στη συνέχεια το δυναμικό $V(x,y)$ εισάγεται μέσα στην εξίσωση Schroedinger και από την επίλυση προκύπτουν οι ιδιοτιμές E_{igs} . Οι ιδιοτιμές E_{igs} χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό ενός κβαντικού φορτίου n_q σύμφωνα με την εξίσωση (4.5). Επιπρόσθετα το δυναμικό $V(x,y)$ εισέρχεται ως είσοδος στην συνάρτηση συνεχείας από όπου και υπολογίζονται οι ψευδοσυναρτήσεις των επιπέδων Fermi σε κάθε επανάληψη. Στη συνέχεια οι τιμές των επιπέδων Fermi-συναρτήσεων $E_F(x,y)$ - εισέρχονται στην εξίσωση (4.6) για τον υπολογισμό ενός κλασσικού φορτίου n_{cl} . Έτσι υπολογίζεται ένα νέο φορτίο $n' = n_q + n_{cl}$ και γίνεται έλεγχος ανα επανάληψη αν ικανοποιούνται τα εξής κριτήρια σύγκλισης:

$$1. \frac{\|[\Psi]^k - [\Psi]^{k-1}\|}{\|[\Psi]^{k-1}\|} \leq e, \quad \|\Psi\| = \left(\sum_{i,j} \Psi_{i,j}^2 \right)^{1/2} \quad (4.7)$$

όπου για παράδειγμα $e=10^{-4}$ για ικανοποιητική σύγκλιση. Ο συμβολισμός $\|\Psi\|$ αναφέρεται σε κάποια νόρμα του πίνακα Ψ όπως φαίνεται παραπάνω.

$$2. n^{k+1} = n^k + a(n^{new} - n^k) \quad (4.8)$$

Για να εξασφαλιστεί η σύγκλιση χρησιμοποιείται η παράμετρος χαλάρωσης a . Συγκεκριμένα, έστω n^k η εκτίμηση για τη συγκέντρωση ηλεκτρονίων μετά από k επαναλήψεις που υπεισέρχεται στην εξίσωση Poisson και n^{new} η εκτίμηση που προκύπτει από τη λύση της εξίσωσης συνεχείας στο βήμα $k+1$. Η νέα εκτίμηση για το n προκύπτει από την παραπάνω σχέση. Η παράμετρος a κυμαίνεται μεταξύ 0 και 1, αλλά συνήθως επιλέγεται $0.1 < a < 0.5$. Επιλέγοντας μικρότερη τιμή για το a επιβραδύνουμε τη σύγκλιση, αλλά εξασφαλίζουμε ότι δε θα έχουμε ταλαντώσεις στη διαδικασία επίλυσης.

Αν ικανοποιούνται τα κριτήρια σύγκλισης η διαδικασία σταματά. Αν όχι, το νέο φορτίο n^{k+1} εισέρχεται και πάλι ως είσοδος στην εξίσωση Poisson και η διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου να ικανοποιηθούν τα παραπάνω δύο κριτήρια σύγκλισης.

Η προσομοίωση PSC δύο διαστάσεων ακολουθήθηκε και για τις τρεις διατάξεις (θεωρητική $L_g=65\text{nm}$, μεγάλου καναλιού $L_g=200\text{nm}$ και μικρού καναλιού $L_g=30\text{nm}$). Είναι σημαντικό όμως να επισημανθεί σε αυτό το σημείο, ότι στην ανάλυση της θεωρητικής διάταξης $L_g=65\text{nm}$, αλλά και της διάταξης με μεγάλο κανάλι $L_g=200\text{nm}$ δεν έχει γίνει καμία προσαρμογή παραμέτρων!

Ωστόσο, η ανάλυση των διατάξεων πολύ μικρού καναλιού, όπως είναι η διάταξη των $L_g=30\text{nm}$, απαιτεί μία διαφορετική προσέγγιση. Στην συγκεκριμένη προσέγγιση, γίνεται προσαρμογή της ταχύτητας κόρου v_{sat} , και κατά συνέπεια και της κινητικότητας μ , η οποία όμως όπως έχει αποδειχθεί βρίσκεται σε συνέπεια με τη θεωρία Landauer [51].

Πιο συγκεκριμένα, η σχέση της πυκνότητας του ρεύματος $J_n = n\mu_n \nabla E_{fn}$ είναι γνωστό ότι εμπεριέχει τα ρεύματα ολίσθησης, διάχυσης αλλά και θερμικής εκπομπής. Όταν η σχέση εφαρμοστεί σε ένα MOSFET με ένα μόνο στρώμα -το κανάλι-μεταφέρει τις γνωστές χαρακτηριστικές του ρεύματος $I_{DS} - V_{GS}$ [51]:

$$I_{DLIN} = \frac{W}{L} \mu_{eff} Q_n V_{DS} \quad (4.9)$$

$$I_{DSAT} = W Q_n v_{sat} \quad (4.10)$$

όπου L και W είναι το μήκος και το πλάτος του QW FET, μ_{eff} είναι η ενεργός κινητικότητα και Q_n είναι το φορτίο κάτω από την πύλη. Από την άλλη πλευρά, αν εφαρμοστεί η θεωρία Landauer σε ένα MOSFET με ένα μόνο στρώμα -το κανάλι- προκύπτουν οι παρακάτω εξισώσεις:

$$I_{DLIN} = T_{LIN} W Q_n (V_{GS}, V_{DS}) \frac{v_T}{2 \left(\frac{k_B T}{q} \right)} V_{DS} \quad (4.11)$$

$$I_{DSAT} = \left(\frac{T_{SAT}}{2 - T_{SAT}} \right) W Q_n (V_{GS}, V_{DS}) v_T \quad (4.12)$$

όπου T_{LIN} και T_{SAT} είναι οι συντελεστές διάδοσης για την γραμμική περιοχή και για την περιοχή κόρου αντίστοιχα και v_T είναι η θερμική ταχύτητα των ηλεκτρονίων. Όλα τα υπόλοιπα σύμβολα έχουν τη συμβατική σημασία τους.

Γίνεται λοιπόν εμφανές ότι οι δύο εκφράσεις μπορούν να γίνουν ισοδύναμες εάν γίνουν οι εξής δύο αντικαταστάσεις:

$$\mu_{eff} = T_{LIN} * \frac{v_T}{2 \left(\frac{k_B T}{q} \right)} \quad (4.13)$$

$$u_{sat} = \left(\frac{T_{SAT}}{2 - T_{SAT}} \right) * v_T \quad (4.14)$$

Σε αυτήν την περίπτωση μπορούν και οι δύο περιοχές, η γραμμική και η περιοχή κόρου να προσεγγιστούν με τη χρήση των κλασικών εκφράσεων του MOSFET, με την προϋπόθεση ότι γίνεται προσαρμογή της ταχύτητας κόρου u_{sat} και της κινητικότητας μ σύμφωνα με τις παραπάνω εξισώσεις. Η συγκεκριμένη μέθοδος θα αναφέρεται από αυτό το σημείο και μετά ως μέθοδος PSC με κβαντικές διορθώσεις.

Η συγκεκριμένη ισοδυναμία ισχύει για ένα σύστημα με ένα μόνο στρώμα -το κανάλι- στο οποίο οι τάσεις V_S και V_D εφαρμόζονται στα δύο άκρα του συστήματος. Αντικείμενο της συγκεκριμένης εργασίας αποτελεί η διερεύνηση σχετικά με το εάν η ισοδυναμία αυτή ισχύει για πραγματικά QW-FETs τα οποία αποτελούνται από πολλά στρώματα, δηλαδή 3-5 τουλάχιστον (εξαιρούνται τα στρώματα που χρησιμοποιούνται για μηχανική σταθερότητα).

Όταν το μήκος της διάταξης είναι μικρότερο από τη μέση ελεύθερα διαδρομή τότε ο συντελεστής διάδοσης στην περιοχή κόρου T_{SAT} είναι πολύ κοντά στη μονάδα και επομένως και ο όρος $\left(\frac{T_{SAT}}{2 - T_{SAT}} \right)$ είναι επίσης μονάδα, ώστε η συγκεκριμένη

αντικατάσταση (4.14) να λαμβάνει υπόψη τα βαλλιστικά φαινόμενα για διατάξεις μικρού μήκους. Επομένως, με δεδομένο ότι η ταχύτητα κόρου μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως παράμετρος, επιλέγεται να συνεχιστεί η χρήση της παρακάτω σχέσης για την κινητικότητα:

$$\mu_n(F_n) = \frac{\mu_{n0} + v_{sat,n} * \frac{F_n}{F_0^2}}{1 + \frac{F_n^2}{F_0^2}} \quad (4.15)$$

$$F_n = |\nabla U| \quad (4.16)$$

όπου μ_{n0} είναι η κινητικότητα χαμηλών πεδίων, U είναι το δυναμικό και F_0 μία σταθερά ίση με $3.1 * 10^5$ V/m [52]. Η ποσότητα v_{sat} έχει προσαρμοστεί μόνο για τις διατάξεις μικρού καναλιού ώστε να αναπαραγάγει το σωστό ρεύμα I_D σε υψηλές τιμές του δυναμικού της πύλης V_G .

Οι τιμές των ΔE_c για τα υλικά InGaAs και InAlAs αλλά και οι τιμές των φραγμάτων Schottky Φ_B για το οξειδίο του Al_2O_3 έχουν αποκτηθεί από τη βιβλιογραφία [52,53]. Οι τιμές των φραγμάτων Schottky Φ_B έχουν ελάχιστα τροποποιηθεί κατά 0.2-0.3eV. Ωστόσο, οι τιμές Φ_B βρίσκονται μέσα στα όρια του να είναι κοντά στο μισό του ενεργειακού διάκενου που για το Al_2O_3 είναι 9eV. Επίσης, όπως άλλωστε φαίνεται και από το Σχήμα 4.5, οι τιμές Φ_B μετατοπίζουν σταθερά την καμπύλη δεξιά ή αριστερά, χωρίς να αλλάζει η μορφή της. Οι ίδιες τιμές ΔE_c έχουν χρησιμοποιηθεί για όλες τα διατάξεις καθώς αποτελούνται από τα ίδια υλικά. Επιπλέον, κατά τη διάρκεια της έρευνας, έγινε αντιληπτό ότι δεν ήταν απαραίτητο να προσομοιωθεί ολόκληρη η διάταξη αλλά μόνο 3-5 στρώματα κοντά στο κανάλι. Το πεδίο της προσομοίωσης φαίνεται στο σχήμα 4.1.

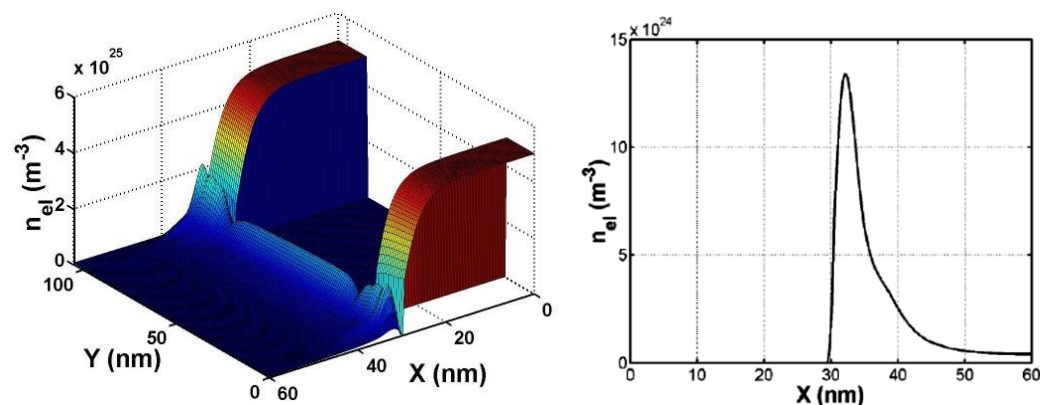
4.3 Αποτελέσματα Μεθόδου PSC

4.3.1 Αποτελέσματα για τη θεωρητική Διάταξη $L_g=65\text{nm}$.

Η παραπάνω μέθοδος ακολουθείται και για τις τρεις διατάξεις του σχήματος (4.1). Αρχικά θα αναφερθούν τα αποτελέσματα της ανάλυσης για την θεωρητική διάταξη των 65nm. Η διάταξη είναι ένα III-V QW-FET που έχει ως οξειδίο- Al_2O_3 κάτω από την πύλη και κάτω από το οξειδίο το στρώμα InAlAs λειτουργεί ως στρώμα παροχής (supply layer). Το κανάλι βρίσκεται ακριβώς κάτω από το στρώμα παροχής και ακουμπά πάνω σε ένα p-τύπου στρώμα (buffer). Μεταλλικές επαφές στην πηγή και στον απαγωγό δημιουργούνται από τις κολώνες GaAs οι οποίες νοθεύονται ισχυρά. Τα μέταλλα που προτείνονται για την πύλη είναι το βολφράμιο και το Νιτρίδιο του Τιτανίου. Τα φράγματα Schottky σε αυτά τα υλικά πάνω στο οξειδίο θα μετατοπίσουν την τάση κατωφλίου V_T της διάταξης. Παρακάτω θα εξεταστούν η μεταβολή της τάσης κατωφλίου V_T και της κλίσης της υπο-κατωφλίου περιοχής (subthreshold slope-SS) σε συνάρτηση με το μήκος της πύλης L_g και της τιμής του φράγματος Schottky Φ_B πάνω στη διεπιφάνεια οξειδίου-μετάλλου.

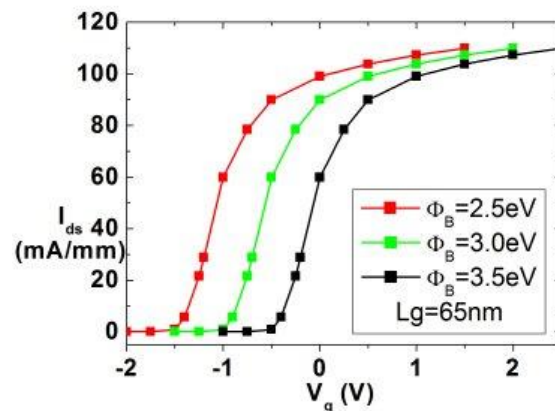
Στο Σχήμα 4.4.α φαίνεται η πυκνότητα φορτίου σε δύο διαστάσεις για όλη τη διάταξη για $V_{DS}=0.5\text{V}$ και $V_{GS}=0.5\text{V}$. Είναι εμφανής ο σχηματισμός του καναλιού και η αυξημένη πυκνότητα φορτίου κάτω από την πηγή και τον απαγωγό, περιοχές που έχουν υπερνόθευση. Επιπλέον είναι ευδιάκριτη η παντελής έλλειψη φορτίου μέσα στο οξειδίο και σε βάθος αρκετά μακριά από το κανάλι.

Στο Σχήμα 4.4.β φαίνεται η πυκνότητα ηλεκτρονιακού φορτίου σε μονοδιάστατη τομή στο μέσο της διάταξης κατά βάθος της διάταξης. Ο σχηματισμός του καναλιού είναι προφανής για την περιοχή 31nm-41nm.



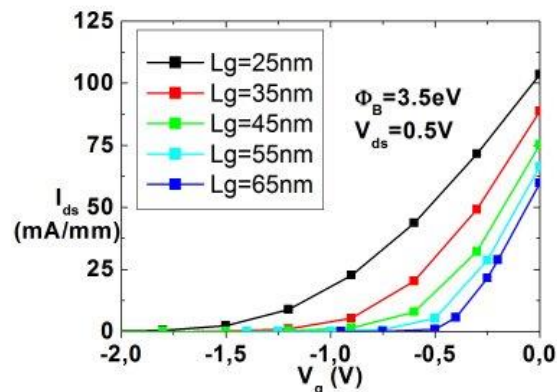
Σχήμα 4.4: α) Αναπαράσταση πυκνότητας φορτίου σε δύο διαστάσεις για όλη τη διάταξη ($\Phi_B=2.5\text{eV}$, $V_{GS}=0.5\text{V}$, $V_{DS}=0.5\text{V}$, $L_g=65\text{nm}$) β) Αναπαράσταση της πυκνότητας ηλεκτρονιακού φορτίου σε μία διάσταση (κατά βάθος της διάταξης) στο μέσο της πύλης ($\Phi_B=2.5\text{eV}$, $V_{GS}=0.5\text{V}$, $V_{DS}=0.5\text{V}$, $L_g=65\text{nm}$)

Οι χαρακτηριστικές $I_{DS}-V_{GS}$ για διαφορετικά φράγματα Schottky Φ_B φαίνονται στο Σχήμα 4.5 για μήκος πύλης $L_g=65nm$. Είναι χαρακτηριστικό το γρήγορο άνοιγμα του τρανζίστορ. Ωστόσο, οι τάσεις κατωφλίου που προκύπτουν από το συγκεκριμένο διάγραμμα είναι αρνητικές και για μία τάση κατωφλίου κοντά στο $0V$, $V_T=0V$ που απαιτείται στα CMOS μία τιμή Φ_B περίπου $3.5-4.0eV$ είναι απαραίτητη. Οι τιμές αυτές για τα φράγματα Schottky Φ_B είναι δυνατές εάν στην πύλη χρησιμοποιηθούν Cu ή W [54].

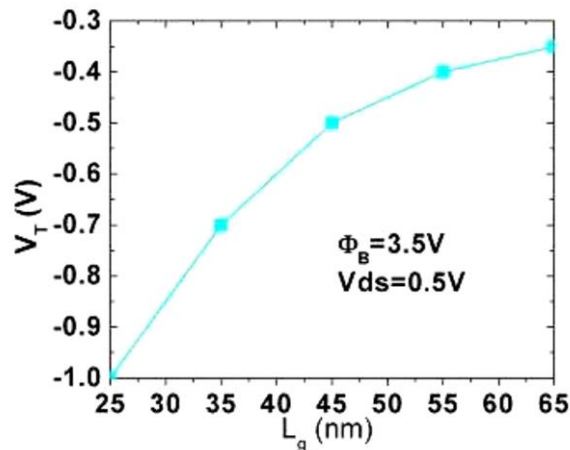


Σχήμα 4.5: Χαρακτηριστικές ρεύματος $I_{DS}-V_{GS}$ για διαφορετικές τιμές φραγμάτων Schottky $\Phi_B=2.5, 3.0, 3.5eV$ και $V_{DS}=0.5V$ για τη διάταξη με μήκος πύλης $L_g=65nm$.

Η μεταβολή των χαρακτηριστικών του ρεύματος $I_{DS}-V_{GS}$ με το μήκος της πύλης L_g για μία σταθερή τιμή Schottky $\Phi_B=3.5eV$ φαίνεται στο Σχήμα 4.6. Παρατηρείται ότι η τάση κατωφλίου V_T μετατοπίζεται σε χαμηλότερες τιμές (από $V_T -0.5$ σε $-1.3V$) καθώς το μήκος πύλης μειώνεται από $65nm$ σε $25nm$ και αυτό φαίνεται ξεκάθαρα και στο διάγραμμα 4.7.



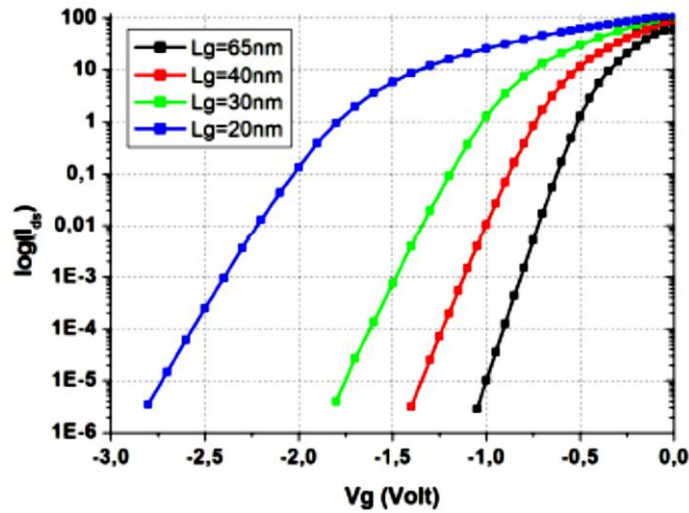
Σχήμα 4.6: Χαρακτηριστικές ρεύματος $I_{DS}-V_{GS}$ για διαφορετικά μήκη πύλης που κυμαίνονται από $65nm$ σε $25nm$ για μία τιμή φραγματος $\Phi_B = 3.5eV$, $V_{DS}=0.5V$.



Σχήμα 4.7: Μεταβολή της τάσης κατωφλίου V_T καθώς αλλάζει το μήκος της πύλης από 65nm σε 25nm για μία τιμή φράγματος $\Phi_B = 3.5eV$, $V_{DS} = 0.5V$

Να σημειωθεί σε αυτό το σημείο, ότι οι τιμές των τάσεων κατωφλίου V_T έχουν υπολογιστεί με την προέκταση της γραμμικής περιοχής των χαρακτηριστικών του ρεύματος I_D - V_G . Η αναμενόμενη μείωση της τάσης V_T καθώς το μήκος πύλης μειώνεται από 65nm σε 25nm είναι περίπου 0.6V. Η μείωση είναι αρκετά μικρή ώστε η διάταξη να θεωρείται χρήσιμη για ψηφιακά κυκλώματα. Επιπλέον το ρεύμα κόρου ως προς V_G είναι περίπου 100mA/mm, τιμή η οποία φαίνεται αρχικά αρκετά μικρή, αλλά αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι έχει χρησιμοποιηθεί πολύ χαμηλή τάση V_D .

Η συμπεριφορά της υπο-κατωφλίου περιοχής φαίνεται στο Σχήμα 4.8. Δόθηκε ιδιαίτερη προσοχή στην παραγωγή των συγκεκριμένων καμπυλών καθώς η σύγκλιση των εξισώσεων σε πολύ χαμηλά ρεύματα είναι εξαιρετικά αργή. Η γνωστή εκθετική συμπεριφορά των χαρακτηριστικών του ρεύματος στην περιοχή τάσεων κάτω από το κατώφλι είναι εμφανής από το διάγραμμα $\log_{10}(I_{DS}) - V_{GS}$ στο Σχήμα 4.8. Από τις καμπύλες προκύπτει μία κλίση της υπο-κατωφλίου περιοχής SS ίση με $SS = 90\text{meV/dec}$ για $L_g = 65\text{nm}$ και ίση με 170meV/dec για $L_g = 20\text{nm}$. Με δεδομένο ότι τιμές κλίσεων γύρω στα 100meV/dec παράγουν εξαιρετικούς χρόνους ανοίγματος των τρανζίστορς, συμπεραίνεται ότι η συρρίκνωση της διάταξης στα 20nm μήκος πύλης θα δημιουργεί και πάλι μία πολύ γρήγορη διάταξη.

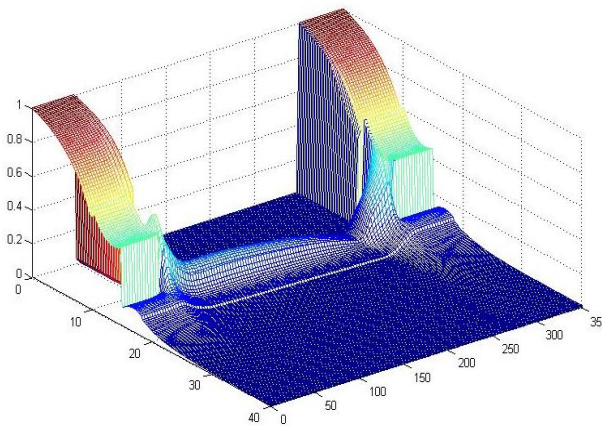


Σχήμα 4.8: Μεταβολή της κλίσης της υπο-κατωφλίου περιοχής $\log_{10}(I_{DS})$ συναρτήσει του μήκους πόλης για μία τιμή φράγματος $\Phi_B = 3.5eV$, $V_{DS} = 0.5V$.

4.3.2 Αποτελέσματα για τη διάταξη μεγάλου καναλιού

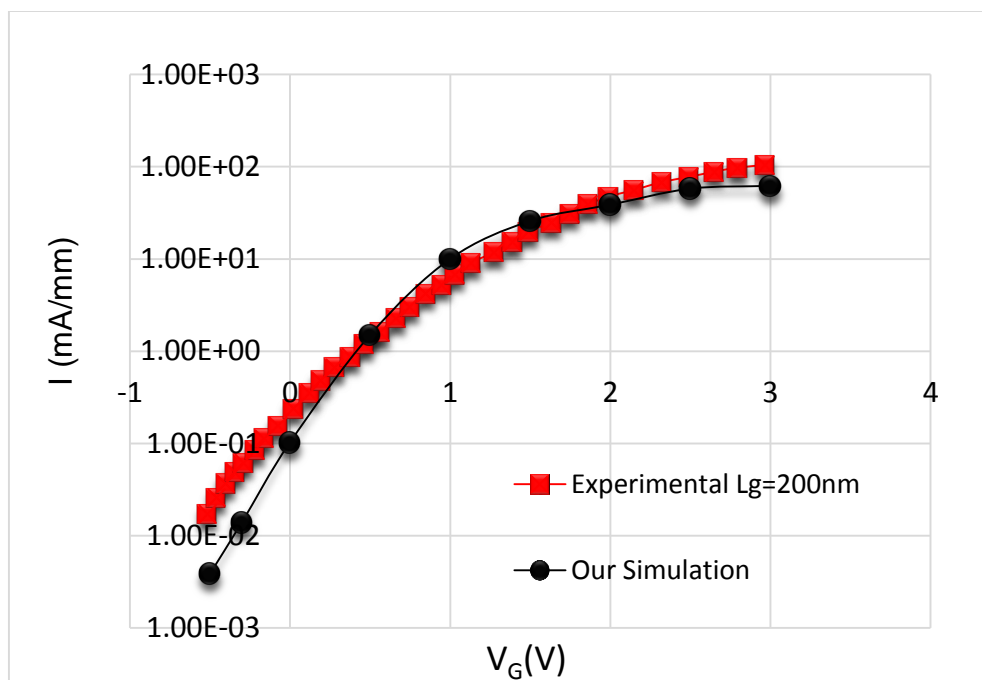
Έχοντας αναλύσει παραπάνω τη μέθοδο που ακολουθήθηκε, θα παρουσιαστούν σε αυτό το σημείο τα αποτελέσματα από την προσομοίωση δύο διαστάσεων για την διάταξη μεγάλου καναλιού η οποία είναι μία πειραματική διάταξη InGaAs QW FET [32].

Στο σχήμα 4.9 φαίνεται η υπολογισμένη πυκνότητα φορτίου στο πεδίο προσομοίωσης σε δύο διαστάσεις για όλη τη διάταξη για $V_{DS} = 1V$ και $V_{GS} = 1V$. Είναι εμφανείς οι υπερνοθευμένες περιοχές της πηγής και του απαγωγού των οποίων η πυκνότητα φορτίου ξεχύνεται και κάτω από αυτές, όπως επίσης και ο σχηματισμός του καναλιού το οποίο συρρικνώνεται κοντά στην άκρη του απαγωγού.



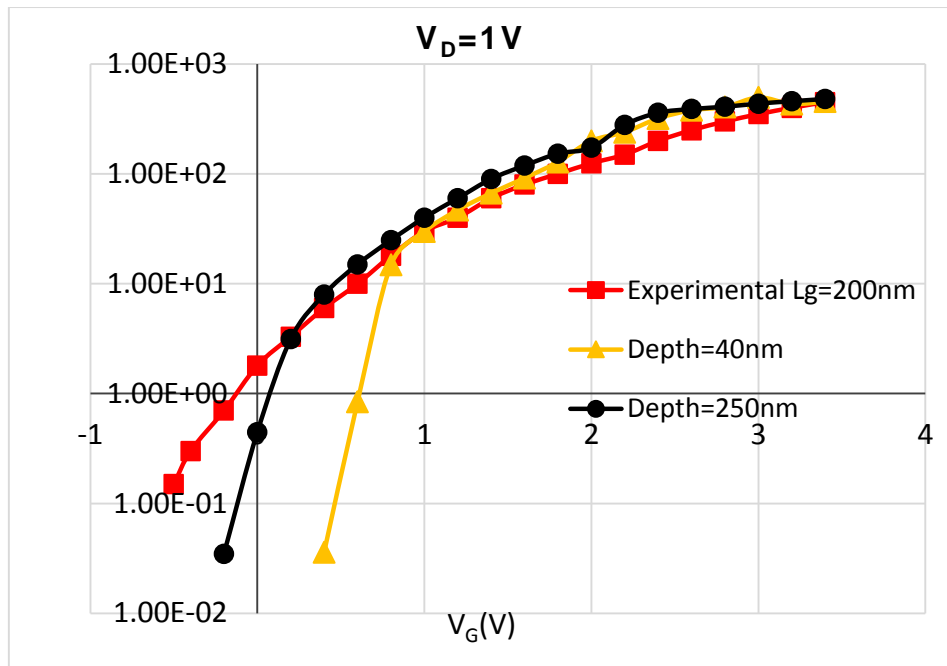
Σχήμα 4.9: Αναπαράσταση πυκνότητας φορτίου σε δύο διαστάσεις για όλη τη διάταξη ($\Phi_B = 5eV$, $V_{GS} = 1V$, $V_{DS} = 1V$, $L_g = 200nm$)

Οι χαρακτηριστικές του ρεύματος I_D - V_G φαίνονται στα Σχήματα 4.10 και 4.11 για την γραμμική περιοχή $V_D=0.1V$ και τον κόρο $V_D=1V$, αντίστοιχα. Στην γραμμική περιοχή φαίνεται να υπάρχει καλή συμφωνία της προσομοίωσης (μαύρη καμπύλη-κύκλοι) με την πειραματική καμπύλη (κόκκινη καμπύλη-τετράγωνα) χωρίς να έχει γίνει κάποια προσαρμογή παραμέτρων.



Σχήμα 4.10 Πειραματική καμπύλη (κόκκινα τετράγωνα) και προσομοίωση (μαύροι κύκλοι) για την γραμμική περιοχή $V_D = 0.1V$ για τη διάταξη μεγάλου καναλιού $L_g=200nm$.

Η περιοχή κόρου φαίνεται στο Σχήμα 4.11. Στο διάγραμμα φαίνονται τρεις καμπύλες. Η μία είναι η πειραματική (κόκκινα τετράγωνα) και οι άλλες δύο είναι οι προσομοιωμένες καμπύλες για δύο διαφορετικά βάρη του υλικού υποστρώματος (substrate) κάτω από το στρώμα παροχής (supply layer). Η καμπύλη με τα κίτρινα τρίγωνα αποτελεί προσομοίωση όπου το βάθος της διάταξης μαζί με το υπόστρωμα φτάνει στα 40nm, ενώ η καμπύλη με τους μαύρους κύκλους αποτελεί προσομοίωση όπου το βάθος της διάταξης μαζί με το υπόστρωμα φτάνει στα 250nm. Είναι εμφανές ότι μπορεί να επιτευχθεί πολύ καλή ακρίβεια με την προϋπόθεση ότι το επιλεγμένο βάθος της προσομοιωμένης διάταξης είναι αρκετά μεγάλο. Επιπλέον φαίνεται ότι όσο το ρεύμα αλλά και οι τιμές δυναμικού V_G μικραίνουν ένα μεγαλύτερο τμήμα του υποστρώματος απαιτείται να συμπεριληφθεί στην προσομοίωση ώστε να υπάρχει συμφωνία της καμπύλης προσομοίωσης με την πειραματική. Ωστόσο, το συγκεκριμένο πρόβλημα δεν εμφανίζεται στην γραμμική περιοχή, εξαιτίας του ότι απουσιάζουν παρασιτικά ρεύματα όπως θα εξηγηθεί στη συνέχεια.

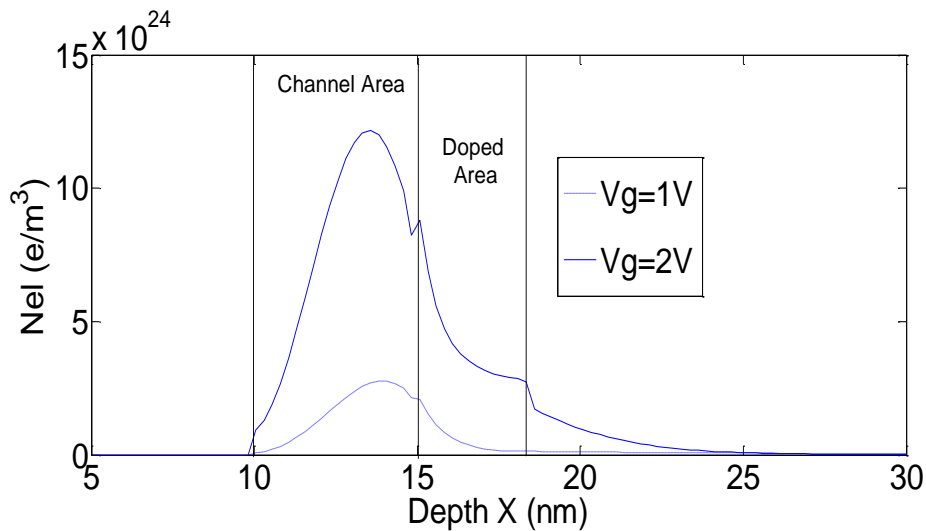


Σχήμα 4.11 Πειραματική καμπύλη (κόκκινα τετράγωνα) και καμπύλες προσομοίωσης στην περιοχή κόρου $V_D = 1\text{ V}$ για τη διάταξη μεγάλου καναλιού $L_g=200\text{ nm}$. Οι δύο προσομοιώσεις αντιστοιχούν σε δύο διαφορετικά βάθη της διάταξης. Η καμπύλη με τα κίτρινα τρίγωνα αντιστοιχεί σε ένα βάθος διάταξης 40 nm , ενώ η καμπύλη με τους μαύρους κύκλους αντιστοιχεί σε βάθος διάταξης 250 nm .

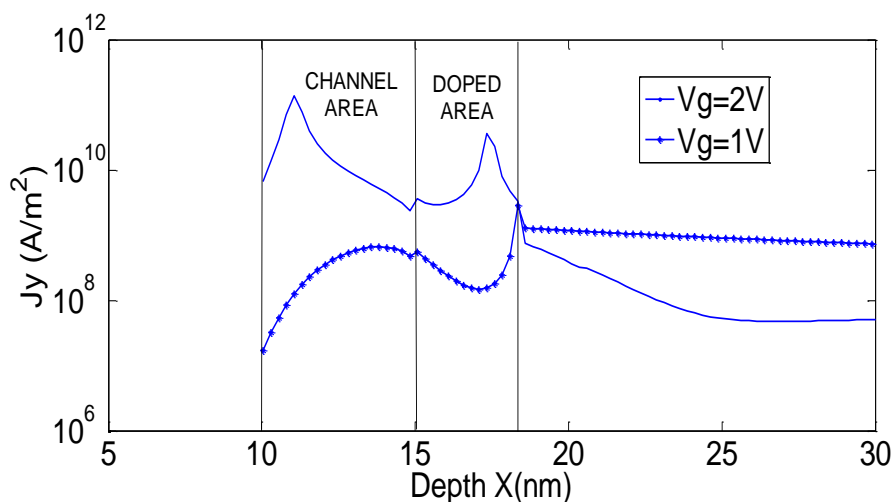
Τα αποτελέσματα των χαρακτηριστικών του ρεύματος I_D-V_G για τη διάταξη μεγάλου καναλιού ($L_g=200\text{ nm}$) βρίσκονται σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα και στην γραμμική περιοχή ($I_{D\text{max}} \approx 100\text{ mA/mm}$ για $V_D=0.1\text{ V}$) και στον κόρο ($I_{D\text{max}} \approx 480\text{ mA/mm}$ για $V_D=1\text{ V}$), χωρίς καμία προσαρμογή παραμέτρων, εκτός από το φράγμα Schottky Φ_b . Ωστόσο, η διάταξη μεγάλου καναλιού ως τρανζίστορ ανοίγει αργά και αυτό φαίνεται από την κλίση της υπο-κατωφλίου περιοχής που είναι 500 mV/dec . Το γεγονός αυτό οφείλεται στο μεγάλο παρασιτικό ρεύμα το οποίο υπάρχει κάτω από το κανάλι.

Τα παρασιτικά ρεύματα κάτω από την περιοχή του καναλιού φαίνονται στα σχήματα 4.12 και 4.13. Στο σχήμα 4.12 φαίνεται η πυκνότητα του φορτίου κατά βάθος της διάταξης σε μία μονοδιάστατη τομή που γίνεται στο μέσο της πύλης και αντίστοιχα στο σχήμα 4.13 φαίνεται η πυκνότητα του ρεύματος J_y κατά βάθος της διάταξης σε μία μονοδιάστατη τομή στο μέσο της πύλης για $V_D=1\text{ V}$. Σε κάθε ένα διάγραμμα φαίνονται δύο καμπύλες, μία για $V_G=2\text{ V}$ και μία για $V_G=1\text{ V}$. Παρατηρείται στο Σχήμα 4.12 ότι για $V_G=1\text{ V}$ μία μικρή «ουρά» φορτίου κάτω από το βάθος των 15 nm (το κανάλι βρίσκεται μεταξύ 10 nm - 15 nm) δίνει ένα παρασιτικό ρεύμα J_y της τάξεως 10^9 mA/mm κάτω από το κανάλι όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.13, το οποίο δεν φθίνει

γρήγορα με το βάθος. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο στις χαρακτηριστικές I_D - V_G στον κόρο ένα αρκετά μεγαλύτερο βάθος πεδίου προσομοίωσης απαιτείται για καλή ακρίβεια καθώς η τάση V_G μειώνεται. Μία πιθανή εξήγηση για αυτό είναι ότι σε χαμηλές τιμές V_G η πύλη δεν είναι ικανή να «σηκώσει» τα ηλεκτρόνια από τους φορείς νόθευσης στο στρώμα παροχής (κάτω από το κανάλι) μέσα στο κανάλι. Το συγκεκριμένο μειονέκτημα έχει διορθωθεί από ερευνητικές ομάδες με την προσθήκη στρωμάτων AlAsSb (υψηλού ενεργειακού διάκενου) πάνω και κάτω από την περιοχή του καναλιού [37,38].

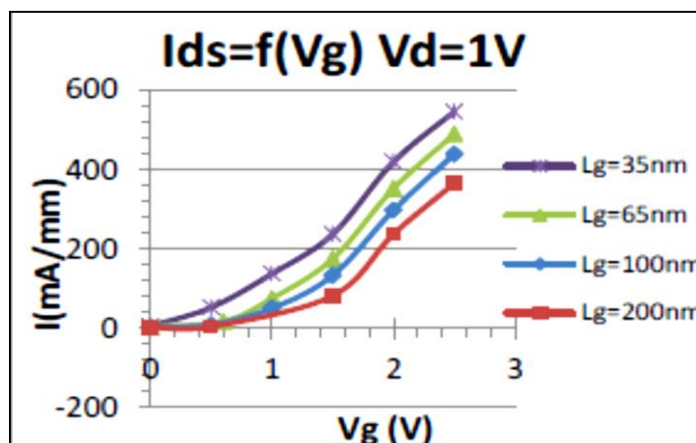


Σχήμα 4.12: Η πυκνότητα του φορτίου κατά βάθος της διάταξης μεγάλου καναλιού ($L_g=200\text{nm}$) σε μία μονοδιάστατη τομή που γίνεται στο μέσο της πύλης για $V_D = 1\text{ V}$. Η διακεκομμένη γραμμή είναι για $V_G=1\text{V}$ και η συμπαγής γραμμή για $V_G=2\text{V}$.



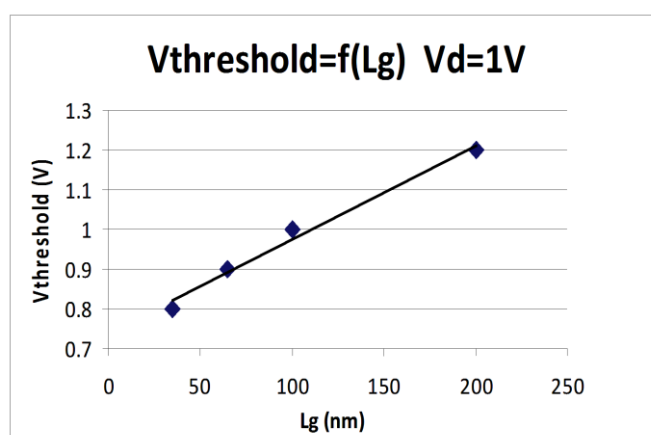
Σχήμα 4.13: Η πυκνότητα του ρεύματος J_y κατά βάθος της διάταξης μεγάλου καναλιού ($L_g=200\text{nm}$) σε μία μονοδιάστατη τομή που γίνεται στο μέσο της πύλης για $V_D = 1\text{ V}$. Η πυκνή γραμμή με τα σημεία είναι για $V_G=1\text{V}$ και η λεπτή γραμμή για $V_G=2\text{V}$.

Στη συνέχεια θα εξεταστεί η συμπεριφορά της διάταξης σε μικρά μήκη πύλης L_g . Στο Σχήμα 4.14 διακρίνονται οι διαφορετικές χαρακτηριστικές I_D-V_G καθώς αλλάζει το μήκος πύλης L_g από 200nm σε 35nm.



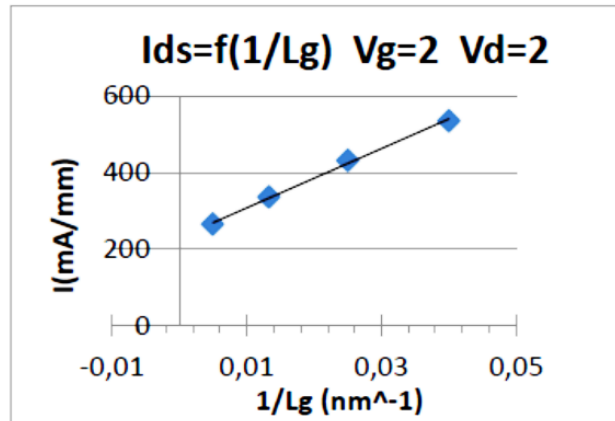
Σχήμα 4.14 Χαρακτηριστικές ρεύματος $I_{DS}-V_{GS}$ για διαφορετικά μήκη πύλης που κυμαίνονται από 200nm σε 35nm στον κόρο $V_{DS}=1V$.

Η αλλαγή στην τάση κατωφλίου V_T φαίνεται στο Σχήμα 4.15 και είναι γραμμική. Υπολογίζεται ότι είναι περίπου 0.2V ανά 100nm αλλαγής στο μήκος L_g .



Σχήμα 4.15 Μεταβολή της τάσης κατωφλίου V_T με το μήκος της πύλης από 200nm σε 35nm για τον κόρο $V_{DS}=1V$.

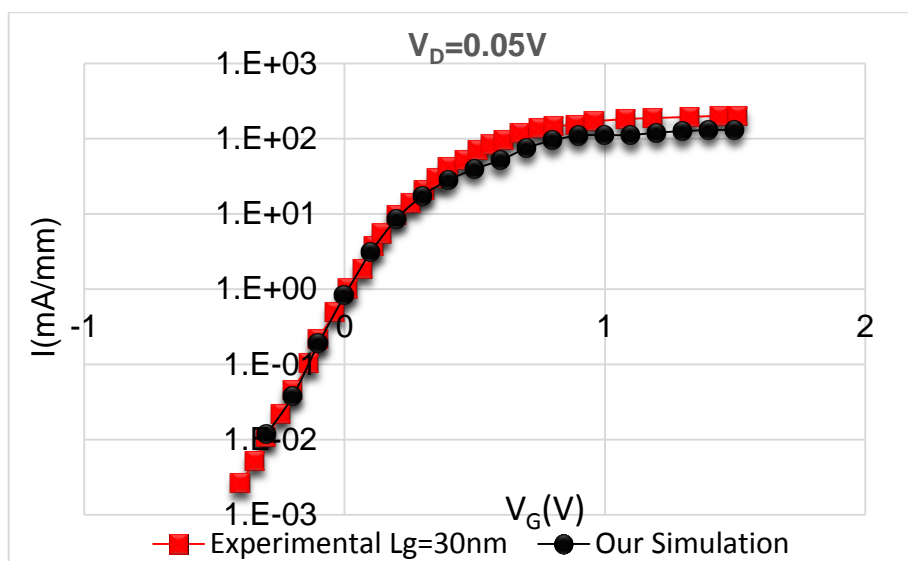
Η αύξηση στο ρεύμα καθώς το μήκος πύλης μειώνεται, φαίνεται στο Σχήμα 4.16, για σταθερές τιμές τάσης στην πύλη και στον απαγωγό $V_D=V_G=2V$. Η τιμή του ρεύματος αυξάνει από περίπου 250mA/mm για τα 35nm μήκος πύλης στα 500mA/mm για 200nm μήκος πύλης.



Σχήμα 4.16 Μεταβολή της τάσης κατωφλίου V_T με το μήκος της πύλης από 200nm σε 35nm για τον κόρο $V_{DS}=1V$.

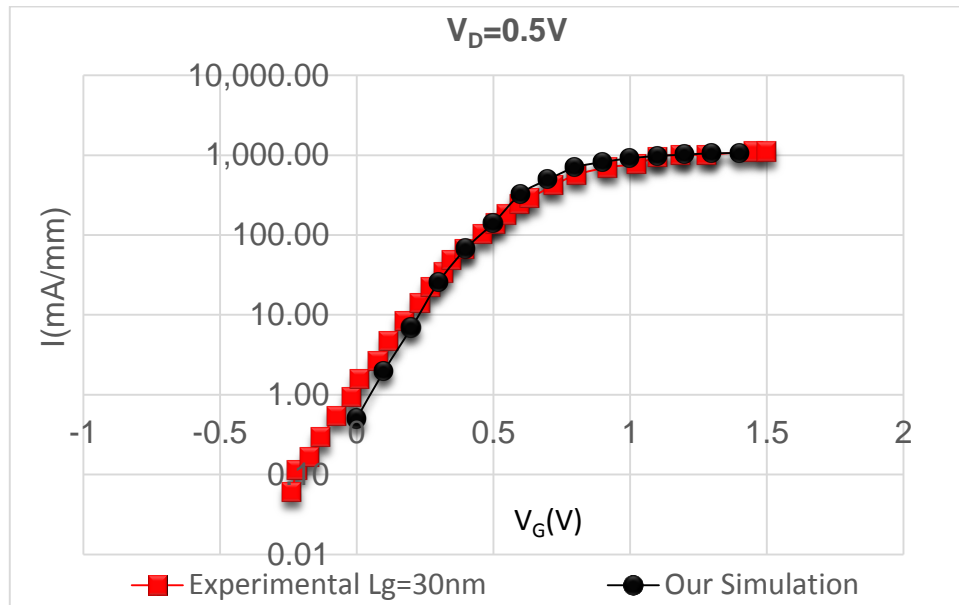
4.3.3 Αποτελέσματα για τη διάταξη μικρού καναλιού $L_g=30nm$.

Έχοντας αναλύσει τα αποτελέσματα για τη διάταξη μεγάλου καναλιού, θα παρουσιαστούν σε αυτό το σημείο τα αποτελέσματα για τη διάταξη μικρού καναλιού των 30nm (βλ.Σχήμα 4.1). Οι χαρακτηριστικές του ρεύματος I_D-V_G και οι αντίστοιχες πειραματικές καμπύλες για την γραμμική περιοχή $V_D=0.05V$ και τον κόρο $V_D=0.5V$ φαίνονται στα Σχήματα 4.17 και 4.18. Στο Σχήμα 4.17 (γραμμική περιοχή) φαίνεται ότι υπάρχει καλή συμφωνία της καμπύλης προσομοίωσης με την πειραματική, αλλά αυτή τη φορά έχει χρησιμοποιηθεί η προσαρμογή της ταχύτητας κόρου v_{sat} όπως απαιτεί η θεωρία που περιγράφηκε στη μέθοδο και που είναι σύμφωνη με τη θεωρία Landauer (θεωρία των κβαντικών διορθώσεων).



Σχήμα 4.17 Πειραματική καμπύλη (κόκκινα τετράγωνα) και προσομοίωση (μαύροι κύκλοι) για την γραμμική περιοχή $V_D = 0.05V$ για τη διάταξη μικρού καναλιού $L_g=30nm$.

Στην περιοχή κόρου στο Σχήμα 4.18 η συμφωνία της καμπύλης προσομοίωσης με την πειραματική είναι πολύ καλύτερη σε σχέση με την γραμμική περιοχή. Η καλύτερη συμφωνία σε αυτήν την περίπτωση αποδίδεται στην καλύτερη σύγκλιση της μεθόδου στα μεγαλύτερα ρεύματα. Στα πολύ χαμηλά ρεύματα, η διαδικασία υπολογισμού των ρευμάτων είναι αρκετά αργή καθώς η σύγκλιση γίνεται πολύ πιο δύσκολη. Η ίδια παρατήρηση ισχύει και για την διάταξη μεγάλου καναλιού.

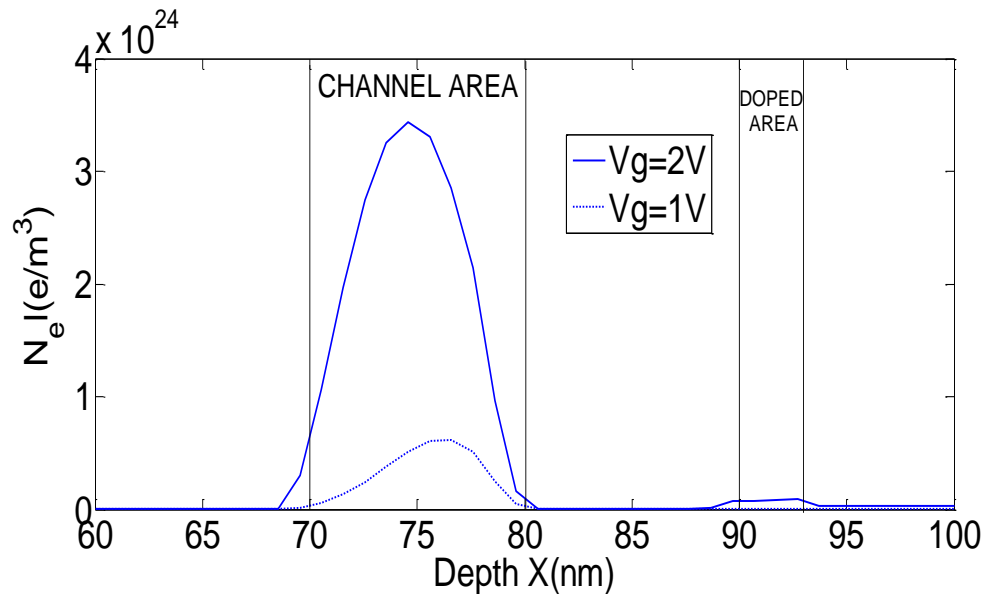


Σχήμα 4.18 Πειραματική καμπύλη (κόκκινα τετράγωνα) και προσομοίωση (μαύροι κύκλοι) για την περιοχή κόρου $V_D = 0.5V$ για τη διάταξη μικρού καναλιού $L_g = 30nm$.

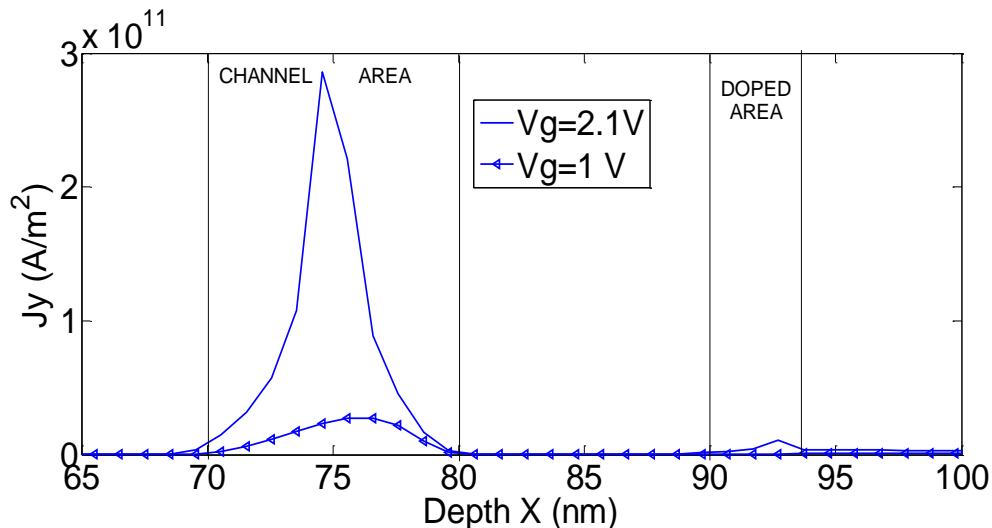
Επιπρόσθετα, η συρρίκνωση του μήκους του καναλιού κανονικά μειώνει την κλίση της υπο-κατωφλίου περιοχής και αυξάνει την τιμή SS (mV/dec) καθώς η πύλη χάνει τον έλεγχο πάνω στο κανάλι. Εδώ παρατηρείται το αντίθετο, μία αύξηση της κλίσης από τη διάταξη των 200nm στη διάταξη των 30nm και μία μείωση της SS από την τιμή $SS = 500mV/dec$ στη διάταξη των 200nm στην τιμή $SS = 186mV/dec$ στη διάταξη των 30nm. Πιο συγκεκριμένα, στη διάταξη των 30nm, για τον κόρο ισχύει $SS = 186mV/dec$ όπου $V_D = 0.5V$ και στην γραμμική περιοχή $SS = 142mV/dec$ όπου $V_D = 0.05V$. Η βελτίωση της κλίσης και το πιο γρήγορο άνοιγμα της διάταξης των 30nm αποδίδεται στην έλλειψη παρασιτικών φαινομένων κάτω από το κανάλι όπως θα φανεί από το διάγραμμα 4.19.

Στο διάγραμμα 4.19 φαίνεται η πυκνότητα του φορτίου κατά βάθος της διάταξης σε μία μονοδιάστατη τομή που γίνεται στο μέσο της πύλης και αντίστοιχα στο σχήμα 4.20 φαίνεται η πυκνότητα του ρεύματος J_y κατά βάθος της διάταξης σε μία

μονοδιάστατη τομή στο μέσο της πύλης για $V_D=0.5V$. Το κανάλι είναι μεταξύ 70-80nm. Είναι προφανές ότι δεν παρατηρείται φορτίο ή πυκνότητα ρεύματος J_y κάτω από τα 80nm που είναι το κανάλι. Το μικρό φορτίο που φαίνεται στο Σχήμα 4.19 μεταξύ 90-93nm είναι η περιοχή νόθευσης του στρώματος παροχής.



Σχήμα 4.19: Η πυκνότητα του φορτίου κατά βάθος της διάταξης μικρού καναλιού ($L_g=30nm$) σε μία μονοδιάστατη τομή που γίνεται στο μέσο της πύλης για $V_D = 0.5 V$ στον κόρο. Η διακεκομμένη γραμμή είναι για $V_G=1V$ και η συμπαγής γραμμή για $V_G=2V$.



Σχήμα 4.20: Η πυκνότητα του ρεύματος J_y κατά βάθος της διάταξης μικρού καναλιού ($L_g=30nm$) σε μία μονοδιάστατη τομή που γίνεται στο μέσο της πύλης για $V_D = 0.5 V$ στον κόρο. Η πυκνή γραμμή με τα σημεία είναι για $V_G=1V$ και η λεπτή γραμμή για $V_G=2V$.

Η ηλεκτρονιακή πυκνότητα και το αντίστοιχο παρασιτικό ρεύμα κάτω από το κανάλι είναι μικρότερα στη διάταξη μικρού καναλιού σε σχέση με τη διάταξη μεγάλου καναλιού. Πιο συγκεκριμένα η ηλεκτρονιακή πυκνότητα στη διάταξη μικρού καναλιού είναι $N_{el\ 30nm} \cong 0.2 * 10^{24} \text{ e}/m^3$ ενώ στη διάταξη μεγάλου καναλιού είναι $N_{el200nm} \cong 8 * 10^{24} \text{ e}/m^3$. Επίσης το παρασιτικό ρεύμα στη διάταξη μικρού καναλιού είναι $I_{\text{διαρροής } 30nm} \cong 0.2 * 10^{11} \text{ A}/m^2$, ενώ στη διάταξη μεγάλου καναλιού είναι $I_{\text{διαρροής } 200nm} \cong 10^{11} \text{ A}/m^2$.

Σε αυτό το σημείο προκύπτει το ερώτημα γιατί συμβαίνει αυτό αφού οι δύο διατάξεις έχουν ίδια υλικά στο κανάλι αλλά και στις περιοχές νόθευσης. Γιατί υπάρχει ρεύμα παρασιτικό στη διάταξη μεγάλου καναλιού και δεν υπάρχει στη διάταξη μικρού καναλιού; Η απάντηση έγκειται σε δύο παράγοντες:

1. Οι φορείς νόθευσης στο στρώμα παροχής (supply layer) στη διάταξη των 200nm είναι ακριβώς κάτω από το κανάλι, ενώ στη διάταξη των 30nm είναι 10nm μακριά από τη διεπιφάνεια καναλιού/στρώματος παροχής και
2. Η νόθευση στη διάταξη μεγάλου καναλιού είναι μία τάξη μεγέθους μεγαλύτερη ($10^{25} \text{ e}/m^3$) από τη νόθευση στη διάταξη μικρής ύλης ($10^{24} \text{ e}/m^3$).

4.4 Συμπεράσματα

Φαίνεται λοιπόν ότι μπορεί να υπάρξει μία καθολική προσέγγιση στην ανάλυση των QWFETs μεγάλου και μικρού καναλιού με την χρήση των εξισώσεων Poisson-Schrodinger-Continuity, αλλάζοντας μόνο μία παράμετρο v_{sat} (σε υψηλές τιμές V_G και διατηρείται αφού προσαρμοστεί για όλες τις τιμές V_G). Μάλιστα, η προσέγγιση αυτή είναι σε συμφωνία με την καθαρά κβαντική μέθοδο μεταφοράς του Landauer. Επιπρόσθετα, πολύτιμες πληροφορίες για τα παρασιτικά ρεύματα που εμφανίζονται στην περιοχή των στρωμάτων κάτω από το κανάλι αλλά και για την περιοχή υποκατωφλίου προκύπτουν.

Τέλος είναι γνωστό ότι σε απόλυτους κβαντομηχανικούς υπολογισμούς χρησιμοποιείται ένα μόνο στρώμα υλικού -το κανάλι- για λόγους υπολογιστικής απόδοσης και τα επιπλέον στρώματα παραλείπονται. Όμως τα παρασιτικά φαινόμενα συμβαίνουν κάτω από το κανάλι. Με αυτόν τον τρόπο λοιπόν χάνονται σε αυτήν την περίπτωση σημαντικές πληροφορίες.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

Ανάλυση σχετικά με τη δυνατότητα εφαρμογής της μαθηματικής σχέσης του Natori σε πραγματικά III-V FETs κβαντικού πηγαδιού πολλών στρωμάτων.

5.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό θα διερευνηθεί η εγκυρότητα του φορμαλισμού του Kenji Natori [29] που αναλύθηκε στο κεφάλαιο 3.2 για εφαρμογή σε πραγματικά III-V FETs κβαντικού πηγαδιού πολλών στρωμάτων. Θα αποδειχθεί ότι η υπόθεση μιας διάταξης ενός μόνο στρώματος (του καναλιού) που φέρει το σύνολο της πυκνότητας ρεύματος, δεν είναι ρεαλιστική στην περιοχή υπο-κατωφλίου. Η ανάλυση βασίζεται στην σύγκριση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την εφαρμογή της σχέσης του Natori με πειραματικά δεδομένα αλλά και με υπολογισμούς από βασικές αρχές που είναι η μέθοδος PSC που αναλύθηκε στο κεφάλαιο 4. Οι υπολογισμοί με την εφαρμογή της σχέσης του Natori δίνουν παραπλανητικά μία μικρή κλίση στην περιοχή υπο-κατωφλίου που δε συνάδει με την πειραματική. Για αυτόν τον λόγο προτείνεται ένας τρόπος για να διορθωθεί η συγκεκριμένη ανεπάρκεια και να επεκταθεί η εφαρμογή της σχέσης και σε πραγματικά III-V FETs κβαντικού πηγαδιού πολλών στρωμάτων. Δηλαδή, η επέκταση του μονοδιάστατου κβαντικού πηγαδιού ώστε να συμπεριλαμβάνει και το στρώμα παροχής κάτω από το κανάλι και η χρήση ενός κατάλληλου δυναμικού προερχόμενου από βασικές αρχές.

Η συρρίκνωση του μήκους του καναλιού στα σύγχρονα FETs απαιτεί τη χρήση μίας καθαρά κβαντικής θεωρίας μεταφοράς στη θέση της ημικλασσικής θεωρίας ολίσθησης-διάχυσης. Δύο μεθοδολογίες έχουν εφαρμοστεί μέχρι στιγμής. Η μέθοδος Landauer [28] και οι συναρτήσεις Green εκτός ισορροπίας [57] (non-equilibrium Green function (NEGF)), από τις οποίες η πρώτη είναι αυτή που χρησιμοποιείται ευρέως τα τελευταία δεκαπέντε χρόνια. Ωστόσο και οι δύο μέθοδοι είναι ισοδύναμες όπως έχει αποδειχθεί [57].

Οι προσεγγίσεις στην χρήση της σχέσης του Natori (δεν υπάρχουν προσεγγίσεις στην διεξαγωγή της σχέσης από τη θεωρία Landauer εκτός από την προσέγγιση WKB) είναι γνωστές: α) Η εξιδανίκευση του δυναμικού του καναλιού ως τριγωνικό για MOSFETs ή τραπεζοειδές για QW FETs και β) η χρήση μιας απλοποιημένης σχέσης για την παραγωγή των ιδιοτιμών του πηγαδιού. Σε αυτήν την εργασία αποδεικνύεται ότι γίνεται ακόμη μία σημαντική προσέγγιση όταν χρησιμοποιείται η σχέση Natori, που

είναι η υπόθεση μιας διάταξης ενός μόνο στρώματος (του καναλιού) που φέρει το σύνολο της πυκνότητας ρεύματος. Θα αποδειχθεί ότι στην περιοχή υπο-κατωφλίου μία σημαντική ποσότητα ρεύματος βρίσκεται κάτω από το κανάλι η οποία ανάλογα με το εφαρμοζόμενο δυναμικό πύλης V_G μπορεί να είναι ακόμα και μεγαλύτερη από το ρεύμα στο κανάλι.

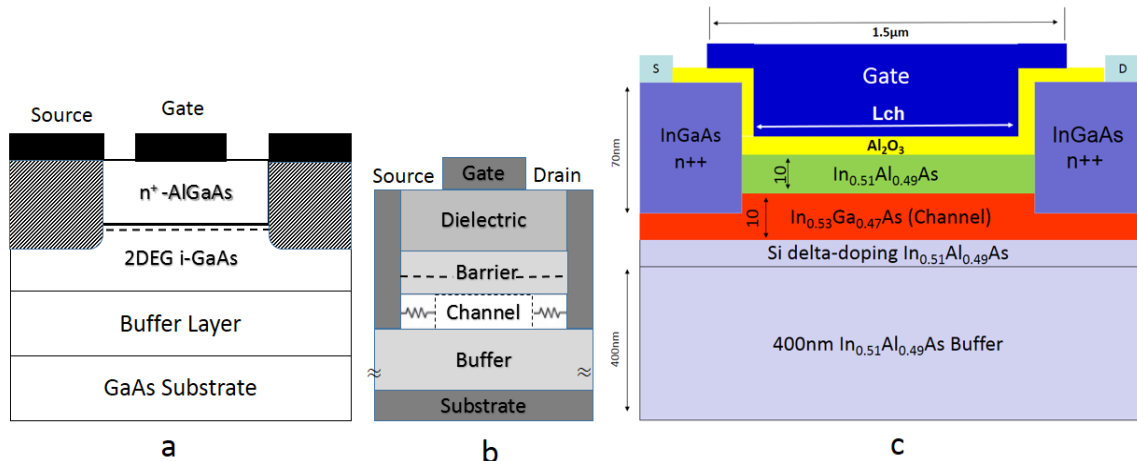
Να διευκρινιστεί σε αυτό το σημείο ότι ο περιορισμός του ρεύματος σε ένα μόνο στρώμα –στο κανάλι– δεν είναι μία βασική απαίτηση της μεθοδολογίας Natori, αλλά κυρίως ένα χαρακτηριστικό των ιδανικών δυναμικών πηγαδιού που χρησιμοποιούνται σε συμπαγή μοντέλα (compact models). Γι'αυτό και προτείνονται τρόποι να ξεπεραστούν οι συγκεκριμένοι περιορισμοί διατηρώντας, ωστόσο, τη βασική προσέγγιση του Natori. Φυσικά η απλούστευση των συμπαγών μοντέλων χάνεται καθώς αριθμητικές επιλύσεις των εξισώσεων Poisson και Schroedinger θα απαιτηθούν. Αξίζει να σημειωθεί ότι δεν υπάρχουν παράμετροι προσαρμογής στα επιχειρήματα που χρησιμοποιούνται. Το ενδιαφέρον σε αυτήν την εργασία δεν εστιάζεται στην παραγωγή ενός καλύτερου μοντέλου σε σχέση με αυτά που υπάρχουν [52], [67], [77], [80], αλλά στο να παρουσιαστεί πως είναι δυνατόν να βελτιωθεί ο φορμαλισμός του Natori με αντίτιμο βέβαια μεγαλύτερους υπολογισμούς οι οποίοι όμως βασίζονται σε βασικές αρχές και είναι επαρκώς τεκμηριωμένοι.

5.2 Μέθοδος

Ο Natori στη μεθοδό του έχει αναλύσει MOSFETs αλλά και III-V HEMTs. Η δομή των HEMTs φαίνεται στο Σχήμα 5.1.α. ενώ το απλοποιημένο μοντέλο των Oh και Wong [61] που χρησιμοποιεί τη θεωρία Natori φαίνεται στο Σχήμα 5.1.β. Βέβαια, τα πραγματικά QW FETs είναι πολύ πιο περίπλοκα στη δομή. Η διάταξη [11] στην οποία θα στηριχτούν οι υπολογισμοί της συγκεκριμένης εργασίας φαίνεται Σχήμα 5.1.γ. Σε όλες τις εφαρμογές του Natori έχει υποθεθεί ότι όλη η πυκνότητα ρεύματος βρίσκεται μέσα στο στρώμα που αποτελεί το κανάλι (βλ.Σχήματα 1α,1β), δηλαδή (υπενθυμίζεται η σχέση Natori):

$$I = W \frac{\sqrt{2}q(kT)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{valley} \sum_{n_z} \sqrt{m_y} \left[F_{1/2} \left(\frac{\Phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{kT} \right) - F_{1/2} \left(\frac{\Phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max}) - qV_D}{kT} \right) \right]$$

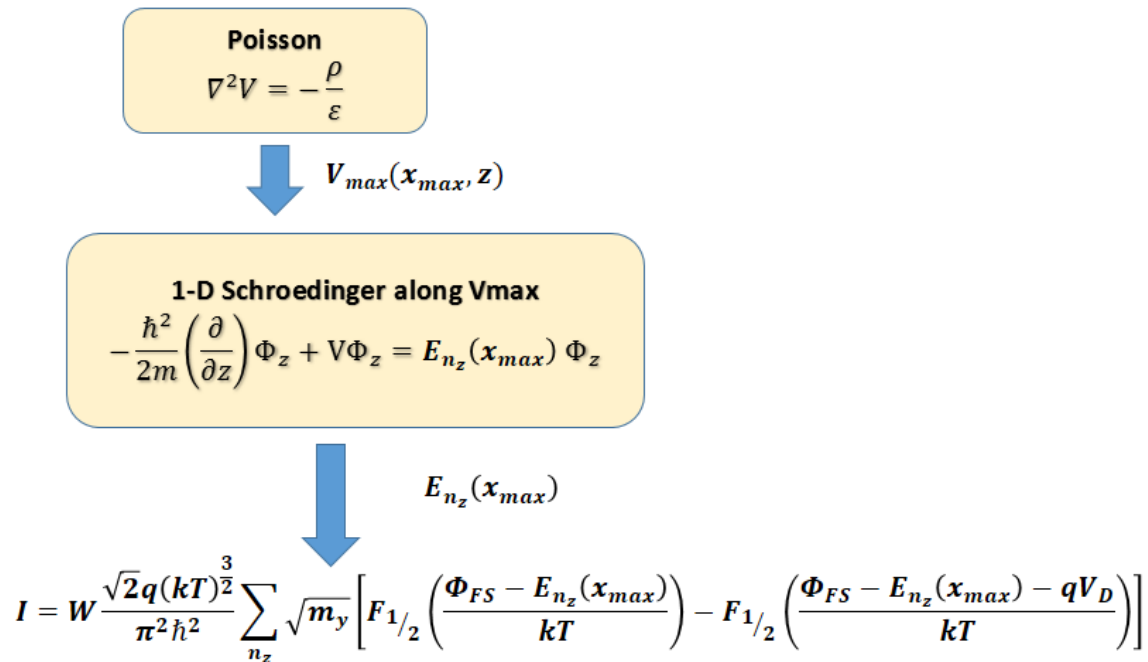
όπου Φ_{FS} είναι η στάθμη Fermi στην πηγή και $E_{n_z}(x_{max})$ οι ιδιοτιμές του μονοδιάστατου κβαντικού πηγαδιού κατά βάθος της διάταξης z στο σημείο $x=x_{max}$ του μέγιστου δυναμικού κατά μήκος της διεύθυνσης x δηλαδή S(πηγής)→D(απαγωγός). Το $F_{1/2}$ υποδηλώνει το ολοκλήρωμα Fermi τάξεως 1/2 και όλα τα υπόλοιπα σύμβολα έχουν τη συμβατική σημασία τους.



Σχήμα 5.1: α. Η διάταξη HEMT του Natori [29]. β. Η γεωμετρία του απλοποιημένου μοντέλου από τους Oh και Wong [61] γ. Κάθετη τομή της πραγματικής διάταξης QW FET [11] που χρησιμοποιήθηκε στην εργασία.

Στην παραπάνω εξίσωση ο συντελεστής διάδοσης από το φράγμα S-D έχει ληφθεί ίσος με τη μονάδα και η κυματοσυνάρτηση των ηλεκτρονίων έχει ληφθεί μηδέν στο επάνω και κάτω επίπεδο του καναλιού. Ωστόσο, αυτό δεν είναι απαραίτητο για την παραγωγή της παραπάνω εξίσωσης. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί και ένα αρκετά πιο περίπλοκο δυναμικό το οποίο επεκτείνεται σε παραπάνω από ένα στρώματα χωρίς να επηρεάζεται η εγκυρότητα της εξίσωσης. Η παραπάνω προσέγγιση αποτελεί τροχοπέδη μόνο εάν κάποιος επιθυμεί να αποκτήσει τις ιδιοτιμές από κάποια εύκολη αλγεβρική σχέση (όπως είναι το τριγωνικό ή το τραπεζοειδές φράγμα) για χρήση σε κάποιο απλοποιημένο μοντέλο. Επίσης, μία ακόμη προσέγγιση για την επιτυχή εφαρμογή των απλοποιημένων μοντέλων είναι η μονοδιάστατη θεώρηση της πτώσης του δυναμικού κατά βάθος της διάταξης στο $x=x_{max}$ αντί της επίλυσης ενός πλήρως δυδιάστατου (2D) μοντέλου. Όμως, το ενδιαφέρον στην παρούσα εργασία δεν εστιάζεται στην παραγωγή ενός καλύτερου απλοποιημένου μοντέλου, αλλά στο να επεκταθεί η εφαρμογή της θεωρίας του Natori σε πραγματικά QW-FETs πολλών στρωμάτων. Κατά συνέπεια, σε αυτήν την εργασία θα χρησιμοποιηθεί ένα πραγματικό δυναμικό που πηγάζει από την δυδιάστατη επίλυση της εξίσωσης Poisson (βλ. Διάγραμμα ροής 5.2). Η μέθοδος που ακολουθήθηκε για τον υπολογισμό του δυναμικού είναι η PSC με κβαντικές διορθώσεις που περιγράφηκε στο κεφάλαιο 4. Η μέθοδος επιλύει την εξίσωση Poisson

σε όλη τη διάταξη. Στη συνέχεια το δυναμικό V_{max} που προκύπτει από την επίλυση της Poisson και που αντιστοιχεί στο x_{max} (όπως ορίζεται από τη θεωρία Natori στο κεφάλαιο 3) εισέρχεται στην μονοδιάστατη εξίσωση Schroedinger. Από την επίλυση της Schroedinger προκύπτουν οι ιδιοτιμές $E_{n_z}(x_{max})$ οι οποίες εισέρχονται στη σχέση Natori για τον υπολογισμό του ρεύματος I .

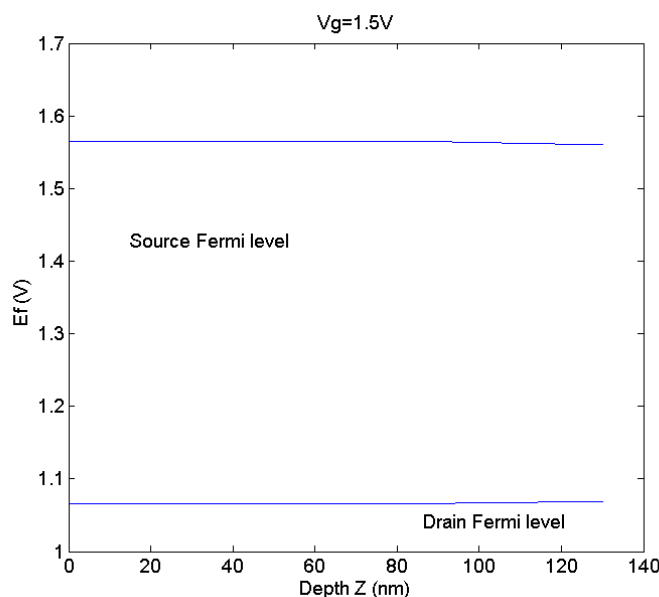


Σχήμα 5.2: Διάγραμμα ροής της μεθόδου που ακολουθήθηκε για τον υπολογισμό του ρεύματος I με την μέθοδο Natori.

5.3 Αποτελέσματα

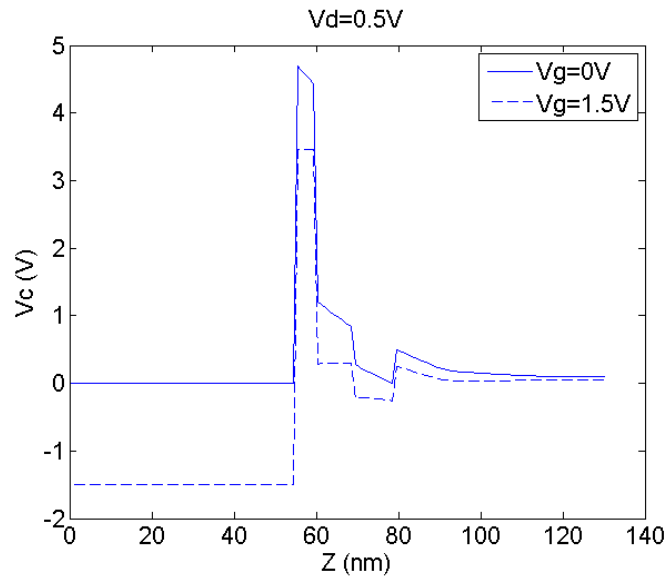
Στο σημείο αυτό θα αναφερθούν τα αποτελέσματα των υπολογισμών που αφορούν στην πραγματική διάταξη κβαντικού πηγαδιού III-V η οποία φαίνεται στο Σχήμα 5.1.γ. Αρχικά επισημαίνονται κάποια σημαντικά αποτελέσματα από τη μέθοδο PSC με κβαντικές διορθώσεις. Το πρώτο θέμα που απαιτείται να διερευνηθεί είναι εάν τα επίπεδα της στάθμης Fermi στην αρχή και στο τέλος της περιοχής του καναλιού είναι τα ίδια με τα επίπεδα της στάθμης Fermi στην πηγή και στον απαγωγό. Κι αυτό γιατί οι οριακές συνθήκες στην PSC λαμβάνονται στην πηγή και στον απαγωγό. Στο σχήμα 5.3 φαίνεται η μεταβολή της στάθμης Fermi κατά βάθος της διάταξης z κάθετα κάτω από την περιοχή της πηγής και του απαγωγού για $V_G=1.5V$ και $V_D=0.5V$. Η στάθμη Fermi E_f στην πηγή έχει ληφθεί ίση με μηδέν (ως ένας ορισμός μηδενικής ενέργειας). Επομένως φαίνεται ότι σύμφωνα με τη μέθοδο PSC με κβαντικές

διορθώσεις οι στάθμες E_{FS} και $E_{FD} (= -eV_D)$ είναι πρακτικά σταθερές κατά βάθος της διάταξης.



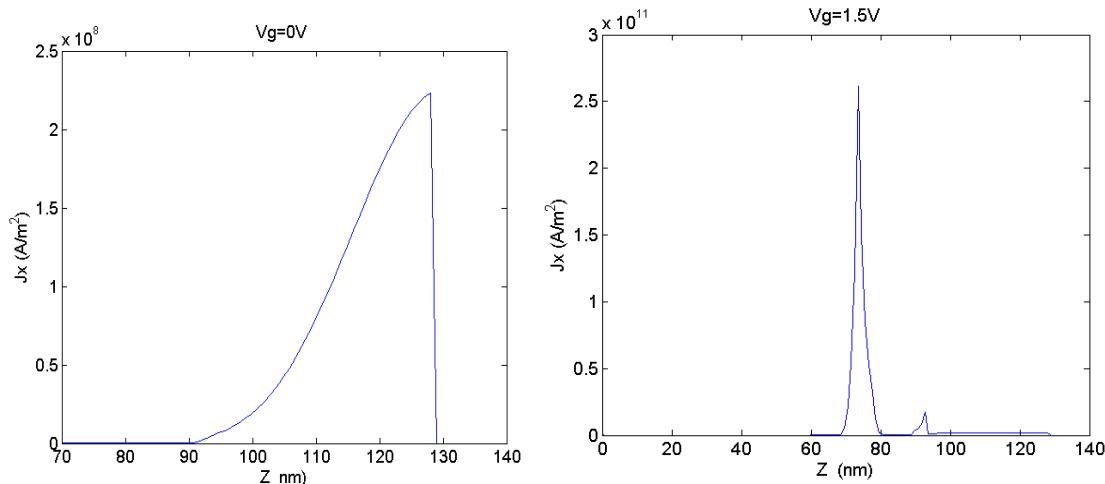
Σχήμα 5.3: Η μεταβολή της στάθμης Fermi κατά βάθος της διάταξης z , κάθετα κάτω από την περιοχή της πηγής και του απαγωγού για $V_G=1.5V$ και $V_D=0.5V$.

Στη συνέχεια, στο Σχήμα 5.4 φαίνονται τα υπολογισμένα δυναμικά κατά βάθος της διάταξης στο $x=x_{max}$ για δύο τιμές τάσεων της πύλης V_G , $V_G=0V$ και $V_G=1.5V$ σε $V_D=0.5V$. Πρόκειται για το δύο διαστάσεων δυναμικό $V_c(x,z)$ που έχει υπολογιστεί με τη μέθοδο PSC και τα δυναμικά που φαίνονται σε αυτό το σχήμα είναι τα δυναμικά $V_c(x=x_{max}, z)$ σε κάθε V_G . Οι τιμές έχουν επιλεγεί έτσι ώστε μία να αντιστοιχεί στην περιοχή κάτω από το κατώφλι $V_G=0V$ και μία στην περιοχή κόρου $V_G=1.5V$. Παρατηρείται ότι αν και η πραγματική περιοχή του καναλιού (70-80nm) έχει ένα δυναμικό το οποίο είναι σχεδόν τραπεζοειδές και για τις δύο τιμές του δυναμικού της πύλης V_G , τα δυναμικά $V_c(x_{max},z)$ που εκτείνονται από το οξειδίο μέχρι και το υπόστρωμα είναι αρκετά διαφορετικά. Φαίνεται, ότι για $V_G=0V$ το δυναμικό V_c (το οποίο στην πραγματικότητα δείχνει τη μεταβολή της ζώνης αγωγιμότητας) έχει μία κλίση προς τα κάτω σε σχέση με το υπόστρωμα, η οποία αποτρέπει την κίνηση των ηλεκτρονίων από τα άτομα της νόθευσης προς το πάνω μέρος της διάταξης και άρα παρεμποδίζει το να «γεμίσει» φορτίο η περιοχή του καναλιού. Αντιθέτως, για $V_G=1.5V$, το δυναμικό είναι σχεδόν επίπεδο (εκτός βέβαια από το πηγάδι).



Σχήμα 5.4: Προφίλ δυναμικού κατά βάθος του $QW-FET$ στο σημείο x_{max} (x είναι η κατεύθυνση $S \rightarrow D$) για δύο τιμές V_G , $0V$ and $1.5V$ at $V_D=0.5V$.

Η συμπεριφορά που προαναφέρθηκε, έχει σημαντικές επιπτώσεις στην κατανομή της πυκνότητας του ρεύματος $J_x(z)$. Η κατανομή της πυκνότητας του ρεύματος $J_x(z)$ φαίνεται στο Σχήμα 5.5 για τις ίδιες τιμές V_G και V_D όπως στο Σχήμα 5.4. Γίνεται, λοιπόν εμφανές ότι κοντά στον κόρο όλο το ρεύμα εμπεριέχεται μέσα στην περιοχή του καναλιού (το κανάλι $InGaAs$ βρίσκεται μεταξύ $70-80nm$, η μικρή κορυφή μεταξύ $90-93nm$ είναι η περιοχή νόθευσης). Αντίθετα, στην περιοχή υπο-κατωφλίου δεν υπάρχει καθόλου ρεύμα μέσα στο στρώμα $InGaAs$ και η πλειονότητα του ρεύματος βρίσκεται στην περιοχή $90-130nm$, δηλαδή σε μία περιοχή πάχους $40nm$ κάτω από το κανάλι όπου και βρίσκονται τα άτομα της νόθευσης. Το συγκεκριμένο παρασιτικό ρεύμα προέρχεται σχεδόν αποκλειστικά από ένα κλασσικό φορτίο n_{cl} (βλ. εξίσωση 4.6). Μέχρι στιγμής, δεν έχει εφαρμοστεί ο φορμαλισμός Natori για να εξαχθούν τα παραπάνω μεγέθη. Το μόνο που επισημαίνεται είναι ότι τα παραπάνω αποτελέσματα βρίσκονται σε καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα [51], σύμφωνα με όσα περιγράφηκαν και στο προηγούμενο κεφάλαιο.



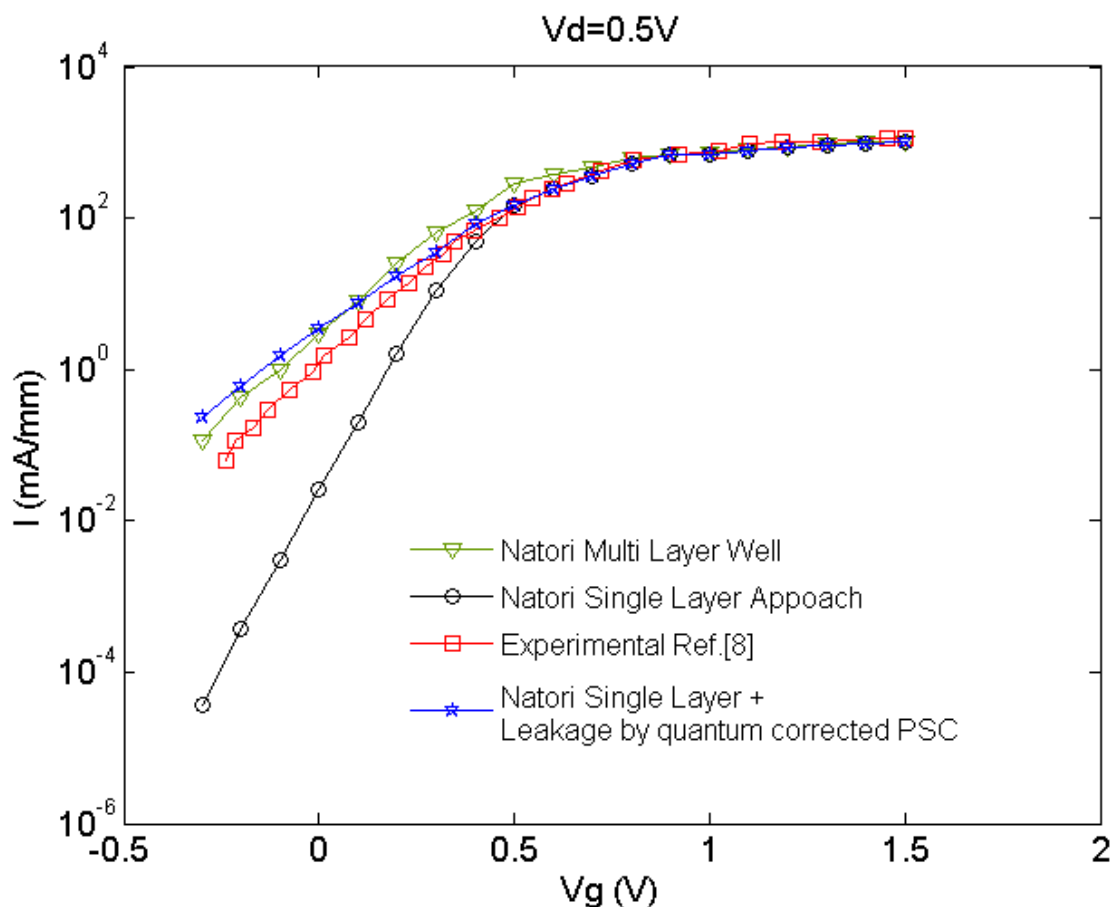
Σχήμα 5.5: Κατανομή πυκνότητας ρεύματος κατά βάθος της διάταξης: α) για $V_g=0V$ στην περιοχή υπο-κατωφλίου και β) για $V_g=1.5V$ κοντά στην περιοχή κόρου.

Στο σχήμα 5.6 φαίνεται η καμπύλη διαγωγιμότητας (το ρεύμα I_D ως μία συνάρτηση του V_G) για $V_D=0.5V$, υπολογισμένη με τρεις διαφορετικούς τρόπους, μαζί με την αντίστοιχη πειραματική καμπύλη (κόκκινα τετράγωνα) [11]. Η καμπύλη με τους κύκλους δίνει το ρεύμα υπολογισμένο με τη μέθοδο Natori και με τις ιδιοτιμές $E_{nz}(x_{max})$ να προκύπτουν από τη μονοδιάστατη επίλυση της εξίσωσης Schroedinger με ένα δυναμικό δυδιάστατο $V_c(x_{max},z)$ που προκύπτει από τη μέθοδο PSC με κβαντικές διορθώσεις. Το συγκεκριμένο δυναμικό εκτείνεται μόνο μέσα στο στρώμα των 10nm του καναλιού και είναι σχεδόν τραπεζοειδές. Είναι εμφανές ότι με αυτήν την μέθοδο προκύπτει ένα ρεύμα το οποίο συμφωνεί με την πειραματική καμπύλη στην περιοχή κόρου αλλά είναι τάξεις μεγέθους σε απόκλιση στην περιοχή υπο-κατωφλίου. Η συγκεκριμένη καμπύλη αποτελεί το αποτέλεσμα που θα προέκυπτε από ένα απλοποιημένο μοντέλο εάν ένα τραπεζοειδές δυναμικό χρησιμοποιούνταν στην επίλυση της εξίσωσης Schroedinger σε μία διάσταση.

Η καμπύλη με τα τρίγωνα είναι το αποτέλεσμα των υπολογισμών με τη σχέση Natori αλλά το δυναμικό $V_c(x_{max},z)$ που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών $E_{nz}(x_{max})$ είναι αυτό που προκύπτει από τη μέθοδο PSC με κβαντικές διορθώσεις και το οποίο περιέχει εκτός από το στρώμα του καναλιού και το στρώμα παροχής που βρίσκεται κάτω από το κανάλι. Με άλλα λόγια ολόκληρο το δυναμικό του σχήματος 5.4 χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών $E_{nz}(x_{max})$. Παρατηρείται σε αυτό το σημείο ότι η συμφωνία με την πειραματική καμπύλη διορθώνεται και η καμπύλη προσομοίωσης διαφέρει ελάχιστα από την πειραματική.

Για να επαληθευτεί ο ισχυρισμός ότι το παρασιτικό ρεύμα κάτω από το κανάλι είναι ο λόγος για τον οποίο η σχέση Natori δεν δίνει επαρκή αποτελέσματα και η

συγκεκριμένη αδυναμία διορθώνεται όταν περιληφθεί όλο το δυναμικό έχει γίνει η εξής εργασία: Έχει υπολογιστεί το ολοκλήρωμα της πυκνότητας του ρεύματος που προκύπτει από τη μέθοδο PSC από το τέλος του καναλιού ($x=80\text{nm}$) έως και το τέλος του στρώματος παροχής (υπόστρωμα) και έτσι έχει υπολογιστεί το παρασιτικό ρεύμα (όχι η πυκνότητα του ρεύματος). Στη συνέχεια έχει προστεθεί σε αυτό το παρασιτικό ρεύμα το ρεύμα που προκύπτει από τη μέθοδο Natori με το μονοδιάστατο κβαντικό πηγάδι να είναι ίσο σε βάθος με το βάθος του καναλιού μόνο. Το άθροισμα είναι η καμπύλη με τα αστέρια η οποία είναι σε καλή συμφωνία με την πειραματική (τετράγωνα). Η παραπάνω συζήτηση δείχνει ότι μία παραπλανητική κλίση της περιοχής υπο-κατωφλίου θα υπολογιζόταν με τη μέθοδο του Natori.



Σχήμα 5.6: Πειραματική καμπύλη (κόκκινα τετράγωνα) και καμπύλες προσομοίωσης για την διάταξη του Σχήματος 5.1.γ. Η καμπύλη με τους μαύρους κύκλους αποτελεί την καμπύλη υπολογισμού του ρεύματος με τη μέθοδο Natori. Η καμπύλη με τα πράσινα τρίγωνα είναι ο υπολογισμός του ρεύματος με τη μέθοδο Natori όπου έχει επεκταθεί το πεδίο επίλυσης της μονοδιάστασης Schrödinger και κάτω από το κανάλι. Η καμπύλη με τα αστέρια είναι ο υπολογισμός του ρεύματος με τη μέθοδο Natori στον οποίο έχει προστεθεί και το παρασιτικό ρεύμα κάτω από το κανάλι από τη μέθοδο PSC.

4.4 Συμπεράσματα

Από την παραπάνω ανάλυση προκύπτει ότι η μέθοδος Natori, η οποία στην ουσία είναι μία ακριβής εφαρμογή της μεθόδου Landauer, γίνεται μη αξιόπιστη για την περιοχή υπο-κατωφλίου αν εφαρμοστεί στα πλαίσια ενός απλοποιημένου μοντέλου. Δηλαδή, στα πλαίσια ενός μοντέλου όπου το δυναμικό μόνο μέσα στο κανάλι χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των απαιτούμενων ιδιοτιμών. Μία τέτοια προσέγγιση καταλήγει σε μία παραπλανητικά πολύ μικρή κλίση υπο-κατωφλίου περιοχής. Εάν, ωστόσο, στην εφαρμογή της σχέσης Natori χρησιμοποιηθεί το δυναμικό όλων των στρωμάτων της διάταξης, τότε η μέθοδος δίνει αποτελέσματα τα οποία βρίσκονται σε πολύ καλή συμφωνία με τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα.

Συμπεράσματα

Τα αποτελέσματα των χαρακτηριστικών του ρεύματος I_D-V_G για τη διάταξη μεγάλου καναλιού με μήκος 200nm βρίσκονται σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα και στην γραμμική περιοχή και στον κόρο χωρίς καμία προσαρμογή παραμέτρων, εκτός από το φράγμα Schottky Φ_b . Ωστόσο, η διάταξη μεγάλου καναλιού ως τρανζίστορ ανοίγει αργά και αυτό οφείλεται στο μεγάλο παρασιτικό ρεύμα το οποίο υπάρχει κάτω από το κανάλι.

Για τη διάταξη μικρού καναλιού με μήκος 30nm τα αποτελέσματα των χαρακτηριστικών του ρεύματος I_D-V_G βρίσκονται επίσης σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα και στην γραμμική περιοχή και στον κόρο, αρκεί να προσαρμοστεί μία παράμετρος στο μοντέλο της εξίσωσης ολίσθησης-διάχυσης, που είναι η ταχύτητα κόρου v_{sat} (προσαρμόζεται σε υψηλές τιμές V_G και διατηρείται αφού προσαρμοστεί για όλες τις τιμές V_G). Η συγκεκριμένη προσέγγιση καλείται PSC με κβαντικές διορθώσεις.

Συμπεραίνεται επομένως ότι το κλασικό μοντέλο ανάλυσης στο οποίο επιλύονται αυτοσυνεπώς σε δύο διαστάσεις οι τρεις διαφορικές εξισώσεις Poisson, Schroedinger και η εξίσωση Συνεχειάς μπορεί να επεκταθεί ως προς την εφαρμογή του και σε διατάξεις QWFETs μικρού καναλιού με την προσαρμογή της ταχύτητας κόρου v_{sat} . Μάλιστα η συγκεκριμένη προσέγγιση- PSC με κβαντικές διορθώσεις- βρίσκεται σε συμφωνία με την καθαρά κβαντική μέθοδο μεταφοράς του Landauer. Με αυτόν τον τρόπο, η μέθοδος PSC με κβαντικές διορθώσεις επιτρέπει την ενιαία προσέγγιση στην ανάλυση των QWFETs είτε είναι μεγάλου είτε μικρού καναλιού.

Η ανάλυση με τη συγκεκριμένη μέθοδο δίνει πληροφορίες για την πυκνότητα φορέων, για το ρεύμα και το δυναμικό σε όλο το εύρος της διάταξης κατά βάθος. Προκύπτουν επομένως πολύτιμες πληροφορίες για τα παρασιτικά ρεύματα που εμφανίζονται στην περιοχή των στρωμάτων κάτω από το κανάλι αλλά και για την περιοχή υπο-κατωφλίου. Σύμφωνα με τα παραπάνω, η μέθοδος επιτρέπει την καλύτερη κατανόηση των πλεονεκτημάτων και των μειονεκτημάτων των διαφορετικών τύπων QW FETs.

Επιπρόσθετα, από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων του συμπαγούς μοντέλου του Natori για τον υπολογισμό του ρεύματος, με τα πειραματικά δεδομένα και με τα αποτελέσματα της μεθόδου PSC με κβαντικές διορθώσεις, συμπεραίνεται ότι η μέθοδος Natori γίνεται αναξιόπιστη στην περιοχή υπο-κατωφλίου και καταλήγει στον

υπολογισμό μίας παραπλανητικής πολύ μικρής κλίσης. Η συγκεκριμένη αδυναμία μπορεί να διορθωθεί με τη χρήση στη σχέση Natori ολόκληρου του δυδιάστατου δυναμικού που προκύπτει από τη μέθοδο PSC κατά βάθος της διάταξης. Σε αυτήν την περίπτωση η μέθοδος ανακτά την ισχύ της και δίνει αποτελέσματα τα οποία βρίσκονται σε πολύ καλή συμφωνία με τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα.

Η σύγκριση των δύο μεθόδων αναδεικνύει την αδυναμία των συμπαγών μοντέλων στον υπολογισμό του ρεύματος, κυρίως στην περιοχή υπο-κατωφλίου, καθώς πλήθος πληροφορίας χάνεται από την απλοποίηση των χρησιμοποιούμενων δυναμικών. Επιπλέον αναδεικνύει τη σημαντικότητα του αναλυτικού μοντέλου PSC με κβαντικές διορθώσεις που αν και χρονοβόρο σε υπολογιστική ισχύ δίνει πληροφορίες για τη συγκέντρωση φορέων, το ρεύμα και το δυναμικό σε όλη τη διάταξη. Προσφέρει με αυτόν τον τρόπο πλήθος πληροφορίας και αποτελεί μία λύση ώστε η χρήση των συμπαγών μοντέλων να ανακτά την εγκυρότητα της μέσα από την χρήση του δυδιάστατου δυναμικού σε όλα τα στρώματα της διάταξης.

Μελλοντική Εργασία

Μελλοντικά ενδιαφέρον θα παρουσίαζε η εφαρμογή των δύο μεθόδων σε διατάξεις FinFets τριπλής πύλης και σε νανοσύρματα υλικών III-V που αποτελούν επίσης μεταγενέστερους ανταγωνιστές τεχνολογίας μετά τα τρανζίστορ Si.

Επιπρόσθετα, ενδιαφέρον θα παρουσίαζε η προσπάθεια μείωσης του παρασιτικού ρεύματος που υπάρχει κάτω από το κανάλι μέσω του πειραματισμού με χρήση διαφορετικών υλικών με μεγαλύτερο ενεργειακό διάκενο πάνω και κάτω από το κανάλι, για καλύτερο εγκλωβισμό των φορέων στο κανάλι.

Όσον αφορά στη χρήση του συγκεκριμένου προγράμματος, χρήσιμη θα ήταν η βελτίωση του κώδικα για εξοικονόμηση υπολογιστικής ισχύος. Πιθανή προσαρμογή του κώδικα για χρήση σε υπερυπολογιστές με παράλληλο προγραμματισμό θα ήταν εξαιρετικά ενδιαφέροντα και χρήσιμα.

Τέλος, ενδιαφέρον θα παρουσίαζε η συγκέντρωση πληροφοριών για την μεταβολή των χαρακτηριστικών του ρεύματος στο κανάλι με την αλλαγή των διαστάσεων της διάταξης.

Παράρτημα

Προγράμματα

Στο παράρτημα αυτό παρατίθεται ο κώδικας MATLAB που αναπτύχθηκε για να γίνουν οι προσομοιώσεις και οι υπολογισμοί της συγκεκριμένης διατριβής. Ο κώδικας τοποθετείται σε διαφορετικά αρχεία *.m. Σε κάθε επικεφαλίδα αντιστοιχεί ένα διαφορετικό αρχείο *.m.

Ο κώδικας στο μέρος A είχε κατασκευαστεί αρχικά από τον Δρ.Γρηγόριο Κροκίδη για χρήση σε προσομοιώσεις HEMTs.

Στην συγκεκριμένη διατριβή, στο μέρος A, ο κώδικας ανακατασκευάζεται και χτίζεται ώστε να προσομοιώνει διαφορετικού τύπου III-V Quantum Well FETs με τη μέθοδο PSC με κβαντικές διορθώσεις.

Στο μέρος B παρατίθεται ένας καινούριος κώδικας που αναπτύχθηκε για τον υπολογισμό του ρεύματος σε III-V Quantum Well FETs με τη μέθοδο Natori.

A. Υπολογισμός Ρεύματος με PSC με κβαντικές διορθώσεις για Διάταξη Μικρού καναλιού

```
function [V,E,Q,Qs,Vc,S,Qqm,Qcl,Norma,Ns,Ef,n_el,Jx,Jy,Is,Id,Ax,Ay,lhalf] =  
Self_Con(Fb,Vg,Vd,Qin,Efin,iter)
```

```
Globals;  
Global_init;
```

```
V=zeros(Kx,Ky);  
Jx=zeros(Kx,Ky);  
Jy=zeros(Kx,Ky);
```

```
Nstart=-0.03*Nd4;
```

```
Qstart=Charge(Nstart); %Initial Charge Estimate  
Qion=Charge('b');
```

```
if Qin==0  
    Q=Qstart;  
else  
    Q=Qin;  
end
```

```
if Efin==0  
    Ef=zeros(Kx,Ky);  
else  
    Ef=Efin;  
end
```

```
load Fc-10_60.mat;
```

```
[Vsb1,Vdb1,Vsb2,Vdb2] = FindVcon(0);  
%Find boundary condition for Ohmic Contacts  
Vsb1=-Vsb1-DEc4;  
Vdb1=-Vdb1-DEc4;
```

```
n_el=zeros(Kx,Ky);
```

```
n_el(1:i2-1,1:johm1)=  
-(Q(1:i2-1,1:johm1)-Qion(1:i2-1,1:johm1))*(eo*e5/q)*(10^18);  
% left InGaAs: area below source and left of OXIDE
```

```
n_el(i1:i2-1,johm1:johm2-1)=  
-(Q(i1:i2-1,johm1:johm2-1)-Qion(i1:i2-1,johm1:johm2-1))*(eo*e1/q)*(10^18); % OXIDE
```

```

n_el(1:i2-1,johm2:Ky)=- (Q(1:i2-1,johm2:Ky)-Qion(1:i2-
1,johm2:Ky))*(eo*e5/q)*(10^18);
% right InGaAs: area below drain and right of OXIDE

n_el(i1:i2-1,johm1:johm2-1)=- (Q(i1:i2-1,johm1:johm2-1)-Qion(i1:i2-
1,johm1:johm2-1))*(eo*e2/q)*(10^18);
% InAlAs cap

n_el(i2:i3-1,:)=-(Q(i2:i3-1,:)-Qion(i2:i3-1,:))*(eo*e3/q)*(10^18);
% InGaAs channel

n_el(i3:Kx,:)=-(Q(i3:Kx,:)-Qion(i3:Kx,:))*(eo*e4/q)*(10^18);
% InAlAs substrate

%Iterations for Poisson-Schrodinger-Continuity
Norma_Q=10;
Norma_I=10;
Iterations=0;
fname =
strcat('results/run_Lg=',num2str(Lg),'_Fb=',num2str(Fb),'_Vg=',num2str(Vg),'_
Vd=',num2str(Vd));
fname = strrep(fname,',';');
disp(fname)
filename = 'results/runlast.dat';
fide1=fopen(filename,'a+');
datestr = DATESTR(NOW);
fprintf(fide1,'-----\n');
fprintf(fide1,'start time:%s',datestr);
fprintf(fide1,'\nKx=%0.3e\t Ky=%0.3e\t Lg=%0.3e\t Fb=%0.3e\t Vg=%0.3e\t
Vd=%0.3e\n', Kx, Ky, Lg, Fb, Vg, Vd);
fprintf(fide1,'Iterations\t Ns\t Norma\t Id\t Is\t Ihalf\n');
fclose(fide1);
I=0.1;
while Iterations+1<=iter & Norma_Q>1e-5
    Iterations = Iterations + 1;
    disp(Iterations);
    disp('Poisson')
    Vold=V;
    V=Poisson_D(Vg+Fb,Vsb1,Vd+Vdb1,0,0,Q);
    Vc=-V;
    [Vc,DEcm]=SubDEC(Vc);

    Emin=min(min(Vc(iqstart:jqend,jqstart:jqend)));
    Vband=Vc;
    Vband=real(Vband);
    Vc=Vc-Emin;
    Vc=real(Vc);

```

```

disp('Continuity')
Efold=Ef;
if Vd~=0
    Ef=Cont_EfS_SGNU(n_el,Vg,-Vd,V,0,Ef);
else
    Ef=zeros(Kx,Ky);
end

Ef_graph=Ef;

disp('Schrodinger')
[Eigf,E]=Schro2D(Vc);
E=E*A*(10^18)/q; %Converting En to eV

Qold=Q-Qion;

Ef=Ef-Emin;

Etopc=max(Vc(iqend,jqstart:jqend));

for j=1:Ky
    Etop(j)=Vc(iqend,j);
end

Qcl=QClassFer(Vc,Ef,Etop);
% Qcl(ih:isub-1,:)=0; only when some layer is very very thin comparable to
others
Q=Qcl;

[Qqm,S]=Qquantum(Eigf,E,Etop,Ef);
Q=Q+Qqm;

Q=Qold+0.01*(Q-Qold);
%Q=real(Q);

for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        if Q(i,j)>0
            Q(i,j)=0;
        end
    end
end

n_el(1:i2-1,1:johm1)=-((Q(1:i2-1,1:johm1))*(eo*e5/q)*(10^18));
% left InGaAs: area below source and left of OXIDE

n_el(1:i1-1,johm1:johm2-1)=-((Q(1:i1-1,johm1:johm2-1))*(eo*e1/q)*(10^18));
% OXIDE

```

```

n_el(1:i2-1,johm2:Ky)=- (Q(1:i2-1,johm2:Ky))*(eo*e5/q)*(10^18);
% right InGaAs: area below drain and right of OXIDE

n_el(i1:i2-1,johm1:johm2-1)=- (Q(i1:i2-1,johm1:johm2-
1))*(eo*e2/q)*(10^18);
% InAlAs cap

n_el(i2:i3-1,:)=-(Q(i2:i3-1,:))*(eo*e3/q)*(10^18);
% InGaAs channel

n_el(i3:Kx,:)=-(Q(i3:Kx,:))*(eo*e4/q)*(10^18);
% InAlAs substrate

Qold=Qold+Qion;
Q=Q+Qion;

[Jx,Jy,Vx,Vy,Vmag,Ex,Ey,divJ,Ratio]= JCurrNU(V,n_el,Ef,0);
[Jx2,Jy2,Jxdr,Jydr,Jxdif,Jydif,divJ2,Ratio2] = JDDNU(V,n_el,Ef,0);

Is=sum(Jx(1,1:js))*resy*(10^-9);

Id=sum(Jx(1,jd:Ky))*resy*(10^-9);

Ihalf=0;
for i=2:Kx
    Ihalf=Ihalf+Jy(i,round(Ky/2))*((Ax(i)-Ax(i-1))*(10^-9));
end

Norma_Q=rmsNorm(Q-Qold)/rmsNorm(Qold);

Iold=I;
I=(Id-Is)/2;

if Vd~=0
    Norma_I=rmsNorm(I-Iold)/rmsNorm(Iold);
end

Norma(Iterations)=Norma_Q;
%IdsErr(Iterations)=abs((Is+Id));

for i=1:Kx
    Qs(i)=sum(Q(i,jgs:jge-1)-Qion(i,jgs:jge-1));
end
Qs=Qs/(jge-jgs);
Qs=Qs';

```



```

Ns=0;
for i=i1:i2-1
    Ns=(Ns+Qs(i)*(Ax(i)-Ax(i-1))*(eo*e2*(10^5)/q)/(10^11));
end
for i=i2:i3-1
    Ns=(Ns+Qs(i)*(Ax(i)-Ax(i-1))*(eo*e3*(10^5)/q)/(10^11));
end
for i=i3:Kx
    Ns=(Ns+Qs(i)*(Ax(i)-Ax(i-1))*(eo*e4*(10^5)/q)/(10^11));
end

Ns=-Ns;

fide1=fopen(filename,'a+');
sizeNorma=size(Norma);
fprintf(fide1,'%3e\t%.10e\t%.10e\t%.10e\t%.10e\t%.10e\n', Iterations,
Ns, Norma(sizeNorma(1,2)), Id, Is, (Id-Is)/2);
fclose(fide1);
%Ns
%Norma(sizeNorma(1,2))
save(fname)
end

fide1=fopen(filename,'a+');
datestr = DATESTR(NOW);
fprintf(fide1,'stop time:%s',datestr);
fprintf(fide1,'\n-----\n\n\n');
fclose(fide1);

S;
Ygs;
Yge;
Ys;
Yd;
Vg;
Vd;
iter;
save(fname)

```

Αρχικοποίηση Φυσικών Παραμέτρων, Παραμέτρων Υλικών, Διαστάσεων

%Physical constants

```
global eo q me hbar A kT Nc1 Nc2 Nc3;
eo=8.854*(10^-12);
q=1.602*(10^-19);
me=9.109*(10^-31);
hbar=1.055*(10^-34);
A=(hbar^2)/(2*me);
kT=0.026;
Nc1=sqrt(2*me)/(pi*hbar);
Nc2=me/(pi*(hbar^2));
Nc3=2*(me*kT*q/(2*pi*(hbar^2)))^(3/2);
```

%Material Parameters

```
global e1 e2 e3 e4 e5 eins Fb m1 m2 m3 m4 m5 DEc1 DEc2 DEc3 DEc4 Nd4
States Nc3_1 Nc3_2 Nc3_3 Nc3_4 Nc3_5 Ncont mob1 mob2 mob3 mob4 mob5
Vsat1 Vsat2 Vsat3 Vsat4 Vsat5 Fo2 Fo3 Fo4 Fo5;
e1=10; %1: Al2O3
e2=12.42; %2: In(0.51)Al(0.49)As
e3=13.85; %3: In(0.53)Ga(0.47)As
e4=12.42; %4: In(0.51)Al(0.49)As
e5=13.85; %5: In(0.53)Ga(0.47)As
```

```
eins=7;
```

```
m1=0.084;
m2=0.076;
m3=0.041;
m4=0.076;
m5=0.041;
```

```
DEc1=3.17; %AlO - InAlAs
DEc2=3.7; %AlO - InGaAs
DEc3=3.17; %AlO - InAlAs
DEc4=3.7; %AlO - InGaAs
```

```
Nd4=3*(10^24); % Doping at InAlAs layer -4th layer
Ncont=4.5*(10^25); %Doping at ohmic contacts
Nc3_1=Nc3*(m1^(3/2));
Nc3_2=Nc3*(m2^(3/2));
Nc3_3=Nc3*(m3^(3/2));
Nc3_4=Nc3*(m4^(3/2));
Nc3_5=Nc3*(m5^(3/2));
```

```
mob1=0.3;
mob2=0.48; %InAlAs
mob3=0.95; %InGaAs for 10nmInGaAs QW (Interface InGaAs/InAlAs)
```

```

mob4=0.48; %InAlAs
mob5=0.95; %InGaAs

Vsat1=0.75*(10^5);
Vsat2=0.75*(10^6);
Vsat3=0.6*(10^6); %Overshoot
Vsat4=0.75*(10^6);
Vsat5=0.6*(10^6);

Fo2=4.1*(10^5);
Fo3=3.1*(10^5);
Fo4=4.1*(10^5);
Fo5=3.1*(10^5);
States=80;

%Geometry and mesh
global X1 X Y Kx Ky resx resy X2 X3 Xohm Xrec Xdstart Xdend Ygs Yge Xd Xs
Yohm1 Yohm2 Ys Yd Ax Ay space;

Kx=130;
Ky=110;
X1=60; %end of layer 1 Oxide
X2=70;%end of layer 2 InAlAs
X3=80;%end of layer 3 InGaAs
Xdstart=90;%start of Nd++
Xdend=93;%end of Nd++

Xrec=55.4; % estimation of the point that oxide starts, thickness of Al2O3 + Xrec
= X1

Xqstart=70;
Xqend=80;

Gap=100; %Gap between Ohmic contacts and gate
Lg=30; %Gate Length
Yohm1=50; %end of Ohmic contact 1
space=0;
Ys=Yohm1-space; %end of source
Ygs=Yohm1+Gap; %start of gate
Yge=Ygs+Lg; %end of gate
Yohm2=Yge+Gap; %start of ohmic contact 2
Yd=Yohm2+space; %start of drain
Y=330; %end of device

Xd=0;
Xs=0;

X=130; %end of device

```

```

Xohm=80;

resx=X/(Kx-1);
resy=Y/(Ky-1);

Ax=(0:resx:X);
Ay=(0:resy:Y);

global i1 i2 i3 idstart idend is id iohm js jd jgs jge johm1 johm2 iqstart iqend
jqstart jqend irec xo Co Vt Ro mobno;

i1=Findij(X1,Ax);
i2=Findij(X2,Ax);
i3=Findij(X3,Ax);
idstart=Findij(Xdstart,Ax);
idend=Findij(Xdend,Ax);
iohm=Findij(Xohm,Ax);
iqstart=Findij(Xqstart,Ax);
iqend=Findij(Xqend,Ax);
is=Findij(Xs,Ax);
id=Findij(Xd,Ax);

irec=Findij(Xrec,Ax);
if irec<=0
    irec=1;
end

jgs=Findij(Ygs,Ay);
jge=Findij(Yge,Ay);

johm1=Findij(Yohm1,Ay);
johm2=Findij(Yohm2,Ay);

js=Findij(Ys,Ay);
jd=Findij(Yd,Ay);

Kxq=iqend-iqstart+1;

jqstart=Findij(Yohm1-5,Ay);
jqend=Findij(Yohm2+5,Ay);
Kyq=jqend-jqstart+1;

%Scaling
xo=30*(10^-9); %956*(10^-9); %
Co=10^23; %1.84*(10^12); %
mobno=(10^-4)/kT;
Vt=kT;
Ro=10^18;

```

Συνάρτηση Εύρεσης σημείων του πλέγματος i,j για δεδομένα X,Y

```
function k=Findij(xin,Ain);
%FINDIJ find the i for a given X,Xv or Y,Yv

[Dum,N]=size(Ain);
B=abs(Ain-xin);
min=B(1);
k=1;

for i=1:N
    if B(i)<min
        min=B(i);
        k=i;
    end
end
```

Συνάρτηση Χωρικού Φορτίου

```
%SPACE CHARGE calculates the right-hand term in the
%Poisson equation due to free space charge
```

```
Globals;
```

```
Q=zeros(Kx,Ky);
%Charge in V/nm2
```

```
%Barrier Doping Concentration in (/m3)
```

```
if N1=='b'
    for i=idstart:idend
        for j=1:Ky
            Q(i,j)=Nd4;
        end
    end
end
```

```
%Ohmic Contact Doping in (/m3)
```

```
for i=1:iohm-1

    for j=1:johm1
        Q(i,j)=Ncont;
    end

    for j=johm2:Ky
        Q(i,j)=Ncont;
    end
end
end
```

```

if N1~='b'

    for i=i2:Kx
        for j=1:Ky
            Q(i,j)=N1;
        end
    end

    for i=1:iohm
        for j=1:johm1
            Q(i,j)=0;
        end

        for j=johm2:Ky
            Q(i,j)=0;
        end
    end

% Transform to V/nm^2
%Right Hand Side of Poisson

Q(1:i2-1,1:johm1)=Q(1:i2-1,1:johm1)*(q/(eo*e5))*(10^-18);
% left InGaAs: area below source and left of OXIDE

Q(irec:i1-1,johm1:johm2-1)=Q(irec:i1-1,johm1:johm2-1)*(q/(eo*e1))*(10^-18);
% OXIDE

Q(1:i2-1,johm2:Ky)=Q(1:i2-1,johm2:Ky)*(q/(eo*e5))*(10^-18);
% right InGaAs: area below drain and right of OXIDE

Q(i1:i2-1,johm1:johm2-1)=Q(i1:i2-1,johm1:johm2-1)*(q/(eo*e2))*(10^-18);
% InAlAs cap

Q(i2:i3-1,:)=Q(i2:i3-1,:)*(q/(eo*e3))*(10^-18);
% InGaAs channel

Q(i3:Kx,:)=Q(i3:Kx,:)*(q/(eo*e4))*(10^-18);
% InAlAs substrate

```

Συνάρτηση Οριακών Συνθηκών σε Πηγή και Απαγωγού

```
function [Vsb1,Vdb1,Vsb2,Vdb2] = FindVcon(Choice)
%FINDVCON Finds the boundary conditions for fixed Ncon
%at source and drain contacts

Globals;

load Fc-10_60.mat;
Xfer=-10:0.1:60;

Fhalf=Ncont/Nc3_5;% Nc3_5 while old Nc3_1
kf=1;
while Fm(kf)<Fhalf
    kf=kf+1;
end
nf=Xfer(kf-1)+((Fhalf-Fm(kf-1))*(Xfer(kf)-Xfer(kf-1))/(Fm(kf)-Fm(kf-1)));
%nf=-10+(kf-2)*0.1;
Vsb1=-nf*kT; % nf=(Ef-Ec)/kT => -nf*kT=Ec-Ef => Ec4-Ef4=Vsb1
Vdb1=-nf*kT; % Ec4-Ef4=Vdb1

Fhalf=Ncont/Nc3_2;
kf=1;
while Fm(kf)<Fhalf
    kf=kf+1;
end
nf=Xfer(kf-1)+((Fhalf-Fm(kf-1))*(Xfer(kf)-Xfer(kf-1))/(Fm(kf)-Fm(kf-1)));
%nf=-10+(kf-2)*0.1;
Vsb2=-DEc1+nf*kT; % nf=(Ef-Ec)/kT => nf*kT=Ef2-Ec2 => Vsb2=-
DEc1+Ef2-Ec2
Vdb2=-DEc1+nf*kT;
```

Συνάρτηση Poisson

```
function Psi=Poisson_D(Vg,Vs1,Vd1,Vs2,Vd2,Q)
%Direct Poisson Solver with Vg,Vs,Vd input

Globals;

Psi=zeros(Kx,Ky);

N=Kx*Ky;

b=zeros(N,1);

for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
```

```

        b(k)=-Q(i,j);
    end
end

L=Lmatrix_PNU;

%Boundary Conditions

%Up
[L,b]=DirP(L,b,Xrec,Xrec,Ygs,Yge,Vg); %GATE parallel to Y-axis
[L,b]=DirP(L,b,0,0,0,Ys,Vs1); %SOURCE parallel to Y-axis
[L,b]=DirP(L,b,0,0,Yd,Y,Vd1); %DRAIN parallel to Y-axis

%left gap interface parallel to Y-axis
[L,b]=Neu_D(L,b,Xrec,Xrec,Yohm1+Ay(johm1+1)-Ay(johm1),Ygs-(Ay(jgs)-
Ay(jgs-1)),3);

%right gap interface parallel to Y-axis
[L,b]=Neu_D(L,b,Xrec,Xrec,Yge+Ay(jge+1)-Ay(jge),Yohm2-(Ay(johm2)-
Ay(johm2-1)),3);

%Down
[L,b]=Neu_D(L,b,X,X,0,Y,4); %lower side of device parallel to Y-axis

%Left
[L,b]=Neu_D(L,b,Ax(2)-Ax(1),X,0,0,1); %left side of device parallel to X-axis

[L,b]=Neu_D(L,b,0,Xrec,Yohm2,Yohm2,1); %left side of right ohmic contact
parallel to X-axis

%Right
[L,b]=Neu_D(L,b,Ax(2)-Ax(1),X,Y,Y,2); %right side interface oxide-gap
parallel to X-axis

[L,b]=Neu_D(L,b,0,Xrec,Yohm1,Yohm1,2); %right side of left ohmic contact
parallel to X-axis

```



```

pointerTableI=zeros(Kx*Ky,1);
pointerTableJ=zeros(Kx*Ky,1);

counterI=0;
counterJ=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;

        if i<irec & j>johm1 & j<johm2
            pointerTableI(k)=1;
            pointerTableJ(k)=1;
        end
    end
end

```

```

Lnew=sparse(N,N);
bnew=zeros(N,1);

```

```

counterI=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
        if pointerTableI(k)==0
            counterI=counterI+1;
            Lnew(counterI,:)=L(k,:);
            bnew(counterI)=b(k);
        end
    end
end
L=Lnew;
counterJ=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
        if pointerTableJ(k)==0
            counterJ=counterJ+1;
            Lnew(:,counterJ)=L(:,k);
        end
    end
end

```

```

clear L b
Lnew=Lnew(1:counterL,1:counterI)\bnew(1:counterI,1);
%[u,flag]=cgs(L,b,10^-6,100);

index=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
        if pointerTable(k)==1
            Psi(i,j)=Vg-Fb;
            index=index+1;
        else
            Psi(i,j)=unew(k-index);
        end
    end
end
end

```

Συνάρτηση Οριακών Τιμών Δυναμικού στις μεταλλικές επαφές

```
function [Lnew,bnew]=DirP(L,b,Xstart,Xend,Ystart,Yend,Vconst)
```

```
%Sets the potential boundary values for constant Psi along the metal contacts-
DIRECT
```

```
Globals;
```

```

istart=Findij(Xstart,Ax);
iend=Findij(Xend,Ax);
jstart=Findij(Ystart,Ay);
jend=Findij(Yend,Ay);

```

```

Lnew=L;
bnew=b;

```

```

for i=istart:iend
    for j=jstart:jend
        k=(i-1)*Ky+j;
        Lnew(k,:)=0;
        Lnew(k,k)=1;
        bnew(k)=Vconst;
    end
end
end

```

Συνάρτηση Neumann- Οριακή Συνθήκη που θέτει μηδενική παράγωγο δυναμικού κατά μήκος των ελεύθερων επιφανειών

```
function [Lnew,bnew]=Neu_D(L,b,Xstart,Xend,Ystart,Yend,C)
%Neuman boundary condition for direct solver
%zero derivative boundary condition along the free surfaces
```

```
Globals;
```

```
istart=Findij(Xstart,Ax);
iend=Findij(Xend,Ax);
jstart=Findij(Ystart,Ay);
jend=Findij(Yend,Ay);
```

```
Lnew=L;
bnew=b;
```

```
if C==1 %left
    for i=istart:iend
        k=(i-1)*Ky+jstart;
        Lnew(k,:)=0;
        Lnew(k,k)=3;
        Lnew(k,k+1)=-4;
        Lnew(k,k+2)=1;
        bnew(k)=0;
    end
elseif C==2 %right
    for i=istart:iend
        k=(i-1)*Ky+jend;
        Lnew(k,:)=0;
        Lnew(k,k)=3;
        Lnew(k,k-1)=-4;
        Lnew(k,k-2)=1;
        bnew(k)=0;
    end
elseif C==3 %up
    for j=jstart:jend
        k=(istart-1)*Ky+j;
        Lnew(k,:)=0;
        Lnew(k,k)=3;
        %Lnew(k,k+Kx)=-4;
        Lnew(k,k+Ky)=-4;
        %Lnew(k,k+2*Kx)=1;
        Lnew(k,k+2*Ky)=1;
        bnew(k)=0;
    end
elseif C==4 %down
    for j=jstart:jend
        k=(iend-1)*Ky+j;
        Lnew(k,:)=0;
```

```

Lnew(k,k)=3;
%Lnew(k,k-Kx)=-4;
Lnew(k,k-Ky)=-4;
%Lnew(k,k-2*Kx)=1;
Lnew(k,k-2*Ky)=1;
bnew(k)=0;
end
end

```

Συνάρτηση δημιουργίας πίνακα L Poisson για τις επιφάνειες ετεροεπαφών, όπου υπάρχει αλλαγή υλικού

```

function L=Lmatrix_PNU;
% Creates L matrix for Poisson equation for the surfaces of the heterostructures
that there is a material change

```

```

Globals;
N=Kx*Ky;
L=sparse(N,N);

```

```

for i=2:Kx-1
    for j=2:Ky-1

        k=(i-1)*Ky+j;
        a1=Ax(i+1)-Ax(i);
        a0=Ax(i)-Ax(i-1);
        b1=Ay(j+1)-Ay(j);
        b0=Ay(j)-Ay(j-1);
        L(k,k)=-((2/(a1*a0))+2/(b1*b0));
        L(k,k+1)=2/(b1*(b1+b0));
        L(k,k-1)=2/(b0*(b1+b0));
        L(k,k+Ky)=2/(a1*(a1+a0));
        L(k,k-Ky)=2/(a0*(a1+a0));
    end
end

```

```

% interface OXIDE (LAYER 1)- LAYER 2 (parallel to Y axis)
i=i1-1;
for j=johm1:johm2-1
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e1)*(e2-e1)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e1)*(e2-e1)/((a1+a0)^2));
end

```

```

i=i1;
for j=johm1:johm2-1
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e2)*(e2-e1)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e2)*(e2-e1)/((a1+a0)^2));
end

```

% interface OHMIC CONTACT 1 (Material 5) - LAYER 3 (Material 3) (parallel to Y axis)

```

i=i2-1;
for j=2:johm1-1 % j=1 free left surface Neu_D
    %Condition 1
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e5)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e5)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
end

```

```

i=i2;
for j=2:johm1-1
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e3)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e3)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
end

```

% interface OHMIC contact 2 (material 5)- LAYER 3 (parallel to Y axis)

```

i=i2-1;
for j=johm2:Ky-1 % j=Ky free right surface
    %Neu_D Condition 2
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e5)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e5)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
end

```

```

i=i2;
for j=johm2:Ky-1 % j=Ky free right surface
    %Neu_D Condition 2

    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e3)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e3)*(e3-e5)/((a1+a0)^2));
end

%interface MATERIAL 2 - MATERIAL 3 (parallel to Y axis)
i=i2-1;
for j=johm1:johm2-1
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e2)*(e3-e2)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e2)*(e3-e2)/((a1+a0)^2));
end

i=i2;
for j=johm1:johm2-1
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e3)*(e3-e2)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e3)*(e3-e2)/((a1+a0)^2));
end

%interface MATERIAL 3 - MATERIAL 4 (parallel to Y axis)
i=i3-1;
for j=2:Ky-1 % j=1 & j=Ky Neu_D
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e3)*(e4-e3)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e3)*(e4-e3)/((a1+a0)^2));
end

i=i3;
for j=2:Ky-1 % j=1 & j=Ky Neu_D
    k=(i-1)*Ky+j;
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)-((1/e4)*(e4-e3)/((a1+a0)^2));
    L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)+((1/e4)*(e4-e3)/((a1+a0)^2));
end

```

```
% OXIDE (MATERIAL 1) - OHMIC CONTACT 1 (MATERIAL 5) (interface left of  
OXIDE parallel to X axis)
```

```
j=johm1-1;  
for i=irec+1:i1-2 % for i2-1 there is a condition in Y axis  
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e5)*(e1-e5)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e5)*(e1-e5)/((b1+b0)^2));  
end
```

```
j=johm1;  
for i=irec+1:i1-2  
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e1)*(e1-e5)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e1)*(e1-e5)/((b1+b0)^2));  
end
```

```
% OXIDE (MATERIAL 1) - OHMIC CONTACT 2 (MATERIAL 5) (interface right of  
OXIDE parallel to X axis)
```

```
j=johm2-1;  
for i=irec+1:i1-2  
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e1)*(e5-e1)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e1)*(e5-e1)/((b1+b0)^2));  
end
```

```
j=johm2;  
for i=irec+1:i1-2  
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e5)*(e5-e1)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e5)*(e5-e1)/((b1+b0)^2));  
end
```

```
% InAlAs (MATERIAL 2) - OHMIC CONTACT 1(MATERIAL 5) (interface left of  
InAlAs parallel to X axis)
```

```
j=johm1-1;  
for i=i1+1:i2-2 % because for i2-1 there is a condition in Y axis for the material  
change 5-3.
```

```
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e5)*(e2-e5)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e5)*(e2-e5)/((b1+b0)^2));
```

```
end
```

```
j=johm1;  
for i=i1+1:i2-2 % because for i2-1 there is a condition in Y axis for the material  
change 5-3.
```

```
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e2)*(e2-e5)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e2)*(e2-e5)/((b1+b0)^2));
```

```
end
```

```
% InAlAs (MATERIAL 2) - OHMIC CONTACT 2 (MATERIAL 5) (interface right of  
InAlAs parallel to X axis)
```

```
j=johm2-1;  
for i=i1+1:i2-2 % because for i2-1 there is a condition in Y axis for the material  
change 5-3.
```

```
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e2)*(e5-e2)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e2)*(e5-e2)/((b1+b0)^2));
```

```
end
```

```
j=johm2;  
for i=i1+1:i2-2 % because for i2-1 there is a condition in Y axis for the material  
change 5-3.
```

```
    k=(i-1)*Ky+j;  
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);  
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);  
    L(k,k-1)=L(k,k-1)-((1/e5)*(e5-e2)/((b1+b0)^2));  
    L(k,k+1)=L(k,k+1)+((1/e5)*(e5-e2)/((b1+b0)^2));
```

```
end
```


Συνάρτηση Εύρεσης Διαφορών Ενεργειακών Διάκενων ΔEc

```
function [Vc,DEcm]=SubDEC(Vc)
%FINDDEC Compute DEc matrix and subtract from V
Globals;

DEcm=zeros(Kx,Ky);

DEcm(1:i2-1,1:johm1)=DEc4;    % left InAlAs : area below source and left of
OXIDE
DEcm(irec:i1-1,johm1:johm2-1)=0;    % reference material is OXIDE (greater
Eg)
DEcm(1:i2-1,johm2:Ky)=DEc4;    % right InAlAs: area below drain and right of
OXIDE
DEcm(i1:i2-1,johm1:johm2-1)=DEc1;    % area below oxide
DEcm(i2:i3-1,:)=DEc2;            % area below InAlAs
DEcm(i3:Kx,:)=DEc3;            % area below InGaAs

Vc=Vc-DEcm;
```

Συνάρτηση Continuity

```
function Ef=Cont_EfS_SGNU(n,Vg,Vd,V,Vn,Efold)
%CONT Solves continuity equation to obtain new Ef(x,y)
%zero recombination, Jx and Jy components

Globals;

Ef=zeros(Kx,Ky);

N=Kx*Ky;
L=sparse(N,N);
b=zeros(N,1);

n=n./Co;
Vg=Vg/Vt;
Vd=Vd/Vt;
Axn=(Ax*(10^-9))/xo;
Ayn=(Ay*(10^-9))/xo;

mob=zeros(Kx,Ky);

[mob,mobx,moby]=Mobility(Efold,V,n,Vn);
```

```

G=zeros(Kx,Ky); %1/(m^3*sec)

for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
        b(k)=G(i,j);
    end
end

for i=2:Kx-1
    for j=2:Ky-1
        %J(i+1/2)
        k=(i-1)*Ky+j;
        x=(V(i+1,j)-V(i,j))/kT;
        g=1/(1+exp(x/2));
        a1=Axn(i+1)-Axn(i);
        a0=Axn(i)-Axn(i-1);
        L(k,k)=L(k,k)-2*mobx(i,j)*((1-g)*n(i,j)+g*n(i+1,j))/(a1*(a1+a0));
        L(k,k+Ky)=2*mobx(i,j)*((1-g)*n(i,j)+g*n(i+1,j))/(a1*(a1+a0));
    end
end

for i=2:Kx-1
    for j=2:Ky-1
        %J(i-1/2)
        k=(i-1)*Ky+j;
        x=(V(i,j)-V(i-1,j))/kT;
        g=1/(1+exp(x/2));
        a1=Axn(i+1)-Axn(i);
        a0=Axn(i)-Axn(i-1);

        L(k,k)=L(k,k)-2*mobx(i-1,j)*((1-g)*n(i-1,j)+g*n(i,j))/(a0*(a1+a0));
        L(k,k-Ky)=2*mobx(i-1,j)*((1-g)*n(i-1,j)+g*n(i,j))/(a0*(a1+a0));
    end
end

for i=2:Kx-1
    for j=2:Ky-1
        %J(j+1/2)
        k=(i-1)*Ky+j;
        x=(V(i,j+1)-V(i,j))/kT;
        g=1/(1+exp(x/2));
        b1=Ayn(j+1)-Ayn(j);
        b0=Ayn(j)-Ayn(j-1);
        L(k,k)=L(k,k)-2*moby(i,j)*((1-g)*n(i,j)+g*n(i,j+1))/(b1*(b1+b0));
        L(k,k+1)=2*moby(i,j)*((1-g)*n(i,j)+g*n(i,j+1))/(b1*(b1+b0));
    end
end

```

```

for i=2:Kx-1
  for j=2:Ky-1
    %J(j-1/2)
    k=(i-1)*Ky+j;
    x=(V(i,j)-V(i,j-1))/kT;
    g=1/(1+exp(x/2));
    b1=Ayn(j+1)-Ayn(j);
    b0=Ayn(j)-Ayn(j-1);
    L(k,k)=L(k,k)-2*moby(i,j-1)*((1-g)*n(i,j-1)+g*n(i,j))/(b0*(b1+b0));
    L(k,k-1)=2*moby(i,j-1)*((1-g)*n(i,j-1)+g*n(i,j))/(b0*(b1+b0));
  end
end

b=b*(xo^2)/(Co*Vt);

[L,b]=DirP(L,b,0,0,0,0,Ys,0);
[L,b]=DirP(L,b,0,0,0,Yd,Y,Vd);

%Down
%[L,b]=Neu_D(L,b,X,X,0,Y,4);
% %Ef(Kx,:)=Ef(Kx-1,:)
i=Kx;
for j=1:Ky
  k=(i-1)*Ky+j;
  L(k,:)=0;
  L(k,k)=1;
  L(k,k-Ky)=-1;
end

%Left
%[L,b]=Neu_D(L,b,0,X,0,0,1);
%Ef(:,1)=Ef(:,2)
j=1;
for i=2:Kx
  k=(i-1)*Ky+j;
  L(k,:)=0;
  L(k,k)=1;
  L(k,k+1)=-1;
end

%Right
%[L,b]=Neu_D(L,b,0,X,Y,Y,2);
j=Ky;
for i=2:Kx
  k=(i-1)*Ky+j;
  L(k,:)=0;
  L(k,k)=1;
  L(k,k-1)=-1;
end

```

```

    %Right SIDE of left GaAs
    %Ef(1:ih,js)=Ef(1:ih,js-1)
    j=johm1;
    for i=2:i1
        k=(i-1)*Ky+j;
        L(k,:)=0;
        L(k,k)=1;
        L(k,k-1)=-1;
    end

    %Left SIDE of right GaAs
    %Ef(1:ih,jd)=Ef(1:ih,jd+1)
    j=johm2;
    for i=2:i1
        k=(i-1)*Ky+j;
        L(k,:)=0;
        L(k,k)=1;
        L(k,k+1)=-1;
    end

    %Down of OXIDE and SN
    %Ef(ih,js:jd)=Ef(ih+1,js:jd)
    i=i1;
    for j=johm1+1:johm2-1
        k=(i-1)*Ky+j;
        L(k,:)=0;
        L(k,k)=1;
        L(k,k+Ky)=-1;
    end

    i=1;
    for j=js+1:johm1
        k=(i-1)*Ky+j;
        L(k,:)=0;
        L(k,k)=1;
        L(k,k+Ky)=-1;
    end

    i=1;
    for j=johm2:jd-1
        k=(i-1)*Ky+j;
        L(k,:)=0;
        L(k,k)=1;
        L(k,k+Ky)=-1;
    end
end

```

```

for i=2:Kx-1
    for j=2:Ky-1
        k=(i-1)*Ky+j;
        lmax=max(abs([L(k,k),L(k,k+1),L(k,k-1),L(k,k+Ky),L(k,k-Ky),b(k,1)])));
    if lmax~=0
        L(k,k)=L(k,k)/lmax;
        L(k,k+1)=L(k,k+1)/lmax;
        L(k,k-1)=L(k,k-1)/lmax;
        L(k,k+Ky)=L(k,k+Ky)/lmax;
        L(k,k-Ky)=L(k,k-Ky)/lmax;
        b(k,1)=b(k,1)/lmax;
    end
end
end

```

%% calculation of NEW table in order to solve continuity outside OXIDE

```

pointerTableI=zeros(Kx*Ky,1);
pointerTableJ=zeros(Kx*Ky,1);
counterI=0;
counterJ=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;

        if i<i1 & j>johm1 & j<johm2
            pointerTableI(k)=1;
            pointerTableJ(k)=1;
        else
            if max(abs(L(k,:)))==0
                pointerTableI(k)=1;

            else
                if max(abs(L(:,k)))==0
                    pointerTableJ(k)=1;

                end
            end
        end
    end
end
end
end

```

```

Lnew=sparse(N,N);
bnew=zeros(N,1);
counterI=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
        if pointerTableI(k)==0
            counterI=counterI+1;
        end
    end
end

```

```

        Lnew(counterI,:)=L(k,:);
        bnew(counterI)=b(k);
    end
end
end
L=Lnew;
counterJ=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
        if pointerTableJ(k)==0
            counterJ=counterJ+1;
            Lnew(:,counterJ)=L(:,k);
        end
    end
end
end

%u=L\b;
clear L b
unew=Lnew(1:counterI,1:counterJ)\bnew(1:counterI,1);
index=0;
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        k=(i-1)*Ky+j;
        if pointerTableJ(k)==1
            Ef(i,j)=0;
            index=index+1;
        else
            Ef(i,j)=unew(k-index);
        end
    end
end
end
for i=1:Kx
    for j=1:Ky
        if i<iREC & j>jS & j<jD
            Ef(i,j)=-Vg;
        end
    end
end
end
Ef=Ef*Vt;

```

Συνάρτηση Κινητικότητα

```
function [mob,mobx,moby]=Mobility(Ef,V,n,Vn);  
%MOBILITY Calculate field dependent mobility for half mesh points
```

```
Globals;
```

```
mob=zeros(Kx,Ky);
```

```
mobx=zeros(Kx-1,Ky);
```

```
moby=zeros(Kx,Ky-1);
```

```
%Calculate Mobility at half points
```

```
%mobx
```

```
for i=1:i2-1
```

```
    %left InGaAs
```

```
    for j=2:johm1-1
```

```
        DVx(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-  
9))))^2)+(((V(i,j+1)-V(i,j-1))/((Ay(j+1)-Ay(j-1))*(10^-9))))^2));
```

```
        mobx(i,j)=(mob5+Vsat5*(1/Fo5))/(1+(DVx(i,j)/Fo5));
```

```
    end
```

```
    %right InGaAs
```

```
    for j=johm2+1:Ky-1
```

```
        DVx(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-  
9))))^2)+(((V(i,j+1)-V(i,j-1))/((Ay(j+1)-Ay(j-1))*(10^-9))))^2));
```

```
        mobx(i,j)=(mob5+Vsat5*(1/Fo5))/(1+(DVx(i,j)/Fo5));
```

```
    end
```

```
    mobx(i,1)=mobx(i,2);
```

```
    mobx(i,johm1)=mobx(i,johm1-1);
```

```
    mobx(i,Ky)=mobx(i,Ky-1);
```

```
    mobx(i,johm2)=mobx(i,johm2+1);
```

```
end
```

```
%inside CAP
```

```
for i=i1:i2-1
```

```
    for j=johm1+1:johm2-1
```

```
        DVx(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-  
9))))^2)+(((V(i,j+1)-V(i,j-1))/((Ay(j+1)-Ay(j-1))*(10^-9))))^2));
```

```
        mobx(i,j)=(mob2+Vsat2*(1/Fo2))/(1+(DVx(i,j)/Fo2));
```

```
    end
```

```
    mobx(i,johm1)=mobx(i,johm1+1);
```

```
    mobx(i,johm2)=mobx(i,johm2-1);
```

```
end
```

```

%inside CHANNEL
for i=i2:i3-1
    for j=2:Ky-1
        DVx(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-
9))))^2)+(((V(i,j+1)-V(i,j-1))/((Ay(j+1)-Ay(j-1))*(10^-9))))^2));
        mobx(i,j)=(mob3+Vsat3*(1/Fo3))/(1+(DVx(i,j)/Fo3));
    end
    mobx(i,1)=mobx(i,2);
    mobx(i,Ky)=mobx(i,Ky-1);
end

for i=i3:Kx-1
    for j=2:Ky-1
        DVx(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-
9))))^2)+(((V(i,j+1)-V(i,j-1))/((Ay(j+1)-Ay(j-1))*(10^-9))))^2));
        mobx(i,j)=(mob4+Vsat4*(1/Fo4))/(1+(DVx(i,j)/Fo4));
    end
    mobx(i,1)=mobx(i,2);
    mobx(i,Ky)=mobx(i,Ky-1);
end
for j=1:Ky
    mobx(Kx,j)=mobx(Kx-1,j);
end

%moby
for i=2:i2-1
    %left InGaAs
    for j=1:johm1-1
        DVy(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i-1,j))/((Ax(i+1)-Ax(i-1))*(10^-
9))))^2)+(((V(i,j+1)-V(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9))))^2));
        moby(i,j)=(mob5+Vsat5*(1/Fo5))/(1+(DVy(i,j)/Fo5));
    end
    moby(1,1:johm1-1)=moby(2,1:johm1-1);
    moby(i,johm1)=moby(i,johm1-1);
    moby(1,johm1)=moby(2,johm1);

    %right InGaAs
    for j=johm2:Ky-1
        DVy(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i-1,j))/((Ax(i+1)-Ax(i-1))*(10^-
9))))^2)+(((V(i,j+1)-V(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9))))^2));
        moby(i,j)=(mob5+Vsat5*(1/Fo5))/(1+(DVy(i,j)/Fo5));
    end
end

moby(1,johm2:Ky-1)=moby(2,johm2:Ky-1);
moby(2:i2-1,Ky)=moby(2:i2-1,Ky-1);
moby(1,Ky)=moby(2,Ky);

```



```

%inside CAP
for i=i1:i2-1
    for j=johm1:johm2-1
        DVy(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i-1,j))/((Ax(i+1)-Ax(i-1))*(10^-
9))))^2)+((((V(i,j+1)-V(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9))))^2));
        moby(i,j)=(mob2+Vsat2*(1/Fo2))/(1+(DVy(i,j)/Fo2));
    end
end

moby(i1:i2-1,johm2)=moby(i1:i2-1,johm2-1);

```

```

%inside CHANNEL
for i=i2:i3-1
    for j=1:Ky-1
        DVy(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i-1,j))/((Ax(i+1)-Ax(i-1))*(10^-
9))))^2)+((((V(i,j+1)-V(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9))))^2));
        moby(i,j)=(mob3+Vsat3*(1/Fo3))/(1+(DVy(i,j)/Fo3));
    end
end

moby(i2:i3-1,Ky)=moby(i2:i3-1,Ky-1);

```

```

for i=i3:Kx-1
    for j=1:Ky-1
        DVy(i,j)=sqrt((((V(i+1,j)-V(i-1,j))/((Ax(i+1)-Ax(i-1))*(10^-
9))))^2)+((((V(i,j+1)-V(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9))))^2));
        moby(i,j)=(mob4+Vsat4*(1/Fo4))/(1+(DVy(i,j)/Fo4));
    end
end

moby(i3:Kx-1,Ky)=moby(i3:Kx-1,Ky-1);
moby(Kx-1,1:Ky-1)=moby(Kx,1:Ky-1);
moby(Kx,Ky)=moby(Kx-1,Ky);

```

Συνάρτηση Schroedinger σε δύο διαστάσεις

```
function [V,E]=Schro2D(Vo)
%Shrodinger - Direct Solution
%for direct solver of the system Lu=b

Globals;

Vext=(Vo*q*(10^-18))/A;

for i=1:Kxq
    for j=1:Kyq
        Vnew(i,j)=Vext(i+iqstart-1,j+jqstart-1);
    end
end

L=Lmatrix_SNU(Vnew);

%Boundary Conditions
L=DirSNU(L,Vnew,0);

%eff mass correction
L=LmcorrNU(L);

flag=0;

opts.disp=0;
[V,Ed]=eigs(L,States,'SR',opts);

flag=1;

for i=1:States
    E(i)=Ed(i,i);
end
E=real(E);

[E,Index]=sort(E);
V=V(:,Index);
```

Συνάρτηση για σχηματισμό πίνακα L για εσωτερικά σημεία του κβαντικού κουτιού

```
function L=Lmatrix_SNU(V)
%creates the L matrix for Schrodinger equation

Globals;

n=Kxq*Kyq;
L=sparse(n,n);

for i=2:i2-iqstart-1
    for j=johm1-jqstart:johm2-jqstart-1

        k=(i-1)*Kyq+j;
        io=i+iqstart-1;
        jo=j+jqstart-1;
        a1=Ax(io+1)-Ax(io);
        a0=Ax(io)-Ax(io-1);
        b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
        b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
        L(k,k)=((2/(a1*a0))+(2/(b1*b0)))*(1/m2)+V(i,j);
        L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m2);
        L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m2);
        L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m2);
        L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m2);

    end
end

for i=i2-iqstart+2: i3-iqstart-1
    for j=2:Kyq-1

        k=(i-1)*Kyq+j;
        io=i+iqstart-1;
        jo=j+jqstart-1;
        a1=Ax(io+1)-Ax(io);
        a0=Ax(io)-Ax(io-1);
        b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
        b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
        L(k,k)=((2/(a1*a0))+(2/(b1*b0)))*(1/m3)+V(i,j);
        L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m3);
        L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m3);
        L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);
        L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m3);

    end
end
```

```

for i=i3-iqstart+2:Kxq-1
  for j=2:Kyq-1

    k=(i-1)*Kyq+j;
    io=i+iqstart-1;
    jo=j+jqstart-1;
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
    b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
    b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
    L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m4)+V(i,j);
    L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m4);
    L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m4);
    L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m4);
    L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m4);

  end
end

```

```

for i=2:i2-iqstart-1
  for j=2:johm1-jqstart-1

    k=(i-1)*Kyq+j;
    io=i+iqstart-1;
    jo=j+jqstart-1;
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
    b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
    b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
    L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m5)+V(i,j);
    L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m5);
    L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m5);
    L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m5);
    L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m5);

  end
end

```

```

for i=2:i2-iqstart-1
    for j=johm2-jqstart:Kyq-1

        k=(i-1)*Kyq+j;
        io=i+iqstart-1;
        jo=j+jqstart-1;
        a1=Ax(io+1)-Ax(io);
        a0=Ax(io)-Ax(io-1);
        b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
        b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
        L(k,k)=((2/(a1*a0))+(2/(b1*b0)))*(1/m5)+V(i,j);
        L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m5);
        L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m5);
        L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m5);
        L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m5);

    end
end

```

Εάν το κβαντικό κουτί είναι μόνο μέσα στο κανάλι:

```

function L=Lmatrix_SNU(V)
%creates the L matrix for Schrodinger equation

Globals;

n=Kxq*Kyq;
L=sparse(n,n);

for i=i2-iqstart+2:Kxq-1
    for j=2:Kyq-1

        k=(i-1)*Kyq+j;
        io=i+iqstart-1;
        jo=j+jqstart-1;
        a1=Ax(io+1)-Ax(io);
        a0=Ax(io)-Ax(io-1);
        b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
        b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
        L(k,k)=((2/(a1*a0))+(2/(b1*b0)))*(1/m3)+V(i,j);
        L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m3);
        L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m3);
        L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);
        L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m3);

    end
end

```

Οριακές συνθήκες Dirichlet στα όρια του κβαντικού κουτιού-
Μηδενική κυματοσυνάρτηση Ψ_i

```
function L=DirSNU(Lold,V,C)  
%Sets the wavefunction boundary values for zero Psi
```

```
Globals;
```

```
L=Lold;
```

Για κβαντικό κουτί μόνο μέσα στο κανάλι:

```
%left side of material 3
```

```
j=1;  
for i=i2-iqstart+2:Kxq-1  
    k=(i-1)*Kyq+j;  
    io=i+iqstart-1;  
    jo=j+jqstart-1;  
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);  
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);  
    b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);  
    b0=b1;  
    L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m3)+V(i,j);  
    L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m3);  
    L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);  
    L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m3);  
end
```

```
%right side of material 3
```

```
j=Kyq;  
for i=i2-iqstart+2:Kxq-1  
    k=(i-1)*Kyq+j;  
    io=i+iqstart-1;  
    jo=j+jqstart-1;  
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);  
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);  
    b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);  
    b1=b0;  
    L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m3)+V(i,j);  
    L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m3);  
    L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);  
    L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m3);  
end
```

%upper side of material 3

```
i=1;
for j=2:Kyq-1
    k=(i-1)*Kyq+j;
    io=i+iqstart-1;
    jo=j+jqstart-1;
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
    a1=a0;
    b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
    b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
    L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m3)+V(i,j);
    L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m3);
    L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m3);
    L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);
end
```

%down material 4

```
i=Kxq;
for j=2:Kyq-1
    k=(i-1)*Kyq+j;
    io=i+iqstart-1;
    jo=j+jqstart-1;
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
    a1=a0;
    b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
    b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
    L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m4)+V(i,j);
    L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m4);
    L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m4);
    L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m4);
end
```

%Upper Left Corner

```
i=1;
j=1;
k=(i-1)*Kyq+j;
io=i+iqstart-1;
jo=j+jqstart-1;
a1=Ax(io+1)-Ax(io);
a0=Ax(io)-Ax(io-1);
b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
b0=b1;
L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m3)+V(i,j);
L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m3);
L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);
```

%Upper Right Corner

```
i=1;
j=Kyq;
k=(i-1)*Kyq+j;
io=i+iqstart-1;
jo=j+jqstart-1;
a1=Ax(io+1)-Ax(io);
a0=Ax(io)-Ax(io-1);
b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
b1=b0;
L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m3)+V(i,j);
L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m3);
L(k,k+Kyq)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);
```

%Down Left Corner

```
i=Kxq;
j=1;
k=(i-1)*Kyq+j;
io=i+iqstart-1;
jo=j+jqstart-1;
a0=Ax(io)-Ax(io-1);
a1=a0;
b1=Ay(jo+1)-Ay(jo);
b0=b1;
L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m4)+V(i,j);
L(k,k+1)=-2/(b1*(b1+b0))*(1/m4);
L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m4);
```

%Down Right Corner

```
i=Kxq;
j=Kyq;
k=(i-1)*Kyq+j;
io=i+iqstart-1;
jo=j+jqstart-1;
a0=Ax(io)-Ax(io-1);
a1=a0;
b0=Ay(jo)-Ay(jo-1);
b1=b0;
L(k,k)=((2/(a1*a0))+2/(b1*b0))*(1/m4)+V(i,j);
L(k,k-1)=-2/(b0*(b1+b0))*(1/m4);
L(k,k-Kyq)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m4);
```


Συνάρτηση Διόρθωσης στον πίνακα L για μεταβλητή ενεργό μάζα

```
function Lnew=LmcorrNU(L)
```

```
%Sets the wavefunction correction for effective mass change dm/dx
```

```
Globals;
```

```
Lnew=L;
```

```
i=i3-i2-1;
```

```
for j=2:Kyq-1
```

```
    k=(i-1)*Kyq+j;
```

```
    io=i+iqstart-1;
```

```
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);
```

```
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
```

```
    Lnew(k,k-Kyq)=Lnew(k,k-Kyq)-((1/m3^2)*(m4-m3)/((a1+a0)^2));
```

```
    Lnew(k,k+Kyq)=Lnew(k,k+Kyq)+((1/m3^2)*(m4-m3)/((a1+a0)^2));
```

```
end
```

```
i=i3-i2;
```

```
for j=2:Kyq-1
```

```
    k=(i-1)*Kyq+j;
```

```
    io=i+iqstart-1;
```

```
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);
```

```
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
```

```
    Lnew(k,k-Kyq)=Lnew(k,k-Kyq)-((1/m4^2)*(m4-m3)/((a1+a0)^2));
```

```
    Lnew(k,k+Kyq)=Lnew(k,k+Kyq)+((1/m4^2)*(m4-m3)/((a1+a0)^2));
```

```
end
```

Συνάρτηση Υπολογισμού κλασσικού φορτίου έξω από το κβαντικό κουτί

```
function Qcl=QClassFer(Vs,Ef,Etop)
%QClassFer calculates classical charge contribution using Fermi 1/2 integral
Globals;
Qcl=zeros(Kx,Ky);
load Fc-10_60.mat;
Xfer=-10:0.1:60;
for i=1:i1-1
    for j=1:Ky
        if (j>johm1) & (j<johm2)
            Qcl(i,j)=0; %OXIDE
        else
            Ec=Vs(i,j);
            nf=(Ef(i,j)-Ec)/kT;
            if nf<=-10
                Qcl(i,j)=exp(nf);
            elseif nf<60
                k=1;
                while nf>Xfer(k)
                    k=k+1;
                end
                F=Fm(k-1)+(((Fm(k)-Fm(k-1)))/(Xfer(k)-Xfer(k-1)))*(nf-Xfer(k-1)));
                Qcl(i,j)=F;
            else
                Qcl(i,j)=FerIntc(nf);
            end
        end
    end
end

for i=i1:iqstart-1
    for j=1:Ky
        Ec=Vs(i,j);
        nf=(Ef(i,j)-Ec)/kT;
        if nf<=-10
            Qcl(i,j)=exp(nf);
        elseif nf<60
            k=1;
            while nf>Xfer(k)
                k=k+1;
            end
            F=Fm(k-1)+(((Fm(k)-Fm(k-1)))/(Xfer(k)-Xfer(k-1)))*(nf-Xfer(k-1)));
            Qcl(i,j)=F;
        else
            Qcl(i,j)=FerIntc(nf);
        end
    end
end
end
```

```

for i=iqstart:iqend
  for j=1:Ky
    if (j<jqstart)|(j>jqend)
      Ec=Vs(i,j);
      nf=(Ef(i,j)-Ec)/kT;
      if nf<-10
        Qcl(i,j)=exp(nf);
      elseif nf<=60
        k=1;
        while nf>Xfer(k)
          k=k+1;
        end
        F=Fm(k-1)+(((Fm(k)-Fm(k-1)))/(Xfer(k)-Xfer(k-1)))*(nf-Xfer(k-1)));
        Qcl(i,j)=F;
      else
        Qcl(i,j)=FerIntc(nf);
      end
    end
    if (j>=jqstart)&(j<=jqend)
      Ec=max(Etop(j),Vs(i,j));
      nf=(Ef(i,j)-Ec)/kT;
      if nf<-10
        Qcl(i,j)=exp(nf);
      elseif nf<=60
        k=1;
        while nf>Xfer(k)
          k=k+1;
        end
        F=Fm(k-1)+(((Fm(k)-Fm(k-1)))/(Xfer(k)-Xfer(k-1)))*(nf-Xfer(k-1)));
        Qcl(i,j)=F;
      else
        Qcl(i,j)=FerIntc(nf);
      end
    end
  end
end
end

```

```

for i=iqend+1:Kx
  for j=1:Ky
    Ec=Vs(i,j);
    nf=(Ef(i,j)-Ec)/kT;
    if nf<-10
      Qcl(i,j)=exp(nf);
    elseif nf<=60
      k=1;
      while nf>Xfer(k)
        k=k+1;
      end
      F=Fm(k-1)+(((Fm(k)-Fm(k-1)))/(Xfer(k)-Xfer(k-1)))*(nf-Xfer(k-1)));
      Qcl(i,j)=F;
    else
      Qcl(i,j)=FerIntc(nf);
    end
  end
end
end

```

% Transform to V/nm²

```

Qcl(1:i2-1,1:johm1)=-Qcl(1:i2-1,1:johm1)*(Nc3_5*(q/(eo*e5))*(10^-18));
% left InGaAs: area below source and left of OXIDE

```

```

Qcl(1:i1-1,johm1:johm2-1)=0;
% OXIDE

```

```

Qcl(1:i2-1,johm2:Ky)=-Qcl(1:i2-1,johm2:Ky)*(Nc3_5*(q/(eo*e5))*(10^-18));
% right InGaAs: area below drain and right of OXIDE

```

```

Qcl(i1:i2-1,johm1:johm2-1)=-Qcl(i1:i2-1,johm1:johm2-1)*(Nc3_2*(q/(eo*e2))*(10^-18));
% InAlAs cap

```

```

Qcl(i2:i3-1,:)= -Qcl(i2:i3-1,:)*(Nc3_3*(q/(eo*e3))*(10^-18));
% InGaAs channel

```

```

Qcl(i3:Kx,:)= -Qcl(i3:Kx,:)*(Nc3_4*(q/(eo*e4))*(10^-18));
% InAlAs substrate

```

Συνάρτηση Υπολογισμού Κβαντικού φορτίου μέσα στο κβαντικό κουτί

```
function [Q,S]=Qquantum(Eigf,E,Etop,Ef)
%Qquantum calculates quantum charge contribution
Globals;

Q=zeros(Kx,Ky);

%Wave=zeros(Kxq,Kyq,States);

S=1;
while (E(S)<max(Etop)) & (S<States)
    E(S);
    Psid=zeros(Kxq,Kyq);
    for i=1:Kxq
        for j=1:Kyq
            k=(i-1)*Kyq+j;
            Psid(i,j)=Eigf(k,S);
        end
    end

    Psi=Psid;

    %Normalization
    In=trapz(Ay(jqstart:jqend),trapz(Ax(iqstart:iqend),abs(Psi).^2,1));
    %In=trapz(trapz(Psi.^2))*resx*resy;

    %Psi=(1/sqrt(resx*resy))*Psi;
    Psi=(1/sqrt(In))*Psi;

    Qqm=QMCharge2Ap(Psi,E(S),Ef,Etop);

    %Wave(:,S)=Psi;

    Q=Q+Qqm;
    S=S+1;

end

Q=real(Q);
```

Συνάρτηση Υπολογισμού συγκέντρωσης ηλεκτρονίων σε μία στάθμη (Energy)

```
function Q=QMCharge2Ap(Psi,Energy,Ef,Etop);
%QMCharge calculates the quantum charge inside the well

Globals;
Xfer=-40:0.25:100;
Yfer=0:0.25:100;

load Fm140_100q8.mat;
%matrix -30<nf<100, 0<ntop<100

Q=zeros(Kx,Ky);

N1=Nc1*sqrt(m1*q*kT);
N2=Nc1*sqrt(m2*q*kT);
N3=Nc1*sqrt(m3*q*kT);
N4=Nc1*sqrt(m4*q*kT);
N5=Nc1*sqrt(m5*q*kT);

for i=iqstart:iqend
    for j=jqstart:jqend

        nf=(Ef(i,j)-Energy)/kT;
        nx=round((nf+40)*4)+1;
        nfmat(i,j)=nf;

        ntop=(Etop(j)-Energy)/kT;
        ny=round(ntop*4)+1;
        ntopmat(i,j)=ntop;

        if ntop>0
            if (nf>=100)|(nf<=-40)|(ntop<=0)|(ntop>=100)
                FI=FerIntq(nf,ntop);
                %Performance problem
                %nf
                %ntop
            else
                kf=max(nx-2,1);
                while nf>Xfer(kf)
                    kf=kf+1;
                end

                kt=max(ny-2,1);
                while ntop>Yfer(kt)
                    kt=kt+1;
                end
            end
        end
    end
end
```

```

    lx=(nf-Xfer(kf-1))/(Xfer(kf)-Xfer(kf-1));
    ly=(ntop-Yfer(kt-1))/(Yfer(kt)-Yfer(kt-1));
    FI=(1-ly)*(1-lx)*Fm40_40(kf-1,kt-1)+(1-ly)*lx*Fm40_40(kf,kt-
1)+ly*(1-lx)*Fm40_40(kf-1,kt)+ly*lx*Fm40_40(kf,kt);
    %FI=Fm40_40(nx,ny);
    end

    Q(i,j)=FI*(abs(Psi(i-ijstart+1,j-jqstart+1))^2);
    end

    end
end

Q(1:i2-1,1:johm1)=-N5*Q(1:i2-1,1:johm1)*(q/(eo*e5));
% left InGaAs: area below source and left of OXIDE

Q(1:i1-1,johm1:johm2-1)=0;
% OXIDE

Q(1:i2-1,johm2:Ky)=-N5*Q(1:i2-1,johm2:Ky)*(q/(eo*e5));
% right InGaAs:area below drain and right of OXIDE

Q(i1:i2-1,:)= -N2*Q(i1:i2-1,:)*(q/(eo*e2));
%InAlAs CAP

Q(i2:i3-1,:)= -N3*Q(i2:i3-1,:)*(q/(eo*e3));
% InGaAs channel

Q(i3:Kx,:)= -N4*Q(i3:Kx,:)*(q/(eo*e4));
% InAlAs substrate

nformat;
ntopmat;

```

Συνάρτηση υπολογισμού ολοκληρώματος Fermi +1/2
(Τρεισδιάστατη πυκνότητα κλασσικού φορτίου)

```

function In=FerIntc(nf)
%FerIntc calculates +1/2 Fermi Integral-
%3D Density of States for classical charge

Fun=inline('(x)^(1/2))./(1+exp((x-y)))','x','y');
I=quad(Fun,10^-15,10^3,10^-4,0,nf);

In=I*2/sqrt(pi);

```

Συνάρτηση υπολογισμού ολοκληρώματος Fermi -1/2 (Μονοδιάστατη πυκνότητα κβαντικού φορτίου)

```
function In=FerIntq(nf,ntop)
%FerIntq calculates -1/2 Fermi Integral-
%1D Density of States for quantum charge

Fun=inline('(x).^(-1/2))./(1+exp(x-y))','x','y');
In=quad(Fun,10^-18,ntop,10^-9,0,nf);

% It has to be multiplied with sqrt(1.6*(10^-19)*kT) for compatibility in units
```

Συνάρτηση υπολογισμού πυκνότητας ρεύματος χρησιμοποιώντας την παράγωγο Ef

```
function [Jx,Jy,Vx,Vy,Vmag,Ex,Ey,div],Ratio]= JCurrNU(V,ne,Ef,Vn);
%JCURR Calculates J(x,y) at half points using Ef
Globals;

Jx=zeros(Kx,Ky);
Jy=zeros(Kx,Ky);
Ex=zeros(Kx,Ky);
Ey=zeros(Kx,Ky);
Vx=zeros(Kx,Ky);
Vy=zeros(Kx,Ky);

[mob,mobx,moby]=Mobility(Ef,V,ne,Vn);

for i=1:Kx-1
    for j=1:Ky
        x=(V(i+1,j)-V(i,j))/kT;
        g=1/(1+exp(x/2));
        nh=(1-g)*ne(i,j)+g*ne(i+1,j);
        Jx(i,j)=q*mobx(i,j)*nh*(Ef(i+1,j)-Ef(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-9));
    end
end

for i=1:Kx
    for j=1:Ky-1
        x=(V(i,j+1)-V(i,j))/kT;
        g=1/(1+exp(x/2));
        nh=(1-g)*ne(i,j)+g*ne(i,j+1);
        Jy(i,j)=q*moby(i,j)*nh*(Ef(i,j+1)-Ef(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9));
    end
end
```



```

Jy(1:i1,js)=0;

divJ=zeros(Kx,Ky);

Ratio=zeros(Kx,Ky);

Vmag(i,j)=sqrt((Vx(i,j)^2)+(Vy(i,j)^2));

```

Συνάρτηση υπολογισμού πυκνότητας ρεύματος χρησιμοποιώντας την εξίσωση Ολίσθησης- Διάχυσης

```

function [Jx,Jy,Jxdr,Jydr,Jxdif,Jydif,divJ,Ratio] = JDDNU(V,ne,Ef,Vn);
%JDD Current Densiy using Drift-Diffusion at half points

```

```

Globals;

```

```

Jx=zeros(Kx,Ky);
Jy=zeros(Kx,Ky);
Jxdr=zeros(Kx,Ky);
Jydr=zeros(Kx,Ky);
Jxdif=zeros(Kx,Ky);
Jydif=zeros(Kx,Ky);

```

```

Ex=zeros(Kx,Ky);
Ey=zeros(Kx,Ky);
Vx=zeros(Kx,Ky);
Vy=zeros(Kx,Ky);

```

```

[mob,mobx,moby]=Mobility(Ef,V,ne,Vn);

```

```

V=V+Vn;

```

```

for i=1:Kx-1
for j=1:Ky
xi=(V(i+1,j)-V(i,j))/kT;
g=1/(1+exp(xi/2));
nhalf=g*ne(i+1,j)+(1-g)*ne(i,j);
Jxdr(i,j)=-(q*mobx(i,j)*nhalf*(V(i+1,j)-V(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-9)));
Jxdif(i,j)=(q*kT*mobx(i,j)*(ne(i+1,j)-ne(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-9)));
Vx(i,j)=mobx(i,j)*(Ef(i+1,j)-Ef(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-9));
Ex(i,j)=(V(i+1,j)-V(i,j))/((Ax(i+1)-Ax(i))*(10^-9));
end
end
Jx=Jxdr+Jxdif;

```

```

for i=1:Kx
  for j=1:Ky-1
    xj=(V(i,j+1)-V(i,j))/kT;
    g=1/(1+exp(xj/2));
    nhalf=g*ne(i,j+1)+(1-g)*ne(i,j);
    Jydr(i,j)=-(q*moby(i,j)*nhalf*(V(i,j+1)-V(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9)));
    Jydif(i,j)=(q*kT*moby(i,j)*(ne(i,j+1)-ne(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9)));
    Vy(i,j)=moby(i,j)*(Ef(i,j+1)-Ef(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9));
    Ey(i,j)=(V(i,j+1)-V(i,j))/((Ay(j+1)-Ay(j))*(10^-9));
  end
end
Jy=Jydr+Jydif;

%Cont Test
divJ=zeros(Kx,Ky);
Ratio=zeros(Kx,Ky);
for i=2:Kx-1
  for j=2:Ky-1
    a1=Ax(i+1)-Ax(i);
    a0=Ax(i)-Ax(i-1);
    b1=Ay(j+1)-Ay(j);
    b0=Ay(j)-Ay(j-1);
    Dx=((a1+a0)/2)*(10^-9);
    Dy=((b1+b0)/2)*(10^-9);
    divJ(i,j)=((Jx(i,j)-Jx(i-1,j))/Dx)+((Jy(i,j)-Jy(i,j-1))/Dy);
    %Ratio(i,j)=-((Jx(i,j)-Jx(i-1,j))/Dx)/((Jy(i,j)-Jy(i,j-1))/Dy);
  end
end
end

```

B. Υπολογισμός Ρεύματος με τη Σχέση Kenji Natori

Βασική Ρουτίνα Natori

Globals;

Global_init;

disp('Schrodinger 1D NATORI')

% Finds the maximum Vmax and the corresponding jmax along the Yaxis in the middle of the channel i=imch

Vcmax=Vband(imch,1);

jmax=1;

for j=2:Ky

 if Vband(imch,j)>Vcmax

 Vcmax=Vband(imch,j);

 jmax=j;

 end

end

% Creates a 1-Dimensional matrix-vector. Inside the area of 1D Schroedinger solution the values of potential $V(i) = Vband(i, jmax)$. Outside the selected area Vnat=0

for i=iqbs:iqbe

 Vnat(i)=Vband(i,jmax);

end

%DEC Correction/ Dec2-DEc3=0.53 =DEC(InGaAs-InAlAs)=0.7-0.17=0.53

Vnat(iqbs)=Vnat(iqbs)+0.53;

Kxq2=iqbe-iqbs+1;

%Creates a 1D Matrix only with the values inside the area of 1D Schroedinger

for i=1:Kxq2

 Vsb(i)=Vnat(i+iqbs-1);

end

Vmin=min(Vsb);

Vsbn=Vsb-Vmin;

Emax=max(Vsbn);

[Eigf,E]=NatSchro1D(Vsbn); %1D Schroedinger Solution

E=E*A*(10^18)/q; %Converting En to eV

Efnew=-Vmin;

```
Fhs=Fhalfs(E,Efnew,Emax); %Finds the  $F_{1/2}$  (nf) integral at source  $nf=(Ef^2-Ec)/kT$ ,  $Ec=Enat$ ,  $Ef=Efnew$ 
```

```
Fhd=Fhalfd(E,Efnew,Emax,Vd); %Finds the  $F_{1/2}$  (nf) integral at drain  
 $nf=(Ef^2-Ec-Vd)/kT$ 
```

```
Fdif=Fhs-Fhd;
```

```
m3=0.041;
```

```
mN=m3*me;
```

```
B=sqrt(mN);
```

```
q=1.602*(10^-19);
```

```
me=9.109*(10^-31);
```

```
kTN=0.026*1.6*(10^-19);%in Joules
```

```
hbar=1.055*(10^-34);%(Joule*sec)
```

```
Con=(sqrt(2)*q*(kTN^(3/2))*B)/((pi^2)*(hbar^2)); %The constant in front of  
the Natori current Formula
```

```
Snz=sum(Fdif); %Summation over all the eigenstates
```

```
Ilast=Con.*Snz %Final Current
```

Αρχικοποίηση Παραμέτρων

%Physical constants

```
global Con eo q me hbar A kT Nc1 Nc2 Nc3;
eo=8.854*(10^-12);
q=1.602*(10^-19);
me=9.109*(10^-31);
hbar=1.055*(10^-34);
A=(hbar^2)/(2*me);
kT=0.026;
Nc1=sqrt(2*me)/(pi*hbar);
Nc2=me/(pi*(hbar^2));
Nc3=2*(me*kT*q/(2*pi*(hbar^2)))^(3/2);
Con=((sqrt(2))*q*((kT*q)^(3/2)))/((pi^2)*(hbar^2));
```

%Material Parameters

```
global e1 e2 e3 e4 e5 eins B Fb m1 m2 m3 m4 m5 DEc1 DEc2 DEc3 DEc4 Nd4
States Nc3_1 Nc3_2 Nc3_3 Nc3_4 Nc3_5 Ncont mob1 mob2 mob3 mob4 mob5
Vsat1 Vsat2 Vsat3 Vsat4 Vsat5 Fo2 Fo3 Fo4 Fo5;
e1=10; %1: Al2O3
e2=12.42; %2: In(0.51)Al(0.49)As
e3=13.85; %3: In(0.53)Ga(0.47)As
e4=12.42; %4: In(0.51)Al(0.49)As
e5=13.85; %5: In(0.53)Ga(0.47)As
```

```
eins=7;
```

```
m1=0.084;
m2=0.076;
m3=0.041;
m4=0.076;
m5=0.041;
```

```
B=sqrt(m3);
```

```
DEc1=3.17; %AlO - InAlAs
DEc2=3.7; %AlO - InGaAs
DEc3=3.17; %AlO - InAlAs
DEc4=3.7; %AlO - InGaAs
```

```
Nd4=3*(10^24); %Doping at 4th layer
Ncont=4.5*(10^25); % Doping at ohmic contacts
Nc3_1=Nc3*(m1^(3/2));
Nc3_2=Nc3*(m2^(3/2));
Nc3_3=Nc3*(m3^(3/2));
Nc3_4=Nc3*(m4^(3/2));
Nc3_5=Nc3*(m5^(3/2));
```

```
mob1=0.3;
```

```

mob2=0.48; %InAlAs
mob3=0.95; %InGaAs for 10nmInGaAs QW (Interface InGaAs/InAlAs)
mob4=0.48; %InAlAs
mob5=0.95; %InGaAs

Vsat1=0.75*(10^5);
Vsat2=0.75*(10^5);
Vsat3=0.6*(10^5);
Vsat4=0.75*(10^5);
Vsat5=0.6*(10^5);

Fo2=4.1*(10^5);
Fo3=3.1*(10^5);
Fo4=4.1*(10^5);
Fo5=3.1*(10^5);
States=10;

%Geometry and mesh
global X1 X Y Kx Ky Kxq Kyq Kxq2 resx resy X2 X3 Xqstart Xqend Xmch Xohm
Xrec Xdstart Xdend Ygs Yge Xd Xs Yohm1 Yohm2 Ys Yd Ax Ay space;

Kx=130;
Ky=110;
X1=60; %end of layer 1 Oxide
X2=70;%end of layer 2 InAlAs
X3=80;%end of layer 3 InGaAs
Xmch=75; %middle of the channel

Xdstart=90;%start of Nd++
Xdend=93;%end of Nd++

Xrec=55.4; % estimation of the point that the oxide starts, thickness of Al2O3 +
Xrec = X1

Xqstart=70;
Xqend=80;

Gap=100; %Gap between Ohmic contacts and gate
Lg=30; %Gate Length
Yohm1=50; %end of Ohmic contact 1
space=0;
Ys=Yohm1-space; %end of source, how left is the start of the source
Ygs=Yohm1+Gap; %start of gate
Yge=Ygs+Lg; %end of gate
Yohm2=Yge+Gap; %start of ohmic contact 2
Yd=Yohm2+space; %start of drain
Y=330; %end of device

```

```
Xd=0;
Xs=0;
X=130;      %end of device
Xohm=80;
```

```
resx=X/(Kx-1);
resy=Y/(Ky-1);
```

```
Ax=(0:resx:X);
Ay=(0:resy:Y);
```

```
global i1 i2 i3 iqbs iqbe imch idstart idend is id iohm js jd jgs jge johm1 johm2
iqstart iqend jqstart jqend irec xo Co Vt Ro mobno;
```

```
i1=Findij(X1,Ax);
i2=Findij(X2,Ax);
i3=Findij(X3,Ax);
imch=Findij(Xmch,Ax);
idstart=Findij(Xdstart,Ax);
idend=Findij(Xdend,Ax);
iohm=Findij(Xohm,Ax);
iqstart=Findij(Xqstart,Ax);
iqend=Findij(Xqend,Ax);
is=Findij(Xs,Ax);
id=Findij(Xd,Ax);
```

```
iqbs=Findij(70,Ax);
iqbe=Findij(80,Ax);
```

```
Kxq2=iqbe-iqbs+1;
```

```
irec=Findij(Xrec,Ax);
if irec<=0
    irec=1;
end
```

```
jgs=Findij(Ygs,Ay);
jge=Findij(Yge,Ay);
```

```
johm1=Findij(Yohm1,Ay);
johm2=Findij(Yohm2,Ay);
```

```
js=Findij(Ys,Ay);
jd=Findij(Yd,Ay);
```

```
Kxq=iqend-iqstart+1;
```

```
jqstart=Findij(Yohm1-5,Ay);
jqend=Findij(Yohm2+5,Ay);
```

```
Kyq=jqend-jqstart+1;
```

```
%Scaling
```

```
xo=30*(10^-9); %956*(10^-9); %
```

```
Co=10^23; %1.84*(10^12); %
```

```
mobno=(10^-4)/kT;
```

```
Vt=kT;
```

```
Ro=10^18;
```

Μονοδιάστατη Εξίσωση Schroedinger

```
function [V,E]=NatSchro1D(Vo)
```

```
%Shrodinger - Direct Solution
```

```
%for direct solver of the system Lu=b
```

```
Globals;
```

```
Vext=(Vo*q*(10^-18))/A;
```

```
for i=1:Kxq2
```

```
%Vnew(i,j)=Vext(i+iqstart-1,j+jqstart-1);
```

```
    Vnew(i)=Vext(i);
```

```
end
```

```
L=NatLmatrix_SNU(Vnew);
```

```
%Boundary Conditions
```

```
L=NatDirSNU(L,Vnew,0);
```

```
%eff mass correction
```

```
L=NatLmcorrNU(L);
```

```
States=25;
```

```
flag=0;
```

```
opts.disp=0;
```

```
[V,Ed]=eigs(L,States,'SR',opts);
```

```
flag=1;
```

```
for i=1:States
```

```
    E(i)=Ed(i,i);
```

```
end
```

```
E=real(E);
```

```
[E,Index]=sort(E);
```

```
V=V(:,Index);
```


Σχηματισμός Πίνακα L για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Schroedinger - εσωτερικά σημεία της περιοχής επίλυσης

B.1 Natori σε ένα μόνο στρώμα – το κανάλι

```
function L=NatLmatrix_SNU(V)
%creates the L matrix for Schrodinger equation
Globals;
n=Kxq2;
L=sparse(n,n);

for i=i2-iqbs+2:i3-iqbs-1
    io=i+iqbs-1;
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
    L(i,i)=2/(a1*a0)*(1/m3)+V(i);
    L(i,i+1)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);
    L(i,i-1)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m3);
end
```

Σχηματισμός Πίνακα L για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Schroedinger – Οριακά σημεία της περιοχής επίλυσης

B.1 Natori σε ένα μόνο στρώμα – το κανάλι

```
function L=NatDirSNU(Lold,V,C)
%Sets the wavefunction boundary values for zero Psi

Globals;
L=Lold;

a1=Ax(3)-Ax(2);
a0=Ax(2)-Ax(1);

aN=Ax(Kxq2)-Ax(Kxq2-1);
aM=Ax(Kxq2-1)-Ax(Kxq2-2);

L(1,1)=2/(a1*a0)*(1/m3)+V(1);
L(1,2)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);

L(Kxq2,Kxq2)=2/(aN*aM)*(1/m3)+V(Kxq2);
L(Kxq2,Kxq2-1)=-2/(aM*(aM+aN))*(1/m3);
```

Σχηματισμός Πίνακα L για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Schroedinger – Σημεία αλλαγής υλικού

B.1 Natori σε ένα μόνο στρώμα – το κανάλι

```
function Lnew=NatLmcorrNU(L)
```

```
%Sets the wavefunction correction for effective mass change dm/dx
```

```
Globals;
```

```
Lnew=L; %L matrix does not change – there is no material change in only one layer
```

Συνάρτηση Fermi Dirac $F_{\frac{1}{2}}(nf)$ στην πηγή

```
function Fhs=Fhalfs(Enat,Ef2,Emax)
```

```
Globals;
```

```
States=25;
```

```
Fhs=zeros(1,States);
```

```
load Fc-10_60.mat;
```

```
Xfer=-10:0.1:60;
```

```
Enat
```

```
for i=1:States
```

```
  if ((Enat(i)>0.001) & (Enat(i)<Emax))
```

```
    Ec=Enat(i)
```

```
    nf=(Ef2-Ec)/kT
```

```
    if nf<=-10
```

```
      Fhs(i)=exp(nf);
```

```
    elseif nf<60
```

```
      k=1;
```

```
      while nf>Xfer(k)
```

```
        k=k+1;
```

```
      end
```

```
      F=Fm(k-1)+(((Fm(k)-Fm(k-1))/(Xfer(k)-Xfer(k-1)))*(nf-Xfer(k-1)));
```

```
      Fhs(i)=F;
```

```
    else
```

```
      Fhs(i)=FerIntc(nf);
```

```
    end
```

```
  else
```

```
    Fhs(i)=0;
```

```
  end
```

```
end
```

Συνάρτηση Fermi Dirac $F_{\frac{1}{2}}(nf)$ στον απαγωγό

```
function Fhd=Fhalfd(Enat,Ef2,Emax,Vd)

Globals;
States=25;
Fhd=zeros(1,States);

load Fc-10_60.mat;

Xfer=-10:0.1:60;

for i=1:States
    if ((Enat(i)>0.001) & (Enat(i)<Emax))
        Ec=Enat(i);
        nf=(Ef2-Ec-Vd)/kT;
        if nf<=-10
            Fhd(i)=exp(nf);
        elseif nf<60
            k=1;
            while nf>Xfer(k)
                k=k+1;
            end
            F=Fm(k-1)+(((Fm(k)-Fm(k-1)))/(Xfer(k)-Xfer(k-1)))*(nf-Xfer(k-1)));
            Fhd(i)=F;
        else
            Fhd(i)=FerIntc(nf);
        end
    else
        Fhd(i)=0;
    end
end
```

Σχηματισμός Πίνακα L για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Schroedinger - εσωτερικά σημεία της περιοχής επίλυσης

B.2 Natori σε πολλά στρώματα

```
function L=NatLmatrix_SNU(V)  
%creates the L matrix for Schrodinger equation
```

```
Globals;  
n=Kxq2;  
L=sparse(n,n);  
  
for i=i2-iqbs+2:i3-iqbs-1  
    io=i+iqbs-1;  
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);  
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);  
    L(i,i)=2/(a1*a0)*(1/m3)+V(i);  
    L(i,i+1)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);  
    L(i,i-1)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m3);  
end
```

```
for i=i3-iqbs+2:Kxq2-1  
    io=i+iqbs-1;  
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);  
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);  
    L(i,i)=2/(a1*a0)*(1/m4)+V(i);  
    L(i,i+1)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m4);  
    L(i,i-1)=-2/(a0*(a1+a0))*(1/m4);  
end
```

Σχηματισμός Πίνακα L για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Schroedinger - Οριακά σημεία της περιοχής επίλυσης

B.2 Natori σε πολλά στρώματα

```
function L=NatDirSNU(Lold,V,C)  
%Sets the wavefunction boundary values for zero Psi
```

```
Globals;  
L=Lold;  
a1=Ax(3)-Ax(2);  
a0=Ax(2)-Ax(1);  
aN=Ax(Kxq2)-Ax(Kxq2-1);  
aM=Ax(Kxq2-1)-Ax(Kxq2-2);  
L(1,1)=2/(a1*a0)*(1/m3)+V(1);  
L(1,2)=-2/(a1*(a1+a0))*(1/m3);  
  
L(Kxq2,Kxq2)=2/(aN*aM)*(1/m4)+V(Kxq2);  
L(Kxq2,Kxq2-1)=-2/(aM*(aM+aN))*(1/m4);
```

Σχηματισμός Πίνακα L για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Schroedinger – Σημεία αλλαγής υλικού

B.2 Natori σε πολλά στρώματα

```
function Lnew=NatLmcorrNU(L)
%Sets the wavefunction correction for effective mass change dm/dx
Globals;
Lnew=L;

ihet2=i3-iqbs;

for i=ihet2-1;
    io=i+iqbs-1;
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
    Lnew(ihet2-1,ihet2-2)=Lnew(ihet2-1,ihet2-2)-((1/m3^2)*(m4-
m3)/((a1+a0)^2));
    Lnew(ihet2-1,ihet2)=Lnew(ihet2-1,ihet2)+((1/m3^2)*(m4-
m3)/((a1+a0)^2));
end

for i=ihet2;
    io=i+iqbs-1;
    a1=Ax(io+1)-Ax(io);
    a0=Ax(io)-Ax(io-1);
    Lnew(ihet2,ihet2-1)=Lnew(ihet2,ihet2-1)-((1/m4^2)*(m4-
m3)/((a1+a0)^2));
    Lnew(ihet2,ihet2+1)=Lnew(ihet2,ihet2+1)+((1/m4^2)*(m4-
m3)/((a1+a0)^2));
end
```


Αναφορές

- [1] Jesús A. del Alamo, Nanometre-scale electronics with III–V compound semiconductors, *Nature*, vol. 479, p.p. 317-323, 17 November 2011.
- [2] *Semiconductor Device Physics and Design*, Umesh K. Mishra and Jasprit Singh, Springer, p.p 413, 435, 2008.
- [3] *Semiconductor Devices, Physics and Technology*, 2nd Edition, S.M.Sze, p.p 18, 29, 30, 170, 172, 244, 2002, by John Wiley & Sons.
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Moore%27s_law
- [5] <http://unregistered.gr/2015/04/featured/50>
- [6] *Understanding Semiconductor Devices*, Sima Dimitrijevic, Oxford University Press, 2000.
- [7] https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_well
- [8] Sonnet, A. M. *et al.* On the calculation of effective electric field in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ surface channel metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors. *Appl. Phys. Lett.* **98**, 193501 (2011).
- [9] Sonnet, A. M. *et al.* Remote phonon and surface roughness limited universal electron mobility of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ surface channel MOSFETs. *Microelectron. Eng.* **88**, 1083–1086 (2011).
- [10] U. Singiseti, M.A. Wistey, G.J. Burek, A.K. Baraskar, B.J. Thibeault, A.C. Gossard, M.J.W. Rodwell, B. Shin, E.J. Kim, P.C. McIntyre, B. Yu, Y. Yuan, D. Wang, Y. Taur, P. Asbeck, Y.-J. Lee, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ Channel MOSFETs With Self-Aligned InAs Source/Drain Formed by MEE Regrowth, *IEEE Electron Device Lett.* 30 (11) (2009) 1128–1130.

- [11] X. Zhou, Q. Li, C.W. Tang, K.M. Lau, 30nm Enhancement-mode In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSFETs on Si Substrates Grown by MOCVD Exhibiting High Transconductance and Low On-resistance, *IEDM12* (2012) 773–776.
- [12] Q. Li, X. Zhou, C.W. Tang, K.M. Lau, Material and Device Characteristics of Metamorphic In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSHEMTs Grown on GaAs and Si Substrates by MOCVD, *IEEE Trans. Electron Devices*, 60 (12) (December 2013) 4112–4118.
- [13] Doyle, B. S. *et al.* High performance fully-depleted tri-gate CMOS transistors. *IEEE Electron Device Lett.* 24, 263–265 (2003).
- [14] Wu, Y. Q., Xu, M., Wang, R. S., Koybasi, O. & Ye, P. D. High performance deep-submicron inversion-mode InGaAs MOSFETs with maximum G_m exceeding 1.1 mS/ μm : new HBr pretreatment and channel engineering. *IEEE Int. Electron Devices Meet.* 323–326 (IEEE, 2009).
- [15] M. Radosavljevic, G. Dewey, J. M. Fastenau, J. Kavalieros, R. Kotlyar, B. Chu-Kung, W. K. Liu, D. Lubyshev, M. Metz, K. Millard, N. Mukherjee, L. Pan, R. Pillarisetty, W. Rachmady, U. Shah, and Robert Chau. Non-planar, multi-gate InGaAs quantum well field effect transistors with high- κ gate dielectric and ultra-scaled gate-to-drain/gate-to-source separation for low power logic applications. *IEEE Int. Electron Devices Meet.* 126–129 (IEEE, 2010).
- [16] <https://www.quora.com/What-are-FinFETs-and-will-they-ever-be-able-to-replace-MOSFETS>
- [17] Hashemi, P., Gomez, L., Canonico, M. & Hoyt, J. L. Electron transport in gate-all-around uniaxial tensile strained-Si nanowire n-MOSFETs. *IEEE Int. Electron Devices Meet.* 1–14 (IEEE, 2008).
- [18] Suk, S. D. *et al.* High performance 5nm radius twin silicon nanowire MOSFET (TSNWFET): fabrication on bulk Si wafer, characteristics, and reliability. *IEEE Int. Electron Devices Meet.* 717–720 (IEEE, 2005).

- [19] Do, Q. T., Blekker, K., Regolin, I., Prost, W. & Tegude, F. J. Single n-InAs nanowire MIS-field-effect transistor: experimental and simulation results. *IEEE Int. Indium Phosphide Relat. Mater.* 392–395 (IEEE, 2007).
- [20] Egard, M. *et al.* Vertical InAs nanowire wrap gate transistors with $f_t > 7$ GHz and $f_{max} > 20$ GHz. *Nano Lett.* **10**, 809–812 (2010).
- [21] M. Radosavljevic, B. Chu-Kung, S. Corcoran, G. Dewey, M. K. Hudait, J. M. Fastenau, J. Kavalieros, W. K. Liu, D. Lubyshev, M. Metz, K. Millard, N. Mukherjee, W. Rachmady, U. Shah, and Robert Chau, Advanced High-K Gate Dielectric for High-Performance Short-Channel In_{0.7}Ga_{0.3}As Quantum Well Field Effect Transistors on Silicon Substrate for Low Power Logic Applications, Intel Corporation, IEDM 09.
- [22] Semiconductor Physics and Devices Basic Principles, Donald A. Neamen, Third Edition, University of New Mexico, Boston, McGraw-Hill, 2003, p.p 96.
- [23] The Physics of Semiconductors An Introduction Including Nanophysics and Applications, Marius Grundmann, Second Edition, Springer, 2010, p.p162.
- [24] [https://en.wikipedia.org/wiki/Effective_mass_\(solid-state_physics\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Effective_mass_(solid-state_physics))
- [25] Introduction to Nanoelectronics, Science, Nanotechnology, Engineering, and Applications, V. V. Mitin, V. A. Kochelap, M.A. Stroscio, Cambridge University Press, New York, 2008, p.p. 66,181.
- [26] Καταστάσεις Ηλεκτρονίων σε Ημιαγώγιμους Κρυστάλλους, Σημειώσεις Ι.Π.Ξανθάκης.
- [27] John.H.Davies, The physics of low dimensional Semiconductors, Cambridge University Press, New York, 1998, p.p.26.
- [28] Quantum Heterostructures, Microelectronics and Optoelectronics, V.V.Mitin, V. A. Kochelap and M.A. Stroscio, Cambridge University Press, Cambridge, 1999, p.p.55-60.

- [29] Kenji Natori, Ballistic metal-oxide-semiconductor field effect transistor, *J. Appl. Phys.* 76 (8) (15 October 1994) 4879-4890.
- [30] Y. C. Wu, E. Y. Chang, Y. C. Lin, C. C. Kei, M. K. Hudait, M. Radosavljevic, Y. Y. Wong, C. T. Chang, J. C. Huang, and S. H. Tang, "Study of the inversion behaviors of Al₂O₃ / In_xGa_{1-x}As metal oxide semiconductor capacitors with different In contents," *Solid State Electronics*, vol. 54, issue 1, pp. 37-41, 2010..
- [31] H.-C. Lin, W.-E. Wang, G. Brammertz, M. Meuris, M. Heyns, "Electrical study of sulfur passivated In_{0.53}Ga_{0.47}As MOS capacitor and transistor with ALD Al₂O₃ as gate insulator", *Microelectron. Eng.* 86(2009) 1554–1557.
- [32] U. Singiseti, M.A. Wistey, G.J. Burek, A.K. Baraskar, B.J. Thibeault, A.C. Gossard, M.J.W. Rodwell, B. Shin, E.J. Kim, P.C. McIntyre, B. Yu, Y. Yuan, D. Wang, Y. Taur, P. Asbeck, Y.-J. Lee, In_{0.53}Ga_{0.47}As Channel MOSFETs With Self-Aligned InAs Source/Drain Formed by MEE Regrowth, *IEEE Electron Device Lett.* 30 (11) (2009) 1128–1130.
- [33] A. Majumdar, Y. Sun, C.-W. Cheng, Y.-H. Kim, U. Rana, R.M. Martin, R.L. Bruce, K.-T. Shiu, Z. Yu, D.B. Farmer, M. Hopstaken, E.A. Joseph, J.P. de Souza, M.M. Frank, S.-L. Cheng, M. Kobayashi, E.A. Duch, D.K. Sadana, D.-G. Park, E. Leobandung, "CMOS-Compatible Self-Aligned In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSFETs with gate lengths down to 30 nm", *IEEE Electron Device Lett.* 61 (10) (October 2014) 3399–3404.
- [34] M. Egard, L. Ohlsson, M. Ärlelid, K.-M. Persson, B.M. Borg, F. Lenrick, R. Wallenberg, E. Lind, L.-E. Wernersson, "High-Frequency Performance of Self-Aligned Gate-Last Surface Channel In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSFET" *IEEE Electron Device Lett.* 33 (3) (March 2012) 369–371.
- [35] M. Yokoyama, R. Iida, S. Kim, N. Taoka, Y. Urabe, H. Takagi, T. Yasuda, H. Yamada, N. Fukuhara, M. Hata, M. Sugiyama, Y. Nakano, M. Takenaka, S. Takagi, Sub-10-nm Extremely Thin Body InGaAs-on-Insulator MOSFETs on Si Wafers With

Ultrathin Al₂O₃ Buried Oxide Layers, *IEEE Electron Device Lett.* 32 (9) (September 2011) 1218–1220.

[36] Q. Li, X. Zhou, C.W. Tang, K.M. Lau, “30nm enhancement-mode In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSFETs on Si substrates grown by MOCVD exhibiting high transconductance and low on-resistance IEEE Trans”. *Electron Devices*, 60 (12) (December 2013) 4112–4118; X. Zhou, Q. Li, C.W. Tang, K.M. Lau, IEDM12 (2012) 773–776.

[37] C.-Y. Huang, S. Lee, D. Cohen-Elias, J.J.M. Law, A.D. Carter, V. Chobpattana, S. Stemmer, A.C. Gossard, M.J.W. Rodwell, “Reduction of leakage current in In_{0.53}Ga_{0.47}As channel metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors using AlAs_{0.56}Sb_{0.44} confinement layers”, *Appl. Phys. Lett.* 103 (203502) (Nov. 2013).

[38] S. Lee, C.-Y. Huang, D. Cohen-Elias, J.J.M. Law, V. Chobpattana, S. Krämer, B.J. Thibeault, W. Mitchell, S. Stemmer, A.C. Gossard, M.J.W. Rodwell, “High performance raised source/drain InAs/In_{0.53}Ga_{0.47}As channel metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors with reduced leakage using a vertical spacer”, *Appl. Phys. Lett.* 103 (233503) (2013).

[39] J.-H. Tsai, Y.-H. Lee, N.-F. Dale, W.-S. Lour, “InGaP/GaAs camel-like gate field-effect transistor with InGaAs pseudomorphic doped-channel layer” *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 48 (20303) (2009).

[40] T. Kanazawa, K. Wakabayashi, H. Saito, R. Terao, S. Ikeda, Y. Miyamoto, K. Furuya, “Submicron InP/InGaAs Composite-Channel Metal–Oxide–Semiconductor Field-Effect Transistor with Selectively Regrown n⁺-Source”, *Appl. Phys. Express* 3 (094201) (2010).

[41] S. Oktyabrsky, V. Tokranov, S. Koveshnikov, M. Yakimov, R. Kambhampati, H. Bakhru, R. Moore, W. Tsai, “Interface properties of MBE-grown MOS structures with InGaAs/InAlAs buried channel and in-situ high-k oxide”, *J. Cryst. Growth* 311 (2009) 1950–1953.

- [42] J. Lin, T.-W. Kim, D.A. Antoniadis, J.A. del Alamo, “A Self-Aligned InGaAs Quantum-Well Metal–Oxide–Semiconductor Field-Effect Transistor Fabricated through a Lift-Off-Free Front-End Process”, *Appl. Phys. Express* 5 (2012)064002.
- [43] N. Kharche, G. Klimeck, D.-H. Kim, J.A. del Alamo, M. Luisier, Multiscale Metrology and Optimization of Ultra-Scaled InAs Quantum Well FETs, *IEEE Trans. Electron Devices* 58 (7) (July 2011).
- [44] V. Massimo, B.F. Fischetti, W.G. Vandenberghe, *IEEE Trans. Electron Devices* 60 (11) (November 2013).
- [45] E. Hwang, S. Mookerjee, M.K. Hudait, S. Datta, “Investigation of scalability of In_{0.7}Ga_{0.3}As quantum well field effect transistor (QWFET) architecture for logic applications”, *Solid State Electron.* 62 (2011) 82–89.
- [46] A. Pirovano, A.L. Lacaita, A.S. Spinelli, “Two-dimensional quantum effects in nanoscale MOSFETs”, *IEEE Trans. Electron Devices* 40 (1) (2002).
- [47] A.S. Spinelli, A. Benvenuti, A. Pacelli, “Self-consistent 2-D model for quantum effects in n-MOS transistors”, *IEEE Trans. Electron Devices* 45 (6) (1998).
- [48] D. Delagebaudief, N.T.N.T. Linh, “Charge Control of the heterojunction Two Dimensional Electron Gas for MESFET Application”, *IEEE Trans. Electron Devices* 28 (1981) 7.
- [49] G. Krokidis, J.P. Xanthakis, N.K. Uzunoglu, “A fully 2-dimensional, quantum mechanical calculation of short-channel and drain induced barrier lowering effects in HEMTs”, *Solid State Electron.* 52 (2008) 625–631 (77).
- [50] I. Tsopelas, A. Gili, J.P. Xanthakis, “Threshold voltage and sub-threshold slope variation with gate-length in Al₂O₃/InAlAs/InGaAs Quantum Well (QW) FET's”, *Key Eng. Mater.* 495 (2012) 112–115.

- [51] M.S. Lundstrom, D.A. Antoniadis, “Compact Models and the Physics of Nanoscale FETs”, *IEEE Trans. Electron Devices* 61 (2) (Feb 2014).
- [52] R. Kotlyar, R. Rios, E. Cory, T.D. Linton, M. Armstrong, K. Kuhn, “Distributive Quasi-Ballistic Drift Diffusion Model Including Effects of Stress and High Driving Field”, *IEEE Trans. Electron Devices* 62 (3) (March 2015) 743–750.
- [53] V. Palankovski, R. Quay, “Analysis and Simulation of Heterostructure Devices”, Chapter 3, Springer, Wien/New York, 2004.
- [54] J. Robertson, B. Falabretti, “Band offsets of high K gate oxides on III-V semiconductors”, *J. Appl. Phys.* 100 (2006) 014111.
- [55] A. Gili, S. Sarras, J.P. Xanthakis, “Poisson-Schroedinger-Continuity two-dimensional analysis of both short (ballistic) and long (drift-diffusion) III–V FETs”, *Microelectronic Engineering*, 159, (2016) 221–225.
- [56] Hussain S, Cole EAB, Snowden CM, “Hot-electron numerical modelling of short gate length pHEMTs applied to novel field plate structures”, *Int. J. Numerical Modelling*, 16 (1): 15-28 JAN-FEB 2003
- [57] Quantum Transport Atom to Transistor, S. Datta, CUP 2005.
- [58] Mark Lundstrom, “Elementary Scattering Theory Of The Si MOSFET”, *IEEE Electron Device Letters*, 18, (7) (July 1997) 361-363.
- [59] Mark Lundstrom and Zhibin Ren, «Essential physics of carrier transport in nanoscale MOSFETs” *IEEE Trans. Electron Devices*, 49, (1) (January 2002) 133-141.
- [60] Kenji Natori, “Ballistic/quasi-ballistic transport in nanoscale transistor”, *Applied Surface Science* 254 (2008) 6194-6198.

[61] Saeroonter Oh and H.-S. Philip Wong, “A Physics-Based Compact Model of III–V FETs for Digital Logic Applications: Current–Voltage and Capacitance–Voltage Characteristics”, *IEEE Trans. Electron Devices* 56, (12) (December 2009) 2917-2924.

[63] https://www.researchgate.net/figure/284186510_fig4_Fig-4-Examples-of-2D-grids-used-for-wave-propagation-simulations-a-Chebyshev-grid

[64] M. Egard, L. Ohlsson, B. M. Borg, F. Lenrick, R. Wallenberg, L.-E. Wernersson, and E. Lind, “High transconductance self-aligned gate-last surface channel In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSFET,” in *IEDM Tech. Dig.*, Dec. 2011, pp. 13.2.1–13.2.4, doi: 10.1109/IEDM.2011.6131544.

[65] M. V. Fischetti, T. P. O’Regan, N. Sudarshan, C. Sachs, S. Jin, J. Kim, *et al.*, “Theoretical study of some physical aspects of electronic transport in n-MOSFETs at the 10-nm gate-length,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 54, no. 9, pp. 2116–2136, Sep. 2007.

[66] M. V. Fischetti, L. Wang, B. Yu, C. Sachs, P. M. Asbeck, Y. Taur, *et al.*, “Simulation of electron transport in high-mobility MOSFETs: Density of states bottleneck and source starvation,” in *Proc. IEEE IEDM*, Dec. 2007, pp. 109–112.

[67] M. V. Fischetti, S. Jin, T.-W. Tang, P. Asbeck, Y. Taur, S. E. Laux, *et al.*, “Scaling MOSFETs to 10 nm: Coulomb effects, source starvation, and virtual source model,” *J. Comput. Electron.*, vol. 8, no. 2, pp. 60–77, 2009.

[68] Eric A. B. Cole, Tobias Boettcher and Christopher M. Snowden, “Two-dimensional Modelling of HEMTs Using Multigrids with Quantum Correction”, *VLSI Design* Volume 8 (1998), Issue 1-4, Pages 29-34

[69] E.A.B. Cole and C.M. Snowden, “The Mathematical and Computer Modelling of Microwave Semiconductor Devices,” *Mathematical and Computer Modelling*, 31(2000), 15-34.

- [70] Z Fran et al “Finite Boxes – a generalization of the finite-difference method suitable for semiconductor device simulation”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 30, pp. 1073-1082, 1983.
- [71] M. Reiser, “Large Signal numerical simulation in semiconductor device modelling”, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, pp. 17-38, 1972.
- [72] MS. Mock, “Time Discretization of a non-linear initial value problem”, *J. Comp. Phys.*, 1976 (21), pp. 20-37.
- [73] A. Taflove and SC. Hagness “COMPUTATIONAL ELECTRODYNAMICS, The Finite-Difference Time-Domain Method”, 2000 Artech House.
- [74] FETMOSS: a software tool for 2D simulation of double-gate MOSFET Abdolkader TM, Farouk WF, Omar OA, Hassan MFM, *INTERNATIONAL JOURNAL OF NUMERICAL MODELLING-ELECTRONIC NETWORKS DEVICES AND FIELDS*, 19 (4): 301-314 JUL-AUG 2006.
- [75] Efficient three-dimensional parallel simulations of PHEMTs, Garcia-Loureiro AJ, Kalna K, Asenov A, *International Journal of Numerical Modelling-Electronic Networks Devices and Fields*, 18 (5): 327-340 SEP-OCT 2005
- [76] M. Lundstrom and Z. Ren, “Essential physics of carrier transport in nanoscale MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, no. 1, pp. 133–141, Jan. 2002.
- [77] L. Wei, O. Mysore, and D. A. Antoniadis, “Virtual-source based selfconsistent current and charge FET models: From ballistic to drift-diffusion velocity-saturation operation,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 59, no. 5, pp. 1263–1271, May 2012.
- [78] A. Khakifirooz, O. M. Nayfeh, and D. A. Antoniadis, “A simple semiempirical short-channel MOSFET current–voltage model continuous across all regions of operation and employing only physical parameters,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 56, no. 8, pp. 1674–1680, Aug. 2009.

- [79] P. Palestri, D. Esseni, S. Eminent, C. Fiegna, E. Sangiorgi, and L. Selmi, "Understanding quasi-ballistic transport in nano-MOSFETs: Part I—Scattering in the channel and in the drain," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 52, no. 12, pp. 2727–2735, Dec. 2005.
- [80] D. H. Kim, J. A. del Alamo, D. A. Antoniadis, and B. Brar, "Extraction of virtual-source injection velocity in sub-100 nm III–V HFETs," in *Proc. IEEE IEDM*, Dec. 2009, pp. 861–864.
- [81] A. Rahman, J. Guo, S. Datta, and M. Lundstrom, "Theory of ballistic nanotransistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 50, no. 9, pp. 1853–1864, Sep. 2003.
- [82] M. Lundstrom and J. Guo, *Nanoscale Transistors: Physics, Modeling and Simulation*. New York, NY, USA: Springer-Verlag, 2006.
- [83] M. S. Shur, "Low ballistic mobility in submicron HEMTs," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 23, no. 9, pp. 511–513, Sep. 2002.
- [84] A. Majumdar and D. A. Antoniadis, "Analysis of carrier transport in short-channel MOSFETs," submitted for publication, 2013.
- [85] S. Datta, G. Dewey, J. M. Fastenau, M. K. Hudait, D. Loubychev, W. K. Liu, M. Radosavljevic, W. Rachmady, and R. Chau, "Ultrahighspeed 0.5 V supply voltage In_{0.7}Ga_{0.3}As quantum-well transistors on silicon substrate," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 28, no. 8, pp. 685–687, Aug. 2007.
- [86] D.-H. Kim, J. A. del Alamo, J. H. Lee, and K. S. Seo, "Performance evaluation of 50 nm In_{0.7}Ga_{0.3}As HEMTs for beyond-CMOS logic applications," in *IEDM Tech. Dig.*, 2005, pp. 767–770.
- [87] D.-H. Kim and J. A. del Alamo, "Scaling behavior of In_{0.7}Ga_{0.3}As HEMTs for logic," in *IEDM Tech. Dig.*, 2006, pp. 837–840.

- [88] M. S. Lundstrom, "On the mobility versus drain current relation for a nanoscale MOSFET," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 22, no. 6, pp. 293–295, Jun. 2001.
- [89] F. Stern, "Self-consistent results for n-type Si inversion layers," *Phys. Rev.B, Condens. Matter*, vol. 5, no. 12, pp. 4891–4899, Jun. 1972.
- [90] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots*, 2nd ed. New York: Wiley, 2005.
- [91] D. E. Root, M. Iwamoto, and J. Wood, "Device modeling for III–V semiconductors—An overview," in *Proc. IEEE CSIC Dig.*, 2004, pp. 279–282
- [92] K. Suzuki, Y. Tosaka, and T. Sugii, "Analytical threshold voltage model for short channel double-gate SOI MOSFETs," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 43, no. 7, pp. 1166–1168, Jul. 1996.
- [93] D. Frank, Y. Taur, and H.-S. P. Wong, "Generalized scale length for two dimensional effects in MOSFETs," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 19, no. 10, pp. 385–387, Oct. 1998.
- [94] S. D. Kim, C.-M. Park, and J. C. S. Woo, "Advanced model and analysis of series resistance for CMOS scaling into nanometer regime—Part I: Theoretical derivation," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, no. 3, pp. 457–466, Mar. 2002.
- [95] J. A. del Alamo, "Nanometer-scale electronics with III-V compound semiconductors," *Nature*, vol. 479, no. 7373, pp. 317–323, Nov. 2011.
- [96] X. Zhou, Q. Li, C. W. Tang and K. M. Lau "30nm inverted In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSHEMTs on Si substrate grown by MOCVD with regrown source/drain," *IEEE Electron Device Lett.*
- [97] S. J. Bentley et al., "Electron mobility in surface- and buried-channel flatband In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSFETs with ALD Al₂O₃ gate dielectric," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 32, no. 4, pp. 494–496, Apr. 2011.

[98] C. Jeong, D. A. Antoniadis, and M. Lundstrom, “On backscattering and mobility in nanoscale silicon MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 56, no. 11, pp. 2762–2769, Nov. 2009.

[99] U. Singiseti, M. A. Wistey, G. J. Burek, A. K. Baraskar, J. Cagnon, B. Thibeault, A. C. Gossard, S. Stemmer, M. Rodwell, E. Kim, B. Shin, P. C. McIntyre, and Y. J. Lee, “Enhancement mode In_{0.53}Ga_{0.47}As MOSFET with self-aligned epitaxial source/drain regrowth,” in *Proc. 21st Indium Phosphide Relat. Mater. Conf.*, May 2009, pp. 120–123.

[100] R. J. W. Hill, D. A. J. Moran, X. Li, H. Zhou, D. McIntyre, S. Thoms, A. Asenov, P. Zurcher, K. Rajagopalan, J. Abrokwah, R. Droopad, M. Passlack, and I. G. Thayne, “Enhancement-mode GaAs MOSFETs with an In_{0.3}Ga_{0.7}As channel, a mobility of over 5000 cm²/V · s, and transconductance of over 475 μS/μm,” *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 28, no. 12, pp. 1080–1082, Dec. 2007

[101] Διδακτορική Διατριβή, «Κβαντική προσομοίωση (στατική και δυναμική) ημιαγωγικών ετεροεπαφών: Εφαρμογή στις ηλεκτρονικές διατάξεις HEMT/MODFET», Γρηγόριος Α. Κροκίδης, Απρίλιος 2007.

[102] J. Lin, T.-W. Kim, D. A. Antoniadis, and J. A. del Alamo, “A selfaligned InGaAs quantum-well metal–oxide–semiconductor field-effect transistor fabricated through a lift-off-free front-end process,” *Appl. Phys. Express*, vol.5, no.6, pp. 064002-1-064002-3, May. 2011.

[103] D.-H. Kim, J. A. del Alamo, D. A. Antoniadis, J. Li, J.-M. Kuo, P. Pinsukanjana, Y.-C. Kao, P. Chen, A. Papavasiliou, C. King, E. Regan, M. Urteaga, B. Brar, and T.-W. Kim, “L_g=60nm recessed In_{0.7}Ga_{0.3}As metal-oxide-semiconductor field-effect transistors with Al₂O₃ insulator”, *Applied Physics Letters* 101, 223507 (2012);

[104] T. Suzukia,*, H. Onob, S. Taniguchib, “High-temperature electron transport in metamorphic InGaAs/InAlAs Heterostructures”, *Science and Technology of Advanced Materials* 6 (2005) 400–405

[105] Jianqiang Lin, Xin Zhao, Tao Yu, Dimitri A. Antoniadis, and Jesús A. del Alamo, A New Self-aligned Quantum-Well MOSFET Architecture Fabricated by a Scalable Tight-Pitch Process, *IEDM 2013*.

[106] Kunihiro Suzuki, Yoshiharu Tosaka, and Toshihiro Sugii, “Analytical Threshold Voltage Model for Short Channel Double-Gate SOI MOSFET’s”, *IEEE Trans. On Electron Devices*, VOL. 43, NO. 7, JULY 1996.