

# Transportna svojstva šupljina u nanometarskim germanijskim strukturama

---

Ivanić, Vedran

Master's thesis / Diplomski rad

2014

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:538621>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-09-27**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

Vedran Ivanić

TRANSPORTNA SVOJSTVA ŠUPLJINA U  
NANOMETARSKIM GERMANIJSKIM  
TRANZISTORSKIM STRUKTURAMA

Diplomski rad

Zagreb, 2014.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: ISTRAŽIVAČKI

**Vedran Ivanić**

Diplomski rad

**Transportna svojstva šupljina u  
nanometarskim germanijskim  
tranzistorskim strukturama**

Voditelj diplomskog rada: dr. sc. Tomislav Suligoj

Ocjena diplomskog rada: \_\_\_\_\_

Povjerenstvo: 1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

Datum polaganja: \_\_\_\_\_

Zagreb, 2014.



## Sažetak

Numeričkim modeliranjem utemeljenim na fizikalnim zakonima je računata pokretljivost šupljina u ultra-tankim germanijskim slojevima. Schödingero-va i Poissonova jednačba je uzeta u obzir samokonzistentno a mobilnost je izražena preko Kubo-Greenwood formule. Kvantno zatočenje je uzeto u obzir za pojas teških, lakih i split-off šupljina za germanijski MOSFET sa dvije upravljačke elektrode. Promatrana je raspodjela valne funkcije šupljina unutar germanija i energetski nivoi. Raspršenje na akustičnim i optičkim fononima je uzeto u obzir prilikom računanja impulsnog relaksacijskog vremena šupljina. Opaženo smanjenje pokretljivosti u tanjim slojevima je objašnjeno pregledom utjecaja zatočenja izazvanog poljem i geometrijskog zatočenja. Doprinosi različitih pojaseva šupljina su proučeni računajući populaciju po-jedinog pojasa i njegovu mobilnost.

# Transport properties of holes in nanometer germanium transistor structures

## **Abstract**

Physics-based modeling of hole mobilities in ultra-thin germanium layers is calculated with self-consistent Schrödinger-Poisson solver and Kubo-Greenwood formula. Quantum confinement is taken into account for heavy, light and split-off hole band in a double-gate germanium MOSFET structure. Distribution of hole wave function is examined along with energy levels. Acoustic and optical phonon scattering is taken into consideration in the calculation of hole momentum relaxation time. The observed reduction of mobility in thinner layers is explained by examining the influence of field-induced and geometry-induced confinement. Contributions from different hole bands are investigated by calculating band population and respective band mobilities.

# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Nosioci naboja u kristalnoj rešetki pod naponom</b>	<b>3</b>
2.1	Kristalna rešetka germanija . . . . .	3
2.2	Nosioci u neuniformnom potencijalu . . . . .	4
2.2.1	Schrödingerova jednađba i periodični potencijal . . . . .	4
2.2.2	Pojasevi, površine konstantne energije i efektivne mase . . . . .	5
2.2.3	Schrödingerova jednađba i potencijalna jama . . . . .	7
2.2.4	Gustoća stanja i distribucija šupljina u 2D poluvodičkim sistemima . . . . .	9
2.2.5	Samosuglasni Schrödinger-Poissonov simulator . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Poluklasični transport nosioca naboja u 2D sistemima</b>	<b>12</b>
3.1	Fermijevo zlatno pravilo . . . . .	12
3.2	Raspršenja u 2D sustavima . . . . .	13
3.3	Pokretljivost i populacije šupljina . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Rezultati samosuglasnog Schrödinger-Poissonovog simulatora</b>	<b>16</b>
4.1	Valne funkcije . . . . .	16
4.2	Energetski nivoi . . . . .	19
4.3	Distribucija volumne gustoće šupljina . . . . .	20
4.4	Utjecaj asimetrije . . . . .	23
4.5	Volumna gustoća u uređajima sa jednom upravljačkom elektrodom . . . . .	24
<b>5</b>	<b>Rezultati pokretljivosti šupljina</b>	<b>25</b>
5.1	Preklapanje valnih funkcija - form faktor . . . . .	25
5.2	Impulsno relaksacijsko vrijeme . . . . .	26
5.3	Pokretljivost i utjecaj debljine germanija . . . . .	29
5.4	Pokretljivost i utjecaj populacija . . . . .	31
5.5	Pokretljivosti u uređajima sa jednom upravljačkom elektrodom . . . . .	33
<b>6</b>	<b>Zaključak i budući rad</b>	<b>35</b>
6.1	Zaključak . . . . .	35
6.2	Budući rad . . . . .	35
	<b>Dodaci</b>	<b>37</b>
<b>A</b>	<b>Osnove MOSFET-a</b>	<b>37</b>
<b>B</b>	<b>Gustoće stanja i gustoća čestica</b>	<b>39</b>
B.1	Gustoće stanja i gustoća čestica u 2D . . . . .	39
B.2	Općenita gustoća stanja i gustoća čestica . . . . .	40

<b>C Fermijevo zlatno pravilo</b>	<b>42</b>
<b>D MATLAB</b>	<b>45</b>



# 1 Uvod

Metal-oksid-poluvodič tranzistor sa efektom polja ili MOSFET je jedan od osnovnih elemenata u modernoj poluvodičkoj elektronici. Da bi se povećale performanse tranzistora novi materijali i arhitekture za uređaje se istražuju [1]. Glavni cilj novih materijala je naći poluvodičke materijale i strukture koje pružaju bolje performanse nego današnja poluvodička tehnologija temeljena na Si [2], [3], [4]. Npr., poluvodič na izolatoru (SOI) sa ultratankim tijelom (UTB) MOSFET u kombinaciji sa napreznjima u kristalnoj rešetki [5] da bi se potisnuo efekt kratkog kanala (SCE) i poboljšala struja aktivnog vođenja [6], [7], [8]. Od naprednih strukturama sa više upravljačkih elektroda, FinFET je među najperspektivnijim s obzir na veliku mogućnost skaliranja, otpornost na SCE i kompatibilnost sa CMOS tehnologijom [9], [10]. Da bi se zadovoljili ITRS<sup>1</sup> zahtjevi za buduće CMOS tehnologije [11], germanij se smatra obećavajućim materijalima za slijedeću generaciju pMOS uređaja zbog velike mobilnosti šupljina [12], [13]. UTB Ge pMOSFET često se koristi zajedno sa III-V MOSFET-ima, npr. InGaAs [14], u dvokanalnom CMOS-u [15]. Velike pokretljivosti u UTB Ge nMOSFET također otvaraju mogućnosti za upotrebu Ge [16].

U ovom radu, cilj istraživanja je pokretljivost šupljina sa smanjenjem debljine tijela u UTB MOSFET-u sa dvije upravljačke elektrode (DG) preko poluklasičnog numeričkog modeliranja. Fizikalno modeliranje pokretljivosti šupljina je nezamjenjivo za predviđanje performansi UTB Ge tranzistora. S obzirom da je upotreba UTB nužna da bi se potisnuo SCE u iznimno smanjenim MOSFET-ima [1], istražuje se utjecaj debljine germanijskog sloja ( $T_{Ge}$ ) na pokretljivost. Schrödingerova i Poissonova jednadžba je riješena samosuglasno uzimajući u obzir utjecaj kvantnog zatočenja šupljina u germaniju između dva sloja oksida. Vjerojatnost prelaska u vremenu (preko akustičkih i optičkih fonona), form faktor i distribucija šupljina u vodljivom kanalu su izračunati i korišteni za modeliranje pokretljivosti šupljina u različitim pojasevima (teške, lake i split-off). Dio svojstva pokretljivosti su objašnjeni proučavanjem zatočenja izazvanog vanjskim poljem i geometrijom.

Makroskopske fizičke veličine nekog materijala su određene njegovim mikroskopskim uređenjem. U 2. poglavlju je stoga stavljen naglasak na raspodjelu nosioca naboja, elektrona ili šupljina, koji se nalaze unutar kristalne rešetke te utjecaj vanjskog napona. Kroz 3. poglavlje se promatraju transportna svojstva nosioca i njihovo međudjelovanje sa smetnjama u rešetki. Smetnje u ovom radu su akustični i optički fononi prisutni radi termalnog pobuđenja rešetke. Numeričko modeliranja veličina iz 2. poglavlja preko samosuglasnog Schrödinger-Poissonovog simulatora je predstavljeno u 4. poglavlju. Rezultati su valne funkcije, energetski nivoi i distribucije nosioca unutar germanijskog sloja. S navedenim veličinama se mogu modelirati transportna svojstva šupljina predstavljena u 5. poglavlju. Naglasak je stavljen na utjecaj debljine

---

<sup>1</sup>eng. International Technology Roadmap for Semiconductors, hr. Međunarodni Tehnološki Plan za Poluvodiče

germanijskog sloja koji ograničava pokretljivost i mijenja populacije pojedinih vrsta šupljina.

## 2 Nosiooci naboja u kristalnoj rešetki pod naponom

Ako želimo znati kako se nosiooci naboja unutar kristala ponašaju pod različitim temperaturama i naponima potrebno je znati u kakvom se okruženju nalaze. Prostorni raspored kristalne rešetke, kao i njen impulsi prostor je obrađen u potpoglavlju 2.1. Kroz potpoglavlje 2.2 se uvodi djelovanje periodičnog potencijala koje dovodi do pojave različitih pojaseva sa pripadnim efektivnim masama. Utjecaj potencijalne jame na nosioce je razrađen, te je predstavljena gustoća stanja za 2D strukturu DG MOSFET-a. Za kraj je prestavljen prijelaz iz analitičkog razmatranja u numerički kako bi se valne funkcije, energetski nivoi i gustoće čestica mogli praktično izračunati.

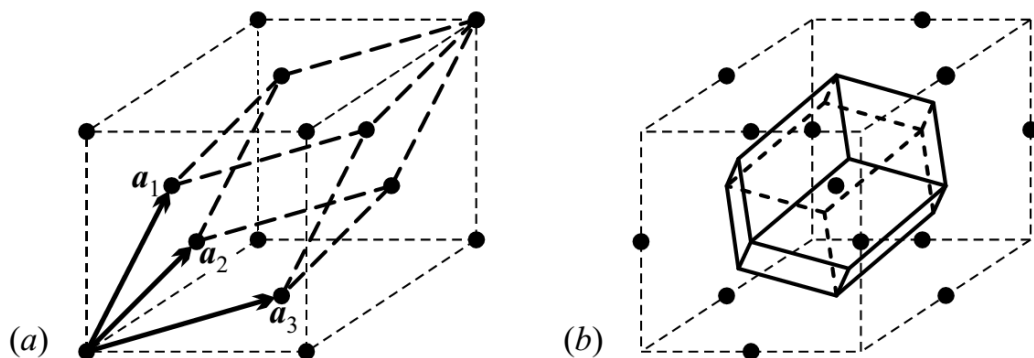
### 2.1 Kristalna rešetka germanija

Germanij (Ge), kao i npr. ugljik i silicij, kristalizira u dijamantnoj strukturi [17]. Dijamantnu strukturu čini plošno centrirana kubična (fcc<sup>2</sup>) Bravaisova rešetka sa bazom od dva identična atoma na koordinatama 000 i  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ . Dijamantnu strukturu promatramo kao i dvije fcc rešetke pomaknute međusobno za  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ . Veze između atoma se ostvaruju pomoću 4 elektrona u vanjskoj ljusci preko usmjerenih orbitala u  $sp^3$  hibridizaciji. Ge stoga spada u kovalentne kristale.

Primitivni vektori fcc rešetke su [18]:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{z}}), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}), \quad (2.1)$$

gdje je  $a = 5.658 \text{ \AA}$ . Za primitivnu ćeliju se odabire paralelepiped čiji su bridovi primitivni vektori Bravaisove ćelije. Postoji i drugi način konstrukcije primitivne ćelije: spajanjem pojedinog čvorišta u rešetki sa svim ostalim te se u polovištu spojnice stavlja ravnina normalna na spojnicu. Najmanji volumen ograničen ravninama se naziva Wigner-Seitzova (WS) ćelija [19]. Obje primitivne ćelije su prikazane na slici 2.1.



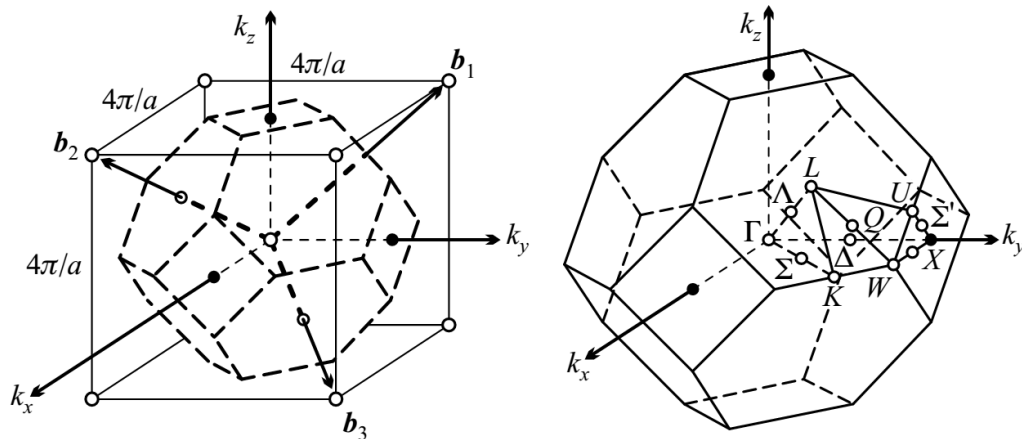
Slika 2.1: Plošno centrirana kubična rešetka: (a) Bravaisova ćelija sa primitivnim vektorima; (b) Wigner-Seitzova ćelija [18].

<sup>2</sup>eng. face-centered cubic

Uz kristalnu rešetku u realnom prostoru promatramo recipročnu rešetku u inverznom (Fourierovom, impulsnom) prostoru koju čine jedinični vektori:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}). \quad (2.2)$$

Konstrukcijom WS ćelije na recipročnoj rešeci se dobiva prva Brillouinova zona (1.BZ) što se vidi na slici 2.2. Ishodište impulsnog prostora, točka  $\Gamma$ , će biti od najvećeg in-



Slika 2.2: Recipročna rešetka plošno centrirane kubične rešetke i pripadna Brillouinova zona sa točkama i smjerovima visoke simetrije [18].

teresa u ovom radu. Može se pokazati da je WS ćelija volumno centrirane kubične (bcc<sup>3</sup>) rešetke identična prvoj Brillouinovoj zoni fcc rešetke i obratno.

## 2.2 Nosioći u neuniformnom potencijalu

### 2.2.1 Schrödingerova jednačba i periodični potencijal

Za potpuni kvantno-mehanički opis kristala trebali bi uzeti u obzir iznimno veliki broj ionskih jezgri i elektrona te opisati njihovo međudjelovanje. Kako to nije moguće potrebno je uzeti u obzir pojedine aproksimacije. Kao prva se uzima aproksimacija srednjeg polja. Elektron promatramo kao da se kreće u srednjem ili efektivnom potencijalu,  $U(\mathbf{r}, t)$ , unutar kojeg su obuhvaćeni svi mehanizmi međudjelovanja [20]. Utjecaj potencijala na jednočestične valne funkcije računamo pomoću Schrödingerove jednačbe. U drugoj aproksimaciji, poznatoj kao i Born-Oppenheimerova aproksimacija [21], zbog puno manje mase elektrona u odnosu na ione uzima se da je elektronska dinamika izraženija od ionske. Može se gledati da je gibanje iona adijabatsko (beskonačno sporo) dok se elektroni trenutno (beskonačno brzo) prilagođavaju položajima iona. Položaji iona ulaze parametarski u sve jednačbe koje opisuju gibanje elektrona, dok je položaj elektrona kvantno-mehanička dinamička varijabla. Posljedica je statički i periodični potencijal kojeg stvara kristalna rešetka  $U(\mathbf{r}, t) = U_C(\mathbf{r})$ ,

<sup>3</sup>eng. body centered cubic

gdje je periodičnost ista kao kod Bravaisove rešetke. Jednočestična vremenski ovisna Schrödingerova jednačba za navedenu situaciju glasi [22]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_t(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U_C(\mathbf{r}) \right] \Psi_t(\mathbf{r}, t). \quad (2.3)$$

Na valnoj funkciji se radi separacija varijabli  $\Psi_t(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r})\psi(t)$ , gdje vremenski član opisuje fazu. Tražimo statično rješenje pa gledamo vremenski neovisnu jednočestičnu Schrödingerovu jednačbu:

$$\mathbf{H}_C \Psi(\mathbf{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U_C(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

$\mathbf{H}_C$  je operator jednočestičnog Hamiltonijata elektrona u kristalu,  $\Psi(\mathbf{r})$  su njegove svojstvene valne funkcije a  $E$  svojstvene vrijednosti energije. Elektron ne može izaći iz kristala pa se često umjesto beskonačnog potencijala na rubovima upotrebljavaju Born-von Karman rubni uvjeti [23] o kojima će još biti govora u dodatku B.1:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

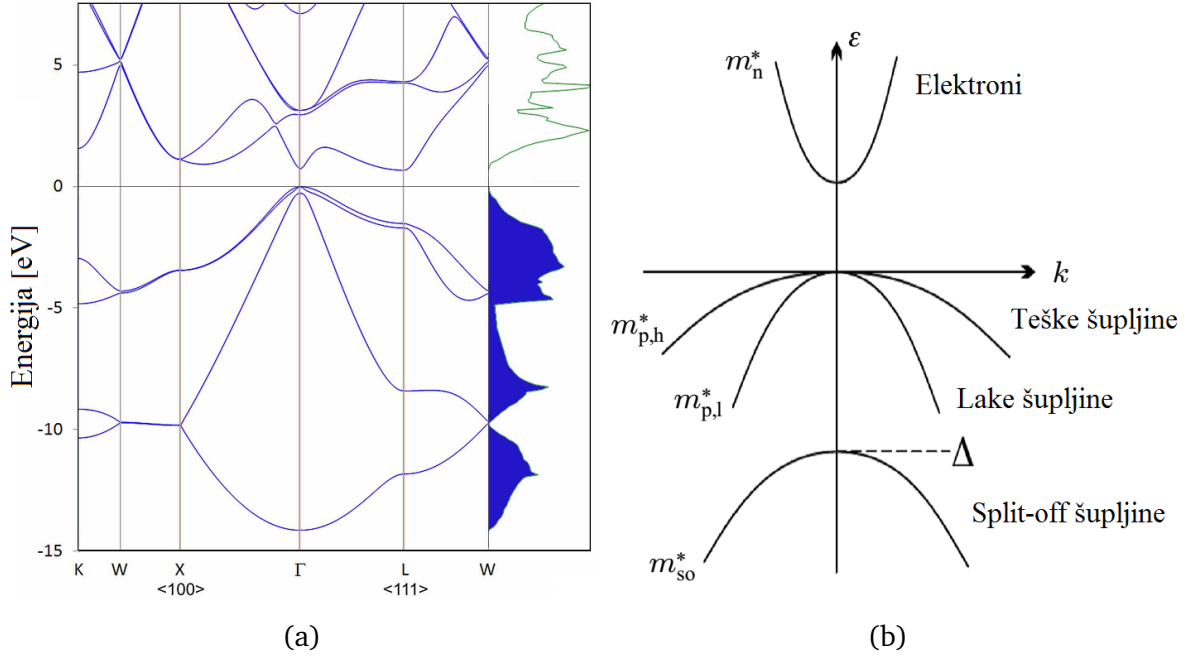
gdje je  $\mathbf{a}_i$  jedinični vektor a  $N_i$  broj jediničnih ćelija uzduž vektora  $\mathbf{a}_i$ , koji vode na diskretizaciju valnog broja  $\mathbf{k}$  koji se smatra kvazikontinuiranim za velik broj atoma. Rješenja Schrödingerove jednačbe u periodičnom potencijalu mogu se zapisati preko Blochovih valnih funkcija [20]:

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

gdje  $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  ima period kao i rešetka. Uvodi se diskretni indeks  $n$ , tj. kvantni broj koji označava rješenje. Energiju i njenu disperzijsku relaciju označavamo sa  $E_n(\mathbf{k})$ ; vrijednosti istog  $n$ -a a različitog  $\mathbf{k}$  čine pojedini energetski pojas, vrpcu ili zonu. Popunjenost, položaj Fermijevog nivoa i (ne)preklapanje susjednih pojaseva razlikuje metale i izolatore. Bitna napomena je da se izlaskom iz 1.BZ ne dobivaju nova fizikalna rješenja već ona nastaju povećanjem kvantnog broja  $n$ . Vektori  $\mathbf{k}$  su ograničeni unutar 1.BZ, a indeksi  $n$  mogu biti proizvoljno veliki. Uz desnu stranu jednačbe 2.6 može stajati i faktor normiranja  $1/\sqrt{V}$  ovisan o dimenzionalnosti sustava koji se često podrazumijeva i ne piše.

### 2.2.2 Pojasevi, površine konstantne energije i efektivne mase

Na slici 2.3 je prikazan energijski spektar Ge. Točke simetrije i pojedini smjerovi korištene za opis smjera valnog vektora  $\mathbf{k}$  su prikazane na slici 2.2. Na slici 2.3a se vidi da je minimum vodljivog pojasa na rubu 1.BZ u točki  $L = (2\pi/a)(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ . Maksimum valentnog pojasa je u ishodištu 1.BZ u točki  $\Gamma = (0, 0, 0)$ . Procijep je indirektni i iznosi 0.66 eV. Kao posljedica međudjelovanja spina i orbitalnog gibanja elektrona pri vrhu valentnog pojasa [21], [25], vidljivo na slici 2.3b, prisutno je cijepanje na tri pojasa od interesa u ovom radu. Pojasi se nazivaju po efektivnim



Slika 2.3: Energijski spektar germanija. Na (a) je prikazan spektar i gustoća stanja za raspon energija od  $-15$  do  $7$  eV. Vertikalna os prikazuje energije a horizontalna valni vektor  $\mathbf{k}$ . Na desnom kraju slike (a) je prikazana pripadna gustoća stanja za pojedine energije. Slika je rezultat modeliranja preuzetog iz [24]. Na (b) je prikazano područje oko točke  $\Gamma$  za male energije [20].

masama: teške šupljine (HH<sup>4</sup>), lake šupljine (LH<sup>5</sup>) i split-off šupljine (SO), gdje je maksimum SO pomaknut za  $\Delta = -0.28$  eV [26].

Pri dnu vodljive ili vrhu valentne vrpce disperzijska relacija za elektrone ili šupljine se aproksimira sa kvadratičnom funkcijom valnog vektora [22]:

$$E_B^{(\nu)}(\mathbf{k}) \approx E_{\nu 0} + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{\nu,x})^2}{m_x} + \frac{(k_y - k_{\nu,y})^2}{m_y} + \frac{(k_z - k_{\nu,z})^2}{m_z} \right], \quad (2.7)$$

gdje je  $E_{\nu 0}$  energija a  $k_{\nu,i}$  koordinate dna(vrha) vodljive(valentne) vrpce u impulsnom prostoru. Efektivne mase su definirane sa:

$$\frac{1}{m_i} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 E_B^{(\nu)}(\mathbf{k})}{\partial k_i^2} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_\nu}, \quad i = x, y, z. \quad (2.8)$$

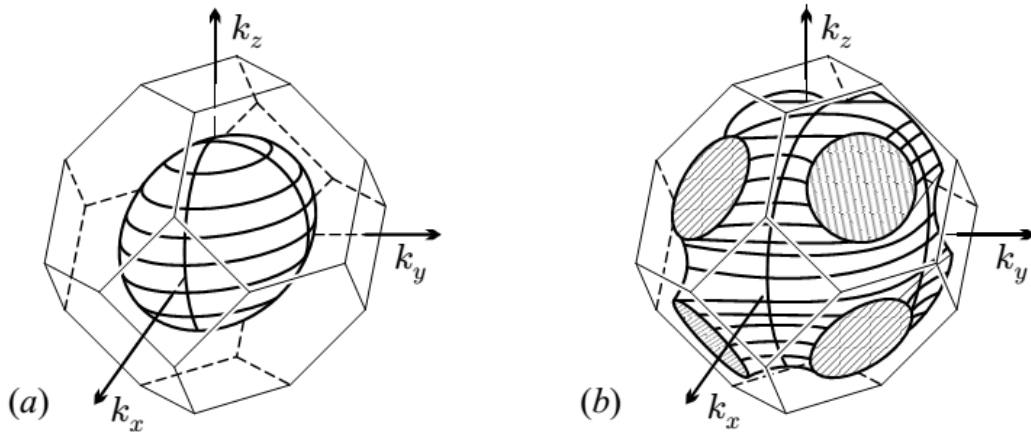
Ovisno o fizičkoj veličini koja se računa koriste se različite mase određene orijentacijom u prostoru [20]. Koristi se efektivna masa kvantizacije ili zatočenja ( $m_q$ ), efektivna masa gustoće stanja ( $m_d$ ) i efektivna masa vodljivosti ( $m_c$ ).

Općeniti rezultat formule (2.7) je elipsoid čija površina opisuje područje jednake energije. Stvarna struktura valentnog pojasa je kompleksna, [20], [27], te se navedena formula može proširiti i članovima koji opisuju nekvadratične članove i

<sup>4</sup>eng. heavy hole

<sup>5</sup>eng. light hole

više energije koji radi jednostavnosti ovdje nisu uzeti u obzir [22]. Za potpuniji opis bi se trebao uzeti u obzir  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  račun smetnje, DFT ili Monto Carlo simulacija [13], [22], [28]. Jedan primjer kalkulacije pojaseva Ge je prikazan na 2.3a koji je dobiven uzimanjem u obzir relativističkog spin-orbita i izmjenjensko-korelacijskog člana preko hibridnog funkcionala u DFT računu [24]. U ovom radu je pretpostavka da su svi pojasevi parabolni. Također pretpostavka je da su elipsoidi sfernog oblika, tj. efektivne mase šupljina su jednake u svim smjerovima. Razlozi navedenih aproksimacija se vide na slici 2.4. Stanja nižih energija su oblikom bliža sferi nego stanja



Slika 2.4: Površine konstantne energije fcc rešetke u impulsnom prostoru. Na lijevoj strani je prikazano stanje niže energije a na desnoj strani stanje više energije [18].

viših energija koja imaju prostorno izraženu ovisnost. Energije u ovom radu su ispod 3 eV tako da se na temelju slike 2.3 vidi da se nalazimo u parabolnom području. Pod navedenim pretpostavkama vrijedi

$$m_q = m_d = m_c. \quad (2.9)$$

Kroz rad je ipak zadržana različita oznaka za različite mase da bi se zadržao fizikalni smisao i prikaz mogućeg računa kad mase nisu jednake.

### 2.2.3 Schrödingerova jednadžba i potencijalna jama

Šupljine se nalaze u potencijalnoj jami koju čini oksid-poluvodič-oksid struktura. Kao oksid u ovom radu se koriste parametri za  $\text{SiO}_2$  tako da imamo  $\text{SiO}_2\text{-Ge-SiO}_2$  strukturu. Permitivnosti Ge i  $\text{SiO}_2$  su prikazane na tablici 4.1 zajedno sa ostalim parametrima za numeričku simulaciju. Zbog prostornog zatočenja potencijalnom jamom i kvantnih efekata javljaju se energetske nivou. Geometrija koja dovodi do toga je vidljiva na slici A.2a, a detalji o MOSFET-u su dani u dodatku A. Napon na UTB MOS ograničava područje dostupno za kretanje šupljina na 2D inverzijski sloj pri rubu Ge uz  $\text{SiO}_2$ . Svaki energetski nivo ima još dodatnu ovisnost o 2D valnom vektoru  $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}$ . Šupljine stvaraju 2D fermionski plin unutar kojeg se mogu slobodno kretati u ravnini  $xy$  paralelnoj sa ravninom spoja  $\text{SiO}_2\text{-Ge}$ , tj. okomito na

smjer zatočenja  $z$ . Schrödingerova jednadžba za šupljine koje su pod utjecajem potencijalne jame  $U(z)$  glasi [22]:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_{q,\nu}} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U(z) \right) \Phi_{\nu,n}(\mathbf{r}) = E_{\nu,n} \Phi_{\nu,n}(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

$m_{q,\nu}$  označava masu zatočenja za pojedini pojas  $\nu$ , tj. HH, LH ili SO pojas.  $E_{\nu,n}$  i  $\Phi_{\nu,n}$  označavaju svojstvene energije i valne funkcije za pojedini pojas  $\nu$  i energetski nivo  $n$  unutar potencijalne jame.  $U(z)$  ograničava kretanje šupljina na već opisani način te se radi separacija varijabli

$$\Phi_{\nu,n}(\mathbf{r}) = \phi_{\nu,n}(z) \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{A}}, \quad (2.11)$$

gdje je položaj  $\mathbf{r} = r_x \hat{\mathbf{x}} + r_y \hat{\mathbf{y}}$  dvodimenzionalni vektor a  $A$  površina normalizacije. Član  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  opisuje samo ravni val u  $xy$  smjeru čiji je modul jednak 1. Raspored šupljina dan je preko  $\phi_{\nu,n}(z)$ . Korištenjem separacije (2.11) u formuli (2.10) dobivamo

$$\mathbf{H}\phi_{\nu,n}(z) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_{q,\nu}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z) \right) \phi_{\nu,n}(z) = \varepsilon_{\nu,n} \phi_{\nu,n}(z). \quad (2.12)$$

Ukupna energija sistema iz (2.10) i veza sa  $\varepsilon_{\nu,n}$  je dana s

$$E_{\nu,n}(\mathbf{k}) = E_{\nu 0} + \varepsilon_{\nu,n} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{d,\nu}}, \quad (2.13)$$

gdje je  $E_{\nu 0}$  vrh pojasa  $\nu$ ,  $\varepsilon_{\nu,n}$  doprinos od nivoa  $n$  unutar potencijalne jame za pojas  $\nu$  a zadnji član kinetička energija ravnog vala u  $xy$  ravnini.

Jednadžba (2.12) se rješava numerički metodom konačnih razlika na uniformnoj mreži razmaka  $a$ . Jednadžba prelazi iz diferencijalne u linearnu gdje su derivacije na pojedinim čvorištima  $z_k$  [29]:

$$\frac{\partial \phi(z_k)}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_k \approx \frac{\phi_{k+1} + \phi_{k-1}}{2a}, \quad \frac{\partial^2 \phi(z_k)}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \Big|_k \approx \frac{\phi_{k+1} + \phi_{k-1} - 2\phi_k}{a^2}. \quad (2.14)$$

Uz pokratu  $t_0 = \hbar^2/(2m_q a^2)$  i  $U_k = U(z_k)$  problem  $\mathbf{H}\phi = \varepsilon\phi$  prelazi u matičnu jednadžbu oblika

$$\begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \dots & 0 \\ & -t_0 & 2t_0 + U_{k-1} & -t_0 & & \vdots \\ & & -t_0 & 2t_0 + U_k & -t_0 & \\ \vdots & & & -t_0 & 2t_0 + U_{k+1} & -t_0 \\ 0 & \dots & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ \phi_{k-1} \\ \phi_k \\ \phi_{k+1} \\ \vdots \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} \vdots \\ \phi_{k-1} \\ \phi_k \\ \phi_{k+1} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

gdje su rješenja svojstvene energije i valne funkcije. Navedenu relaciju treba još modificirati jer efektivne kvantizacijske mase nisu jednake u području  $\text{SiO}_2$  i Ge.



$t_0$  prelazi u  $t_1 = \hbar^2/(2m_{q1}a^2)$  i  $t_2 = \hbar^2/(2m_{q2}a^2)$ . Ukoliko je spojište dva različita materijala u čvorištu k Hamiltonijan prelazi u

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \cdots & 0 \\ & -t_1 & 2t_1 + U_{k-1} & -t_1 & & \vdots \\ & & -t_1 & t_1 + t_2 + U_k & -t_2 & \\ \vdots & & & -t_2 & 2t_2 + U_{k+1} & -t_2 \\ 0 & \cdots & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (2.16)$$

Oba navedena Hamiltonijana su hermitska što je i nužno da bi nam svojstvene vrijednosti energije bile realne.

Prije daljnjeg izlaganja mogu se predvidjeti neka kvalitativna svojstva rješenja iz (2.12). Ako bi uzeli da su zidovi potencijalne jame koju stvara SiO<sub>2</sub> beskonačno veliki dobili bi beskonačnu potencijalnu jamu sa rješenjima svojstvenih energija oblika [21], [25]:

$$\varepsilon_{\nu,n} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_{q,\nu} T_{Ge}^2}, \quad (2.17)$$

gdje je  $T_{Ge}$  širina dna potencijalne jame, odnosno debljina Ge. Veće kvantizacijske mase  $m_{q,\nu}$ , recimo HH u odnosu na LH, dovode do manjih razmaka između susjednih energijskih nivoa te većeg broja nivoa u jami konačnih potencijalnih zidova. Stanjivanjem debljine Ge, tj.  $T_{Ge}$ , dolazi do većih razmaka između energijskih nivoa te manjeg broja nivoa u jami konačnih potencijalnih zidova.

#### 2.2.4 Gustoća stanja i distribucija šupljina u 2D poluvodičkim sistemima

Gustoća stanja za pojedini pojas  $\nu$  i nivo  $n$ ,  $g_{\nu,n}(E)$ , je opisana kao broj dostupnih stanja za energiju  $E$  po jedinici površine jer radimo u 2D prostoru. Opis preko  $\delta$  funkcije, tj. distribucije, je dan sa [22]:

$$g_{\nu,n}(E) = \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E_{\nu,n}(\mathbf{k}) - E). \quad (2.18)$$

$E_{\nu,n}$  je opisana sa disperzijskom relacijom (2.13),  $A$  je normalizacijska površina. Uvrštavanjem disperzijske relacije te sumiranjem po svim pojasevima i nivoima dobiva se ukupna gustoća stanja:

$$g(E) = \sum_{\nu,n} g_{\nu,n}(E) = \sum_{\nu,n} \frac{n_{sp} \mu_{\nu} m_{d,\nu}}{2\pi \hbar^2} H(E - E_{\nu 0} - \varepsilon_{\nu,n}). \quad (2.19)$$

$n_{sp}$  označava multiplicitet spina,  $H$  označava Heavisideovu funkciju koja osigurava točne granice integracije kasnije.  $\mu_{\nu}$  je multiplicitet pojasa sa istim  $m_d$  koji je u slučaju šupljina jednak 1. Multiplicitet je napisan radi općenitosti izraza jer u slučaju elektrona može imati vrijednosti različite od 1.

Poluvodič se nalazi na konačnoj temperaturi  $T$  i šupljine kao fermioni slijede Fermi-Diracovu distribuciju. U kombinaciji sa gustoćom dostupnih stanja (2.18)

gustoća šupljina po jedinici volumena za pojedini pojas  $\nu$  i nivo  $n$ ,  $p_{\nu,n}(z)$ , poprima oblik:

$$p_{\nu,n}(z) = |\phi_{\nu,n}(z)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} g_{\nu,n}(E) f_{FD}(E) dE. \quad (2.20)$$

Ukupna gustoća šupljina se dobiva sumiranjem po svim pojasevima i nivoima

$$p(z) = \sum_{\nu,n} p_{\nu,n}(z) = \sum_{\nu,n} |\phi_{\nu,n}(z)|^2 \frac{n_{sp} \mu_{\nu} m_{d,\nu} k_B T}{2\pi \hbar^2} \left\{ \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_{\nu 0} - \varepsilon_{\nu,n}}{k_B T} \right) \right] \right\}. \quad (2.21)$$

Još jedna zanimljiva veličina za promatranje je plošna ili inverzijska<sup>6</sup> gustoća,  $P_{\nu,n}^{inv}$ , koja opisuje inducirane šupljine po jedinici površine:

$$P_{inv} = \sum_{\nu,n} P_{\nu,n}^{inv} = \sum_{\nu,n} \int_{-\infty}^{+\infty} p_{\nu,n}(z) dz. \quad (2.22)$$

Potpuniji formalizam za izvod formula (2.18) - (2.22) je opisan u dodatku B.1.

### 2.2.5 Samosuglasni Schrödinger-Poissonov simulator

Da bi dobili samosuglasno rješenje Schrödingerovu jednadžbu treba povezati sa Poissonovom jednadžbom. Regulacijom napona na upravljačkoj elektrodi dolazi do razlike elektrostatskog potencijala  $V(z)$  između  $\text{SiO}_2$  i Ge unutar kojeg se induciraju šupljine. Distribucija šupljina, tj. naboja preko Poissonove jednadžbe utječe na potencijal  $U(z)$  koji ulazi u Schrödingerovu jednadžbu. Kao rješenja Schrödingerove jednadžbe iz (2.12) dobivamo valne funkcije i energije koje u kombinaciji sa (2.21) daju distribuciju šupljina unutar Ge. Nova distribucija ponovno ulazi u Poissonovu jednadžbu. Iteracija se ponavlja dok se ne postigne tražena konvergencija između dva uzastopna potencijala [25].

Potencijal  $U(z)$  ima dva doprinosa. Elektronski afinitet,  $\chi(z)$ , je posljedica  $\text{SiO}_2$ -Ge- $\text{SiO}_2$  geometrije, tj. potencijalne barijere na koju šupljine nailaze na spoju Ge sa  $\text{SiO}_2$ . Drugi,  $V(z)$ , je elektrostatski potencijal koji dolazi od vanjskog napona i raspodjela šupljina.  $U(z)$  poprima oblik:

$$U(z) = -eV(z) - \chi(z). \quad (2.23)$$

Poissonova jednadžba je:

$$-\frac{d}{dz} \left[ \varepsilon_r(z) \frac{dV(z)}{dz} \right] = \frac{e}{\varepsilon_0} [p(z) + P_I(z)], \quad (2.24)$$

gdje dielektrična konstanta  $\varepsilon_r(z)$  ima prostornu ovisnost zbog različitih vrijedosti u  $\text{SiO}_2$  i Ge, a  $P_I$  označava eventualne ionizirane nečistoće. Jednadžba se rješava numerički preko matrice slične kao i (2.16). Lijeva strana jednadžbe (2.24), ukoliko

<sup>6</sup>Oba izraza će se ekvivalentno koristiti dalje kroz tekst.

se pretpostavi da je spoj između dva različita materijala u čvorištu  $k$ , se zapisuje kao matični operator:

$$\mathbf{D} = \begin{matrix} \vdots \\ k-1 \\ k \\ k+1 \\ \vdots \end{matrix} \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \cdots & 0 \\ & -d_1 & 2d_1 & -d_1 & & \vdots \\ & & -d_1 & d_1 + d_2 & -d_2 & \\ & \vdots & & -d_2 & 2d_2 & -d_2 \\ 0 & \cdots & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (2.25)$$

Oznake su  $d_1 = \varepsilon_{r1}/a^2$  i  $d_2 = \varepsilon_{r2}/a^2$ , gdje  $\varepsilon_{r1}$  i  $\varepsilon_{r2}$  označavaju relativnu dielektričnu konstantu materijala 1 i 2, a  $a$  je razmak u mreži između dviju susjednih čvorišta u numeričkom računu. U slučaju konstantnog  $\varepsilon_r$  jednadžba (2.25) se zapisuje u reduciranom obliku  $\mathbf{D} = (\varepsilon_r/a^2) \cdot \mathbf{D}_R$  gdje je:

$$\mathbf{D}_R = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & & \cdots & 0 \\ \ddots & 2 & -1 & & \vdots \\ & -1 & 2 & -1 & \\ \vdots & & -1 & 2 & \ddots \\ 0 & \cdots & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (2.26)$$

Elektrostatski potencijal  $V(z)$  nužan za (2.23) i (2.12) se računa sa

$$\mathbf{V} = \frac{e}{\varepsilon_0} \text{inv}(\mathbf{D}) \cdot \mathbf{P} + \text{inv}(\mathbf{D}_R) \cdot \mathbf{V}_{bc}, \quad (2.27)$$

$\mathbf{P}$  je gustoća naboja koja uz šupljine može sadržavati i ionizirane primjese, a s  $\mathbf{V}_{bc}$  su označeni rubni uvjeti napona spojenog na krajeve upravljačke elektrode. Ukoliko imamo uređaj sa dvije upravljačke elektrode rubni uvjeti će biti:

$$\mathbf{V}_{bc} = \begin{bmatrix} -V_{G1} & 0 & \cdots & 0 & -V_{G2} \end{bmatrix}. \quad (2.28)$$

$\mathbf{V}_{bc}$  je prilikom numeričkog modeliranja niz koji govori da na lijevom i desnom rubu imamo spojeni napon iznosa  $-V_{G1}$  i  $-V_{G2}$  čime simuliramo DG MOS strukturu sa slike A.2a. Za simulaciju SG MOS strukture prikazane na slici A.1 koristili bi se rubni uvjeti

$$\mathbf{V}_{bc} = \begin{bmatrix} -V_{G1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.29)$$

jer postoji samo jedna upravljačka elektroda. Navedeni opis u ovom potpoglavlju, zajedno sa većinom potpoglavlja 2.2.3 i 2.2.4, smisleno prati rad [30] koji je temelj za fizikalno modeliranje preko numeričkog koda.

### 3 Poluklasični transport nosioca naboja u 2D sistemima

Kroz 3. poglavlje se radi poluklasično modeliranje pokretljivosti šupljina unutar poluvodičkih kvantnih jama koje će se onda primjeniti na UTB SiO<sub>2</sub>-Ge-SiO<sub>2</sub> strukturu. U potpoglavlju 3.1 se koristi Fermijevo zlatno pravilo za opis međudjelovanja šupljina i fonona. Potpuniji formalizam je dan u dodatku C. Za raspršenja u niskodimenzionalnim sustavima, 2D u ovom radu, je korištena Boltzmanova transportna jednadžba u kombinaciji sa impulsnim relaksacijskim vremenom. U potpoglavlju 3.2 su opisana srednja vremena života šupljina za raspršenja na optičkim i akustičkim fononima. Srednja vremena života zajedno sa populacijama pojedinih šupljina su korišteni u potpoglavlju 3.3 da bi se dobila ukupna pokretljivost šupljina svih pojaseva i nivoa.

#### 3.1 Fermijevo zlatno pravilo

Prolaskom kroz kristal šupljine nailaze na nečistoće, nepravilnosti ili termalne vibracije koje se mogu gledati kao male perturbacije. Fermijevo zlatno pravilo opisuje vjerojatnost prelaska u vremenu iz jednog kvantnog stanja u drugo pod utjecajem male perturbacije. Jednadžba (2.3) sa novim članom  $U_{sc}$ , koji opisuje perturbaciju na kojoj se raspršuju šupljine, prelazi u [22], [27]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_t(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U_C(\mathbf{r}) + U_{sc}(\mathbf{r}) \right] \Psi_t(\mathbf{r}, t) = \left[ \hat{H} + U_{sc}(\mathbf{r}) \right] \Psi_t(\mathbf{r}, t). \quad (3.1)$$

Jednadžba (3.1) opisuje istu situaciju kao i jednadžbe (C.24) i (C.25) te se dalje koristiti formalizam opisan u dodatku C. Perturbacija omogućava prijelaz iz početnog kvantnog stanja  $(n, \mathbf{k})$ , u dodatku opisano sa  $l$ , u konačno  $(n', \mathbf{k}')$ , u dodatku opisano sa  $k$  [21].

Za elastična ili kvazielastična raspršenja, u kojima je promjena energije dovoljno mala da se mogu smatrati elastičnima, vjerojatnost prelaska u vremenu je

$$S_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta [E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}')], \quad (3.2)$$

gdje se vidi sličnost sa izrazom (C.38);  $\delta$ -funkcija osigurava očuvanje energije. U slučaju neelastičnih raspršenja potencijal prelazi u

$$U_{sc} = U_{ab}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) + U_{em}(\mathbf{r}) \exp(i\omega t), \quad (3.3)$$

gdje prvi član opisuje apsorpciju a drugi član emisiju. Vjerojatnost prelaska u vremenu onda također ima dva člana

$$S_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{n,n'}^{ab}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta [E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}') + \hbar\omega] + \frac{2\pi}{\hbar} |M_{n,n'}^{em}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta [E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}') - \hbar\omega]. \quad (3.4)$$

$\delta$ -funkcija opisuje povećanje ili smanjenje energije šupljine, tj.  $E_{n'}(\mathbf{k}') = E_n(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega$ . Energija se prenosi međudjelovanjem sa fononima; oznaka za apsorpciju je  $+\hbar\omega$  a za emisiju  $-\hbar\omega$ . Kako je s izrazima (3.2) i (3.4) dana vjerojatnost prelaska iz stanja  $(n, \mathbf{k})$  u stanje  $(n', \mathbf{k}')$  treba uzeti u obzir sva moguća stanja  $(n', \mathbf{k}')$  iz kojih se stanje moglo raspršiti. Ukupna vjerojatnost prelaska je

$$S_n(\mathbf{k}) = \sum_{n', \mathbf{k}'} S_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (3.5)$$

### 3.2 Raspršenja u 2D sustavima

U ovom dijelu koristiti će se kvaziklasična aproksimacija gdje je poznat položaj i impuls pojedine čestice, zanemarujući Heisenbergove relacije neodređenosti. Elektronska dinamika se gleda preko valnih paketa. Da bi se mogla koristiti navedena aproksimacija nužno je da su zadovoljene određene pretpostavke. Srednji slobodni put nosioca  $l$  treba biti puno veći od konstante rešetke  $a$ , a vrijeme života  $\tau$  puno manje od  $\hbar/k_B T$  [19]. S tim pretpostavkama funkcija raspodjele  $f$  može imati ovisnost i o položaju i o impulsu kao klasičnim fizičkim veličinama. Funkcija raspodjele  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  nam govori koja je vjerojatnost nalaženja čestice sa položajem  $\mathbf{r}$  i impulsom  $\mathbf{k}$  u vremenu  $t$ . Boltzmanova transportna jednadžba (BTE) za nivo  $n$  glasi:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{k}} f_n \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} E_n + \nabla_{\mathbf{r}} f_n \cdot \mathbf{v}_g = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{sudari}} = S_{in, n} - S_{out, n}, \quad (3.6)$$

gdje je  $E_n$  ukupna energija nosioca za nivo  $n$ , grupna brzina valnog paketa je  $\mathbf{v}_g$ . Za stacionarna stanja sustava prvi član je 0, drugi član opisuje utjecaj vanjske sile a treći difuziju. Desna strana jednakosti opisuje da prirastu funkcije raspodjele doprinose ulazna i izlazna raspršenja koja se odvijaju preko sudara, npr. sa fononima [19]. Teorijska razmatranja BTE se mogu naći u [17] i [20], a njena primjena u poluvodičima je opisana u [22] i [27].

U slučaju uniformnog transporta, tj. ako su nam  $xy$  dimenzije dovoljno velike tako da nemamo rubnih efekata i za male pomake funkcije raspodjele od ravnoteže može se koristiti aproksimacija relaksacijskog impulsnog vremena (MRT<sup>7</sup>). U njoj se aproksimiraju raspršenja iz (3.6) sa:

$$S_{in, n} - S_{out, n} = \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_0(E_n(\mathbf{k}))}{\tau_n(\mathbf{k})} = \frac{\delta f_n(\mathbf{k})}{\tau_n(\mathbf{k})}. \quad (3.7)$$

$\tau_n(\mathbf{k})$  je vrijeme relaksacije koje opisuje koliko treba sustavu da se vrati u ravnotežno stanje pomoću sudara kad ga pomaknemo iz ravnoteže.

Detaljni izvoda za pojedina vremena je dan u [22], a općeniti implicitni oblik MRT je dan sa

$$\frac{1}{\tau_i(\mathbf{k})} = \sum_{j, \mathbf{k}'} S_{i, j}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[ \frac{1 - f_0(E')}{1 - f_0(E)} \right] \left[ 1 - \frac{\tau_j(\mathbf{k}') \nu_j(\mathbf{k}')}{\tau_i(\mathbf{k}) \nu_i(\mathbf{k})} \right]. \quad (3.8)$$

<sup>7</sup>eng. momentum relaxation time

Dva mehanizma raspršenja se proučavaju u ovom radu, raspršenje na akustičkim (AP) i optičkim (OP) fononima. Općenita pravila iz kojeg pojasa i/ili nivoa se šupljina može raspršiti u koje se gleda preko formalizma teorije grupa. Za ovaj rad su uzeti u obzir raspršenja u kojima se ne mijenja pojas<sup>8</sup> ali je moguće raspršenje iz jednog nivoa u drugo<sup>9</sup> [27].

Kod raspršenja na AP uzima se da su sudari kvazielastični. Nosiocima se mijenja energija prilikom raspršenja ali za male iznose pa se može promatrati raspršenje kao elastično. Energija koju nosi AP ima linearnu disperziju  $\hbar\omega(Q) = \hbar v_s q$  gdje je  $v_s$  brzina zvuka u materijalu [27]. Impulsno relaksacijsko vrijeme za raspršenja na akustičkim fononima (AP-MRT) je dano sa [14], [22]:

$$\frac{1}{\tau_{\nu,i}^{AP}(E)} = \sum_j \frac{n_\nu m_{d,\nu} k_B T D_{AP,\nu}^2}{\hbar^3 \rho v_s^2} F_{\nu;i,j} H(E - \varepsilon_{\nu,j}). \quad (3.9)$$

Radi općenitosti opet je ostavljena ovdje oznaka za multiplicitet pojasa  $n_\nu$ . Ovisno o obliku 1. BZ  $n_\nu$  može biti neka pozitivna cijelobrojna veličina, a za šupljine je 1.  $D_{AP}$  je akustički deformacijski potencijal,  $\rho$  gustoća Ge.

Veličina  $F_{\nu;i,j}$  se naziva form faktor (FF) i opisana je sa

$$F_{\nu;i,j} = \int_0^{T_{Ge}} |\phi_{\nu,i}(z)|^2 |\phi_{\nu,j}(z)|^2 dz. \quad (3.10)$$

Normalizacija valne funkcije

$$\sum_{\nu,n} \int_0^{T_{Ge}} |\phi_{\nu,n}(z)|^2 dz = 1 \quad (3.11)$$

ograničava maksimalni iznos FF

$$\int_0^{T_{Ge}} |\phi_{\nu,i}(z)|^2 |\phi_{\nu,j}(z)|^2 dz \leq 1. \quad (3.12)$$

$F_{\nu;i,j}$  opisuje koliko se preklapaju valne funkcije šupljina nivoa  $i$  i  $j$  u  $z$  smjeru. Za oznaku pojasa  $\nu$  je stavljena samo jedna veličina jer promatramo jedino raspršenja unutar pojasa. U slučaju mogućnosti raspršenja između pojasa oznaka bi bila  $F_{\nu,w;i,j}$ . Veličine FF bliske 0 opisuju situaciju gdje je preklapanje minimalno dok veličine bliske 1 opisuju maksimalno preklapanje. Osim numeričkog proučavanja FF se može opisati i kvalitativno. Šupljina se lakše rasprši iz početnog u konačno stanje ako su vjerojatnosti pronalaska u prostoru početnog i konačnog stanja slične. Šupljina se teško rasprši u stanje za koje ima malu vjerojatnost nalaženja.

Kod optičkih fonona je disperzija skoro konstantna pa se može uzeti  $\hbar\omega(Q) = \hbar\omega_{OP}$  [27]. Iznosi prenesene energije su veći od AP pa se više ne može uzimati u

<sup>8</sup>eng. intra-band

<sup>9</sup>eng. inter-subband

obzir kvazielastični pristup. Impulсно relaksacijsko vrijeme za raspršenja na optičkim fononima (OP-MRT) je dano sa [14], [22]:

$$\frac{1}{\tau_{\nu,i}^{OP}(E)} = \sum_j \frac{n_\nu m_{d,\nu} D_{OP}^2}{2\hbar\rho E_{OP}} \left( f_{BE}(E_{OP}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \\ \times \frac{1 - f_{FD}(E \pm E_{OP})}{1 - f_{FD}(E)} F_{\nu,i,j} H(E - (\varepsilon_{\nu,j} \mp E_{OP})), \quad (3.13)$$

$D_{OP}$  je optički deformacijski potencijal,  $E_{OP}$  energija fonona.  $f_{BE}$  je Bose-Einsteinova funkcija raspodjele za bozone;  $f_{FD}$  je Fermi-Diracova funkcija raspodjele za fermione.  $\pm$  omogućava apsorpciju odnosno emisiju fonona u skladu sa izrazom (3.4). I u izrazu (3.9) i u (3.13) je bilo potrebno sumirati po svim mogućim stanjima  $j$  jer se šupljina mogla raspršiti iz bilo kojeg stanja; već je navedena ista stvar u drugom obliku u izrazu (3.5).

### 3.3 Pokretljivost i populacije šupljina

Ukoliko je prisutno više različitih mehanizama raspršenja koji su međusobno nezavisni, u ovom radu su to raspršenja na AP i OP, zbrajanje se vrši preko Matthiessenovog pravila:

$$\frac{1}{\tau_{\nu,n}(E)} = \sum_{mech} \frac{1}{\tau_{\nu,n}^{mech}(E)}. \quad (3.14)$$

$\tau_{\nu,n}(E)$  označava vrijeme života za pojas  $\nu$  i nivo  $n$  na  $E$ . Mobilnost za pojedini  $(\nu, n)$  se računa preko Kubo-Greenwood formule za mobilnost preko [14], [22]:

$$\mu_{\nu,n} = \frac{e}{m_{c,\nu}} \frac{\int_{\varepsilon_{\nu,n}}^{+\infty} (E - \varepsilon_{\nu,n}) \tau_{\nu,n}(E) \left| \frac{\partial f_{FD}(E)}{\partial E} \right| dE}{\int_{\varepsilon_{\nu,n}}^{+\infty} (E - \varepsilon_{\nu,n}) \left| \frac{\partial f_{FD}(E)}{\partial E} \right| dE}. \quad (3.15)$$

Nakon što imamo mobilnost za pojas  $\nu$  i nivo  $n$ , ukupna mobilnost se računa preko težinskog udjela pojedinog  $(\nu, n)$  u ukupnoj populaciji šupljina:

$$\mu = \sum_{\nu,n} \frac{P_{\nu,n}^{inv}}{P_{inv}} \mu_{\nu,n}, \quad (3.16)$$

gdje je  $P_{\nu,n}^{inv}$  inverzijska gustoća šupljina opisana u (2.22).

## 4 Rezultati samosuglasnog Schrödinger-Poissonovog simulatora

Kroz 4. poglavlje su predstavljeni rezultati samosuglasnog Schrödinger-Poisson simulatora. Prvenstveno su to valne funkcije i energtski nivoi iz kojih se dalje mogu izvesti ostale potrebne veličine kao volumna gustoća čestica, srednje vrijeme života i pokretljivost. U potpoglavlju 4.1 se opisuju valne funkcije unutar germanija i različiti utjecaji na njih: debljina poluvodiča, napon na upravljačkoj elektrodi, pojasevi i nivoi. Detaljniji prikaz energetskih nivoa unutar potencijalne jame koju čini SiO<sub>2</sub>-Ge-SiO<sub>2</sub> sutruktura je naveden u potpoglavlju 4.2. U 4.3 se objašnjava utjecaj valnih funkcija i energetskih nivoa preko formule (2.21) na koncentracije šupljina. Utjecaj debljine oksida na asimetriju raspodjele šupljina je opisan u potpoglavlju 4.4. Usporedba sa slučajem kada se napon primjenjuje na samo jednu upravljačku elektrodu je prikazan u potpoglavlju 4.5 gdje se javlja izrazita prostorna koncentracija šupljina uz samo jedan sloj.

### 4.1 Valne funkcije

Valna funkcija šupljina u  $z$ -smjeru,  $\phi_{\nu,n}(z)$ , dobivena separacijom varijabli u (2.11), dijelom određuje veličine potrebne za izračun pokretljivosti šupljina  $\mu$  (3.15), npr. volumnu gustoću šupljina  $p$  (2.20) ili form-faktor  $F_{\nu;i,j}$  (3.10). Radi potpunijeg shvaćanja kasnijih rezultata slijedi prikaz valnih funkcija šupljina, točnije kvadrata valnih funkcija  $|\phi_{\nu,n}(z)|^2$  - vjerojatnosti nalaženja šupljine unutar Ge.

Za sve simulacije Femijev nivo je 0 eV kao i vrh valentne vrpce. Potencijalna barijera na koju nailaze šupljine prilikom prelaska iz Ge u SiO<sub>2</sub> je 3 eV. Svi parametri korišteni kroz ovaj rad su prikazani u tablici 4.1. Debljina SiO<sub>2</sub> je 3 nm a njen utjecaj

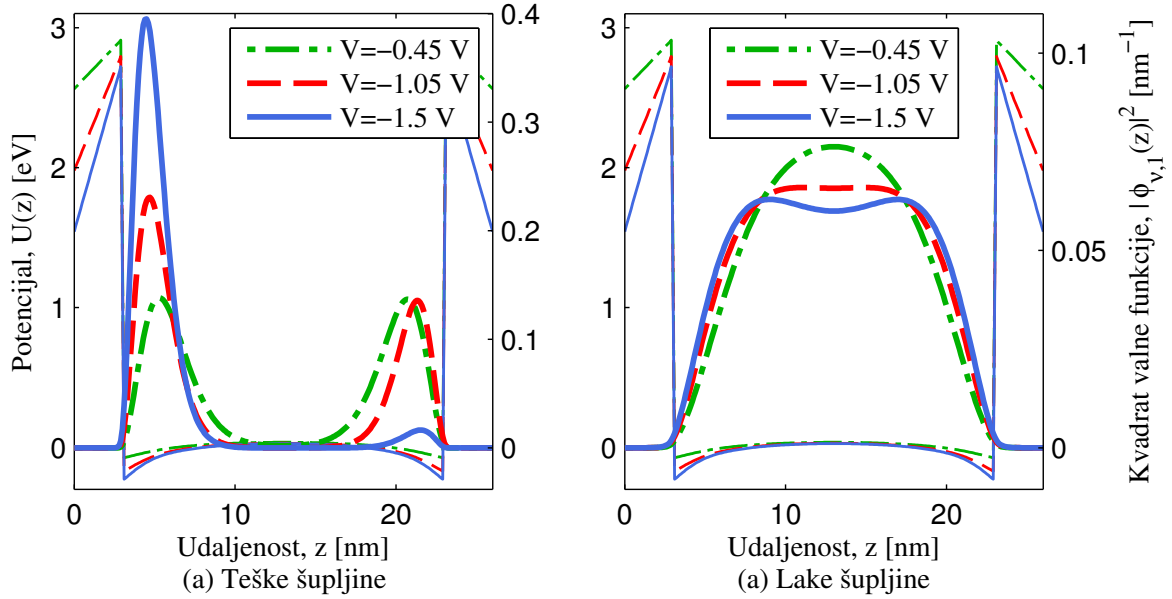
$m_{HH}$	$m_{LH}$	$m_{SO}$	$D_{AP}$	$D_{OP}$
$0.33m_0$	$0.043m_0$	$0.084m_0$	11 [eV]	$6 \cdot 10^8$ [eV/cm]
$E_{OP}$	$v_s$	$\rho$	$\varepsilon_{SiO_2}$	$\varepsilon_{Ge}$
38 [meV]	$5 \cdot 10^5$ [cm/s]	5.32 [g/cm <sup>3</sup> ]	$3.9\varepsilon_0$	$16.2\varepsilon_0$

Tablica 4.1: Parametri korišteni za računanje mobilnosti. [31], [26]

će biti detaljnije objašnjen u potpoglavlju 4.4. Debljina germanija će se razmatrati u rasponu 2-20 nm. Naponi na upravljačkoj elektrodi su do  $V_G = -1.5$  V i predznak – će se često izostavljati i podrazumijevati.

Utjecaj različitih napona na kvadrate valnih funkcija je prikazan na slici 4.1 za dva različita pojasa: HH i LH. Debljina germanija  $T_{Ge}$  je konstantna i iznosi 20 nm kao što se vidi na  $x$ -osi. Lijevo i desno od Ge su vidljiva dva sloja SiO<sub>2</sub> debljine 3 nm. Iznosi pojedinih masa su prikazani na tablici 4.1. Mase LH i SO su istog reda veličine; pojas SO nije prikazan jer je kvalitativno sličan LH pojasu. Na slici 4.1a se vidi da

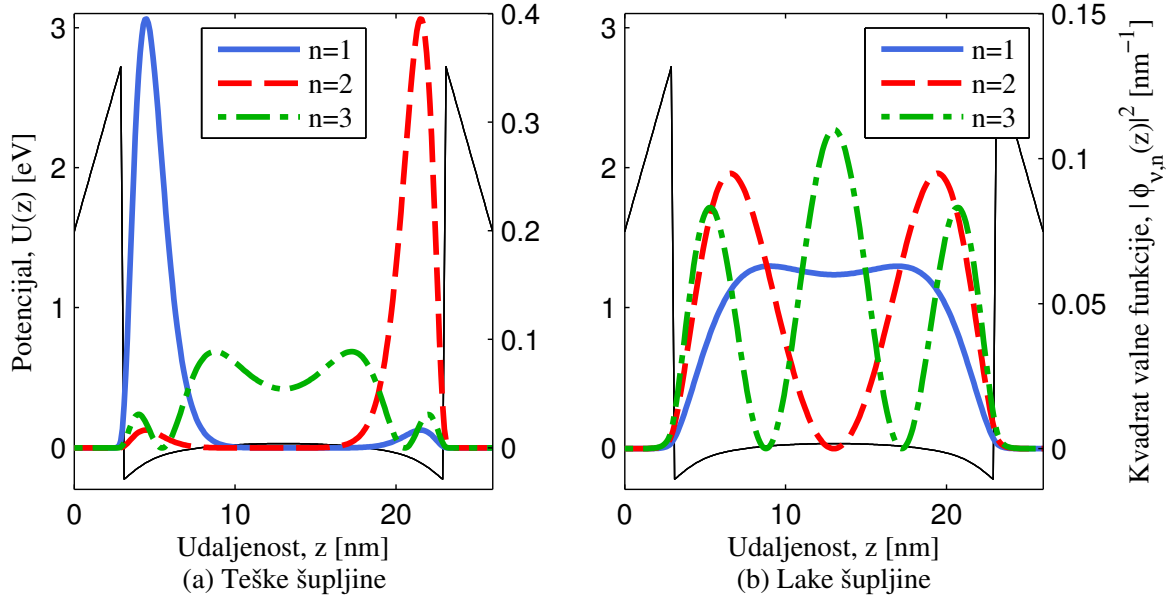




Slika 4.1: Kvadrati valnih funkcija  $\phi_{\nu,1}(z)$  prvog energetskog nivoa unutar potencijalne jame  $U(z)$  za više napona  $V_G$ . Tanke linije prikazuju oblik potencijalne jame a deblje linije kvadrate valnih funkcija.  $T_{Ge} = 20$  nm.

veći napon utječ na valnu funkciju HH tako što je lokalizira bliže oksidu. Za manje napone  $\phi_{HH,1}(z)$  se nalazi podjednako kraj oba oksida; za veće napone  $\phi_{HH,1}(z)$  se lokalizira uz jedan sloj oksida. Isto se događa za  $\phi_{HH,2}(z)$ , samo što je lokalizacija uz drugi oksid. Za pojas LH na slici 4.1b je vidljivo da  $\phi_{LH,1}(z)$  ima slabije izraženu modulaciju naponom. Kvantni efekti zbog puno manje mase LH u odnosu na HH omogućavaju LH veću rasprostranjenost u poluvodiču, čak i za manje napone. Prikaz viših energetskih nivoa i utjecaja napona na njih je kvalitativno isti. Povećavanjem napona vrhovi valnih funkcija bliski oksidima se još više približavaju oksidu i podižu - povećava se vjerojatnost nalaženja šupljine uz okside. Vrhovi u sredini poluvodiča se proširuju i spuštaju - smanjuje se vjerojatnost nalaženja šupljine u sredini Ge.

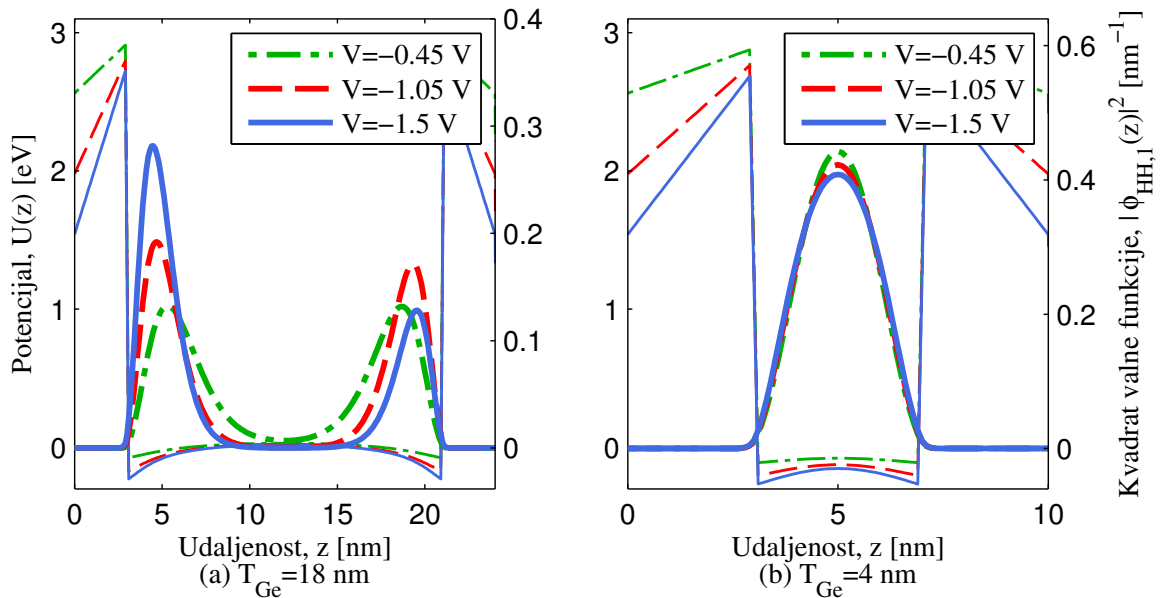
Na slici 4.2 su prikazane valne funkcije različitih energetskih nivoa za pojas HH i LH; pojas SO je izostavljen zbog već navedenih razloga. Na slici 4.2a se vide prva tri nivoa za HH. Vjerojatnost nalaženja šupljine za prva dva nivoa je najveća uz oksid. Ako usporedimo sa slikom 4.1a, može se zaključiti da je  $\phi_{HH,2}(z)$  za niže napone također pomaknuta prema sredini Ge kao i  $\phi_{HH,1}(z)$ . Za niže napone to su ustvari dva nivoa koja su simetrična i antisimetrična ali im je kvadrat valne funkcije isti. S povećanjem napona se izoliraju na suprotne krajeve, iako imaju malu ali konačnu vjerojatnost da se nađu i na suprotnom kraju. Treći nivo, kao nivo više energije, ima više čvorova, više je rasprostranjeno u prostoru i raste vjerojatnost pronalaska šupljine u sredini Ge. Slika 4.2b prikazuje prva tri nivoa za LH. Vidi se da je za osnovni nivo najveća vjerojatnost pronalaska šupljine u sredini. Viši nivoi imaju sve veću dostupnu energiju i raste vjerojatnost pronalaska šupljine uz oksid. I za HH i za LH možemo reći da povećanjem energije šupljina dobiva mogućnost pronalaska na



Slika 4.2: Kvadrati valnih funkcija  $\phi_{v,n}(z)$  za prva tri energetska nivoa unutar potencijalne jame  $U(z)$ . Tanka linija prikazuju oblik potencijalne jame a deblje linije kvadrate valnih funkcija.  $T_{Ge} = 20$  nm,  $V_G = 1.5$  V.

većem prostoru od osnovnog nivoa.

Slika 4.3 prikazuje utjecaj promjene debljine germanija na valnu funkciju sa napona kao parametrom. Na slici 4.3a se vidi da je za šire  $T_{Ge}$  valna funkcija koncentri-



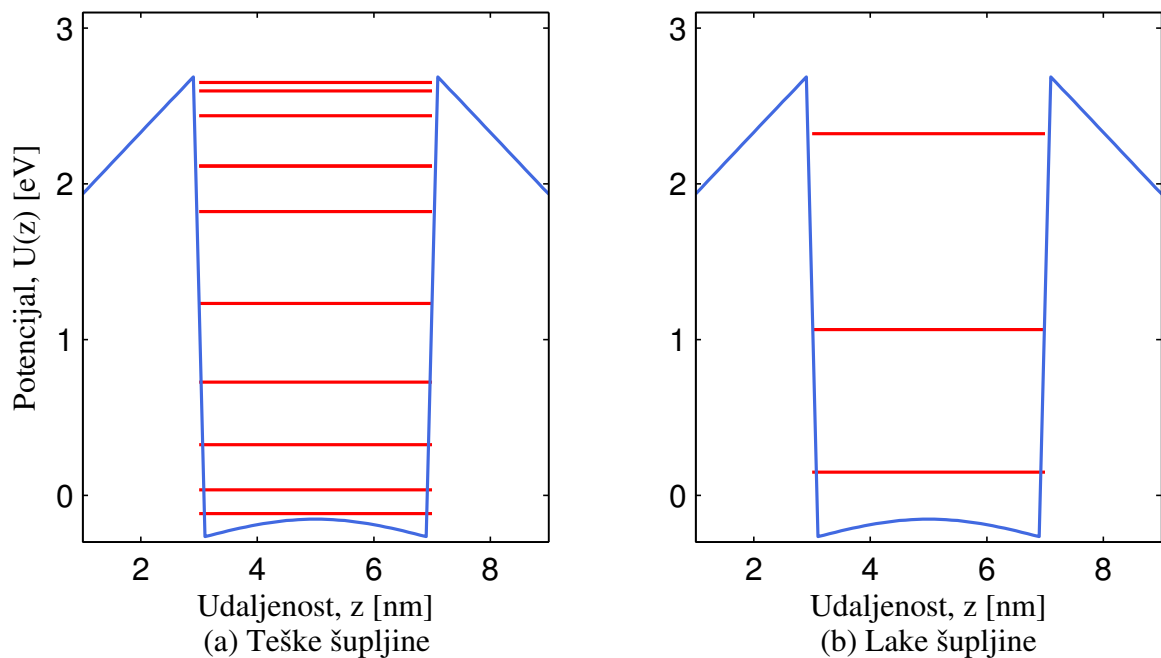
Slika 4.3: Kvadrati valnih funkcija  $\phi_{HH,1}(z)$  prvog energetskeg nivoa unutar potencijalne jame  $U(z)$  za pojas HH i više napona  $V_G$ . Tanke linije prikazuju oblik potencijalne jame a deblje linije kvadrate valnih funkcija.

rana uz okside, pogotovo za više napone. To je u skladu sa prehodnim razmatranjima ali ovdje je vidljiva razlika jer je  $T_{Ge} = 18$  nm. Usporedbom sa slikom 4.1a je vidljivo

da su čak i za malo smanjenje od 2 nm maksimumi valnih funkcija niži i pomaknuti prema središtu. Valne funkcije postaju koncentrirane prema sredini Ge sloja kod tanjih slojeva kao što je vidljivo na slici 4.3b. Modulacija naponom postaje puno manje izražena za tanje slojeve te geometrija postaje glavna veličina koja određuje oblik valne funkcije. Identična stvar se događa i za više energetske nivoe. Sličan rezultat se dobije i za pojas LH i SO, samo su njihove valne funkcije već koncentrirane u središtu kao na slici 4.1b pa promijena izazvana stanjivanjem Ge nije toliko izražena kao kod HH.

## 4.2 Energetski nivoi

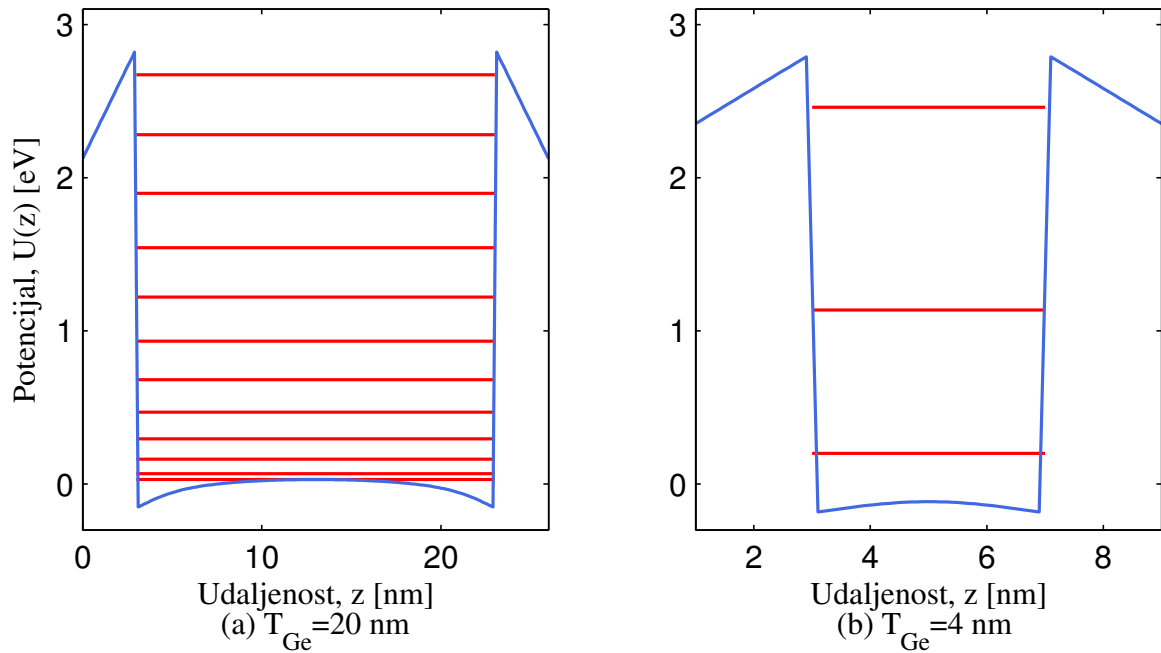
U potpoglavlju 2.2.3 je bilo govora o očekivanim svojstvima svojstvenih energija na temelju relacije (2.17) koja opisuje energetske nivoe čestice unutar beskonačne potencijalne jame. Utjecaj različitih pojaseva na energetske nivoe  $\varepsilon_{\nu,n}$  unutar potencijalne jame koja nastaje zbog  $\text{SiO}_2\text{-Ge-SiO}_2$  strukture se vidi na slici 4.4. Energetski



Slika 4.4: Energetski nivoi  $\varepsilon_{\nu,n}$  različitih pojaseva unutar potencijalne jame.  $T_{Ge} = 4$  nm,  $V_G = 1.5$  V.

nivoi za pojas HH su prikazani na slici 4.4a. Vidi se da pojas HH ima veći broj nivoa u odnosu na pojas LH prikazan na slici 4.4b kao i manji razmak između njih. Glavni uzrok je velika razlika u masi između HH i LH. Zasad vidimo poklapanje sa svojstvima iz izraza (2.17).

Energetski nivoi pojasa LH za različite debljine Ge sloja su prikazan na slici 4.5. Izabaran je pojas LH jer se za pojas HH javlja velik broj nivoa pa prikaz nije pregledan. Navedeno je u skladu sa razmatranjima uz sliku 4.4. Međutim sva razmatranja što se tiče utjecaja debljine na pojas LH se mogu primjeniti i na pojas HH. Energetski nivoi



Slika 4.5: Energetski nivoi  $\varepsilon_{LH,n}$  za pojas LH unutar potencijalne jame za dvije debljine. Plavom bojom je opisan potencijal a crvenom su označeni energetski nivoi.  $V_G = 0.9$  V.

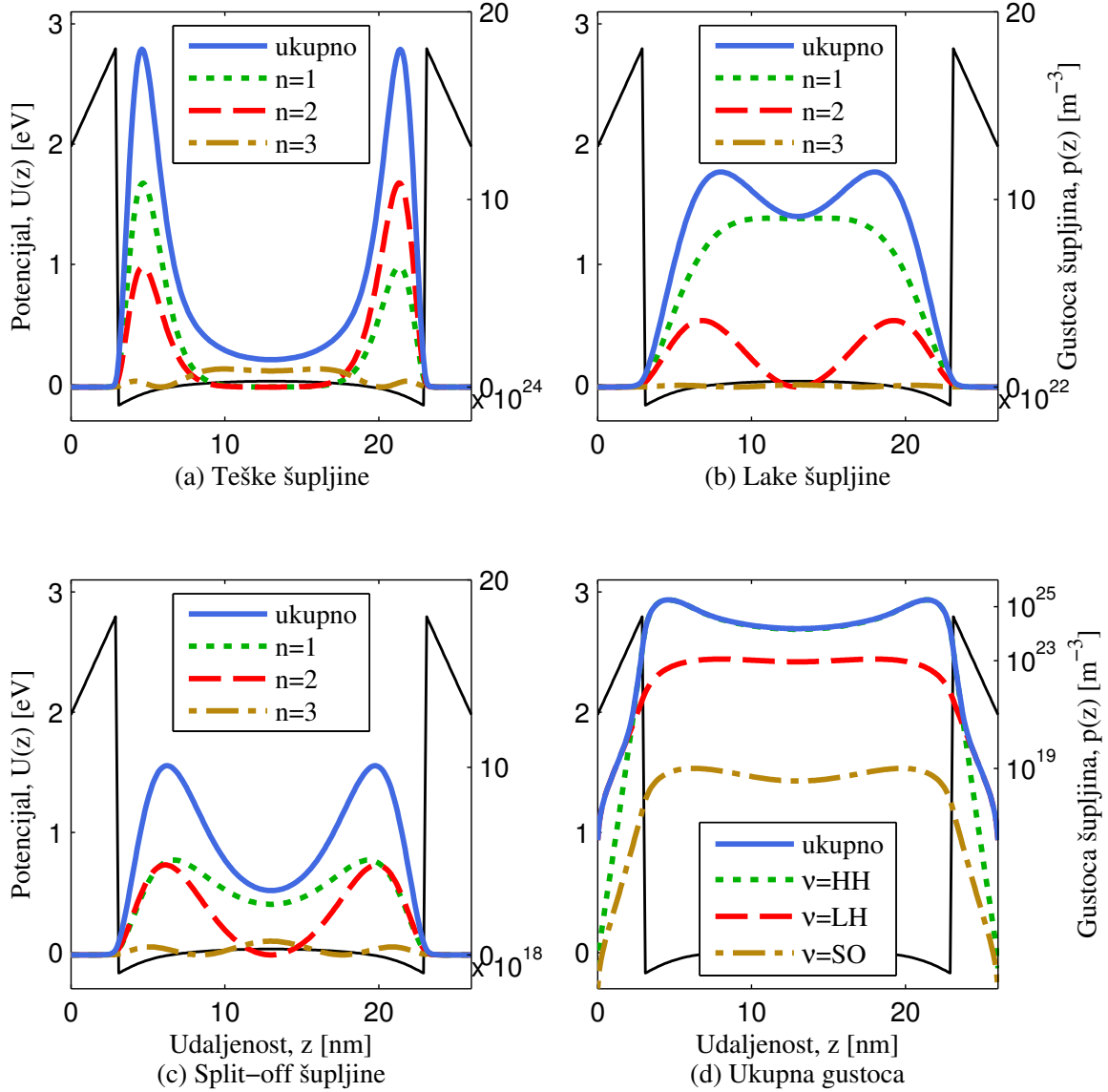
pojasa LH za  $T_{Ge} = 20$  nm su prikazani na slici 4.5a. Ukoliko se uspoređi sa slikom 4.5b gdje je  $T_{Ge} = 4$  nm vidi se da je broj stanja manji i razmaci između nivoa su veći za uže slojeve. Sva navedena razmatranja su u skladu sa jednadžbom (2.17).

Usporedbom slike 4.4b gdje je  $V_G = 1.5$  V i 4.5b gdje je  $V_G = 0.9$  V može se promotriti utjecaj napona na pojedini pojas. Za veće napone spušta se vrh i dno potencijalne jame. Stoga su i energetski nivoi spuštani što je nalakše uočiti na slici za  $n = 2$ . Za  $V_G = 1.5$  V je  $\varepsilon_{LH,2} = 1.06$  eV a za  $V_G = 0.9$  V je  $\varepsilon_{LH,2} = 1.14$  eV. Pomak, broj nivoa i razmak između stepenica se bitno ne mijenja, što će biti vidljivije prilikom opisa relaksacijskih vremena u potpoglavlju 5.2. Navedena svojstva se mogu pokazati i za druge pojaseve.

### 4.3 Distribucija volumne gustoće šupljina

Koristeći valne funkcije šupljina u  $z$ -smjeru i energetske nivoe koji se dobiju numeričkim rješavanjem (2.12), pomoću (2.20) dolazi se do volumne gustoće šupljina  $p(z)$ . Preko (2.22) se dolazi do inverzijske gustoće šupljina u kanalu  $P_{inv}$ .

Volumna koncentracija šupljina svakog pojasa pojedinačno prikazana je na slici 4.6a-c, ukupna volumna koncentracija šupljina na 4.6d za  $T_{Ge} = 20$  nm,  $V = 1.05$  V. Slika 4.6a prikazuje volumnu gustoću za pojas HH i nekoliko prvih energetskih nivoa. Usporedbom gustoće prva dva nivoa sa slikom 4.2a vidi se da je prostorna ovisnost gustoće u potpunosti nasljeđena od valnih funkcija kao što je i za očekivati zbog formule (2.20). Usporedbom svih nivoa vidi se sve manja koncentracija šupljina za više energetske nivoe. Gustoća dostupnih stanja iz (2.20) je konstantna jer se



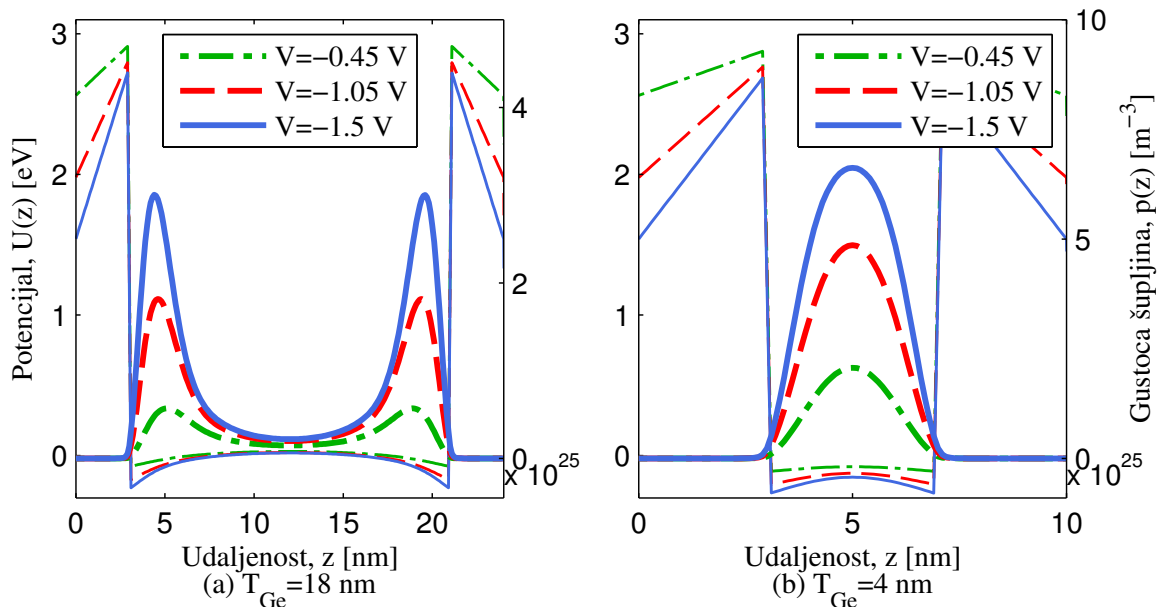
Slika 4.6: Od (a) do (c) su prikazane ukupne volumne gustoće  $p_{\nu}(z)$  za pojedine pojaseve zajedno sa gustoćama  $p_{\nu,n}(z)$  za nekoliko prvih nivoa  $n$ . Na (d) je prikazana ukupna volumna gustoća šupljina  $p(z)$  zajedno sa volumnom gustoćom za pojedini pojas  $p_{\nu}(z)$ . Potencijal  $U(z)$  je na svim slikama prikazan crnom linijom. Skala na desnoj osi je logaritamska radi lakše vidljivosti velike razlike u koncentracijama među pojasevima.  $T_{Ge} = 20$  nm,  $V = 1.05$  V.

radi od 2D sustavu, opis je dan u dodatku B.1. Vjerojatnost zaposjednuća viših stanja zbog Fermi-Diracove raspodjele pada i koncentracija šupljina viših nivoa naglo opada. Ukupna koncentracija šupljina za pojas HH je gotovo u potpunosti određen sa doprinosom prva tri nivoa te je lokalizirana oko oksida kao i valne funkcije. Slična svojstva nivoa za pojas LH se vide na slici 4.6b. Bitna razlika od HH je manja koncentracija za 2 reda veličine; vidljiv je utjecaj manje mase LH u odnosu na HH koja linearno preko formule (2.21) ulazi u volumnu gustoću. Glavnina šupljina se nalazi u sredini kanala. Masa SO je između masa HH i LH pa je i oblik raspodjele,

prikazan na slici 4.6c, dijeli svojstva sa raspodjelom za pojas HH i LH. Prisutne su šupljine u sredini kanala, međutim minimum za pojas SO je izraženiji nego za pojas LH. Maksimumi za pojas SO nalaze se bliže oksidima, ali ne toliko izraženo kao i kod HH. Koncentracija šupljina je iznimno mala, za 6 redova veličine manja u odnosu na pojas HH. Razlog se vidi na slici 2.3b, pojas SO je pomaknut za  $E_{SO} = 0.29$  eV pa Fermi-Diracova raspodjela iznimno smanjuje koncentraciju. U izrazu (2.21) član u eksponentu uz pomake za nivoe  $\varepsilon_{SO,n}$  ima i pomak za pojas  $E_{SO}$  čime se još više udaljavamo od Fermijevog nivoa. Za sve pojaseve, dominantni je doprinos prvih nivoa te koncentracija šupljina viših nivoa naglo opada. Prikazan je izuzetno mali doprinos SO pojasa, koji se u pravilu može zanemariti i često se izuzima iz razmatranja. Podaci se mogu slično prikazati i preko inverzijske gustoće (2.22), o čemu će više govora biti kasnije.

Ukupna gustoća šupljina je prikazana na 4.6d. Desna  $y$ -os je prikazana na logaritamskoj skali radi jasnijeg prikaza doprinosa gustoća različitih pojasa u ukupnoj gustoći šupljina. Vide se već navedene razlike u redovima veličine između pojedinih pojaseva. Gotovo u potpunosti populaciju šupljina čine HH. Na slici je linija  $p_{HH}(z)$ , označena zelenom bojom, u potpunosti ispod linije  $p(z)$ , označene plavom bojom, u području Ge.

Utjecaj napona i debljine Ge za gustoće šupljina  $p(z)$  je prikazan na slici 4.7. Valne funkcije kod debljih slojeva su lokaliziranije uz oksid sa porastom napona što



Slika 4.7: Raspodjela gustoće šupljina  $p(z)$  unutar germanijskog sloja za dvije debljine. Tanke linije prikazuju oblik potencijalne jame a deblje linije gustoću. Naponi su prikazani kao parametri.

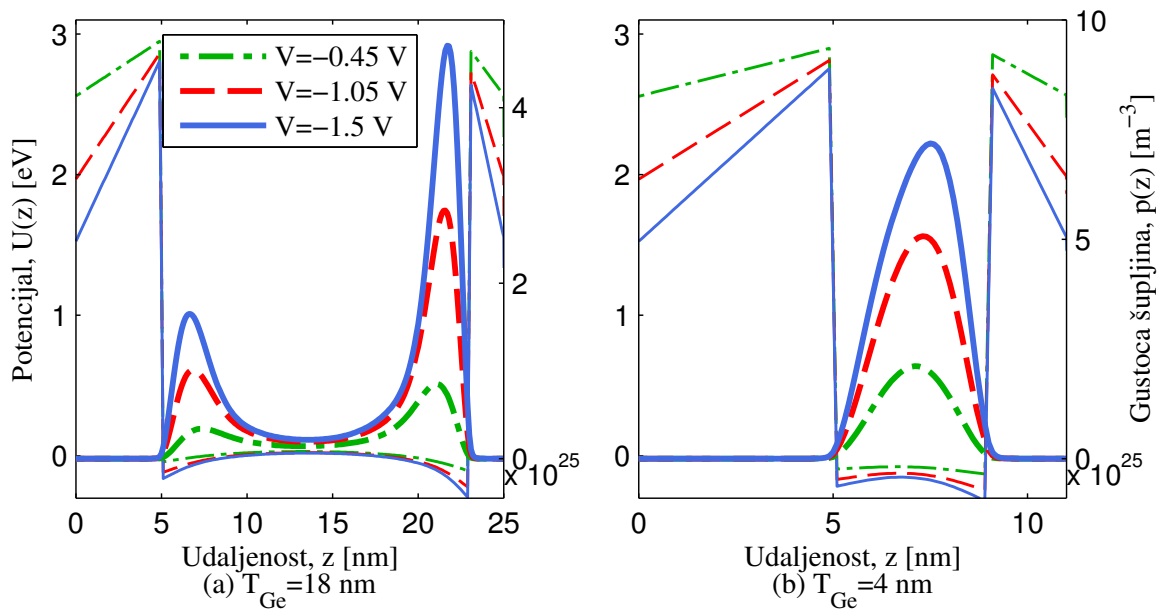
se vidi na slici 4.3a. Isto svojstvo se prenosi i na gustoću šupljina prikazanu na 4.7a za  $T_{Ge} = 18$  nm i više napona. Veći napon inducira veći broj šupljina u kanalu i lokalizira ih na slojeve uz oksid. Kod tanjih slojeva valne funkcije su lokalizirane

sredinom kanala kao što je i prikazano na slici 4.3b. Opet vidimo da se isto svojstvo prenosi na ukupnu gustoću šupljina prikazanu za  $T_{Ge} = 4$  nm i više napona.

U oba slučaja se vidi povećanje broja šupljina povećanjem napona. Međutim prostorna raspodjela nije jednaka. Možemo generalizirati da je kod debljih slojeva gustoća šupljina najveća uz oksid a kod tanjih slojeva u sredini kanala.

#### 4.4 Utjecaj asimetrije

Debljina oksida,  $\text{SiO}_2$  u ovom slučaju, ima direktni utjecaj na valne funkcije i gustoću šupljina. Za slijedeće rezultate debljine oksida su promjenjene i iznimno u ovom potpoglavlju iznose  $T_{O1} = 5$  nm i  $T_{O2} = 2$  nm. Rezultati samosuglasnog računa su prikazan na slici 4.8 za dvije debljine germanija  $T_{Ge} = 18$  nm i  $T_{Ge} = 4$  nm. Rezultati



Slika 4.8: Raspodjela gustoće šupljina  $p(z)$  unutar germanijskog sloja za dvije debljine germanija  $T_{Ge} = 18$  nm i  $T_{Ge} = 4$  nm sa asimetričnim debljinama  $\text{SiO}_2$   $T_{O1} = 5$  nm i  $T_{O2} = 2$  nm. Tanke linije prikazuju oblik potencijalne jame a deblje linije gustoću. Za oba grafa naponi su jednaki i prikazani su kao parametri. Pojas je HH.

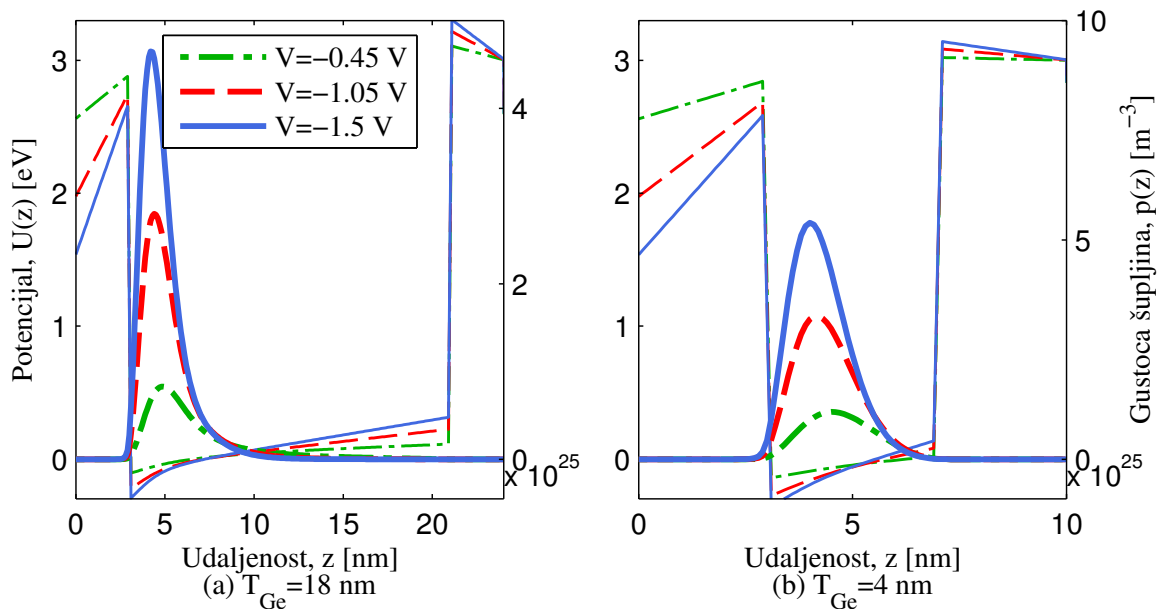
su prikazani za volumne gustoće šupljina ali na temelju dosadašnjih slika možemo zaključiti i neka svojstva o valnim funkcijama. Električno polje uzrokovano naponom na upravljačkoj elektrodi lakše prodire kroz tanji oksid te ga šupljine više osjete. Gustoća šupljina slijedi prostornu raspodjelu valnih funkcija; uz tanji sloj oksida se nalazi veća koncentracija šupljina. Svojstvo je izraženije za deblje slojeve germanija prikazane na slici 4.8a. Razlog se vidi na slici 4.3a. Valne funkcije širih slojeva germanija su podložnije naponskoj modulaciji pa i je raspodjela šupljina gušća uz tanji sloj oksida gdje je vanjsko polje jače. Za tanje slojeve germanija na slici 4.8b se vidi da je prostorna raspodjela pomaknuta ali ne tako drastično kao za  $T_{Ge} = 18$  nm. Razlog se vidi na slici 4.3b gdje se vidi da valna funkcija kod tanjih slojeva germanija nema

izraženu modulaciju naponom. Stoga ni gustoća šupljina nema velika odstupanja u gustoći za različite debljine okside kao za slučaj na slici 4.8a.

Kod pretankih oksida valna funkcija dobiva nezanemarive vrijednosti blizu upravljačke elektrode. Može se javiti tunelirajuća struja što ima negativni utjecaj na rad tranzistora. Realna veličina oksida u današnjim MOSFET-ima je u nanometarskim dimenzijama, za te veličine valna funkcija dovoljno brzo trne u oksidu.

#### 4.5 Volumna gustoća u uređajima sa jednom upravljačkom elektrodom

U dodatku A je opisana razlika u arhitekturi između slučajeva sa jednom i dvije upravljačke elektrode. Za daljnji opis u ovom potpoglavlju dovoljno je znati: za slučaj sa jednom upravljačkom elektrodom napon se primjenjuje samo na jednom oksidnom sloju. Rezultati su prikazani na slici 4.9. Vidi se da je raspodjela šupljina kod sloja



Slika 4.9: Raspodjela gustoće šupljina  $p(z)$  unutar germanijskog sloja za dvije debljine germanija  $T_{Ge} = 18$  nm i  $T_{Ge} = 4$  nm. Tanke linije prikazuju oblik potencijalne jame a deblje linije gustoću. Za oba grafa naponi su jednaki i prikazani su kao parametri. Pojas je HH a broj upravljačkih elektroda je 1.

$T_{Ge} = 18$  nm prikazanog na slici 4.9a lokalizirana uz oksidni sloj na kojem je primjenjen napon već i za  $V = -0.45$  V. Povećanjem napona na  $V = -1.5$  V samo se povećava gustoća induciranih šupljina. Za tanji sloj od  $T_{Ge} = 4$  nm prikazan na slici 4.9b se vidi da gustoća nema toliko izraženu prostornu lokalizaciju uz oksid pod naponom i šupljine su rasprostranjene i u sredini kanala.



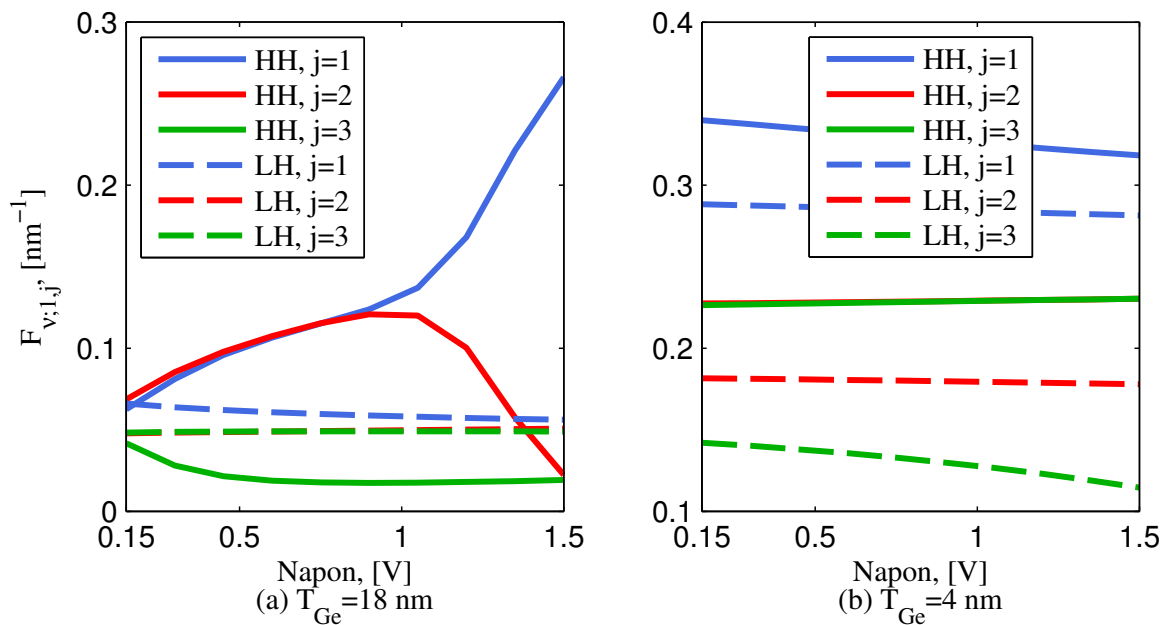
## 5 Rezultati pokretljivosti šupljina

Kroz ovo poglavlje se promatra kako veličine prikazane u prošlom poglavlju utječu na pokretljivost šupljina. Postiže se veza između mikroskopskih veličina sa mjerljivim makroskopskim veličinama. U 5.1 posebno su povezani oblici valnih funkcija za različite debljine i napone sa form faktorima. Kako se svojstva FF prenose na relaksacijska vremena za pojedine pojaseve, napone i debljine opisano je kroz potpoglavlje 5.2. Utjecaj debljine Ge na pokretljivost je objašnjen preko geometrijski ili poljem izazvanog zatočenja u potpoglavlju 5.3. Zanimljiv utjecaj lakih šupljina koje i sa malim udjelom u ukupnoj populaciji doprinose ukupnoj pokretljivosti je objašnjen u potpoglavlju 5.3. Pokretljivosti u uređaju sa jednom upravljačkom elektrodom i usporedba sa uređajima sa dvije upravljačke elektrode su predstavljene u 5.5.

### 5.1 Preklapanje valnih funkcija - form faktor

FF je jedna od glavnih veličina u izrazima za računanje impulsnog relaksacijskog vremena (MRT) za raspršenja na akustičkim fononima (AP-MRT) (3.9) i optičkim fononima (OP-MRT) (3.13) koji ulaze u račun za pokretljivost pojedinih pojasa i nivoa u (3.15). Teorijska razmatranja FF su bila predstavljena u potpoglavlju 3.2.

Prikaz utjecaja napona na FF za pojaseve HH i LH sa različitim debljinama  $T_{Ge}$  je prikazan na slici 5.1. Promatrat će se  $F_{\nu;1,j}$  za prijelaze u prvi nivoa iz svih ostalih.



Slika 5.1:  $F_{\nu;1,j}$  u ovisnosti o naponu za  $T_{Ge} = 18$  nm i  $T_{Ge} = 4$  nm. Parametri  $(\nu; 1, j)$  označavaju pojas  $\nu$  i preklapanje funkcije  $j$  sa prvim nivo. Punim crtama je prikazan pojas HH a isprekidanim pojas LH.

Prvi nivo je odabran jer ima najveći udio u populaciji za svaki pojas kao što je prikazano na slici 4.6. Samim time ima najviše utjecaja na pokretljivost zbog velikog

težinskog udjela u ukupnoj populaciji koja se računa preko (3.16).

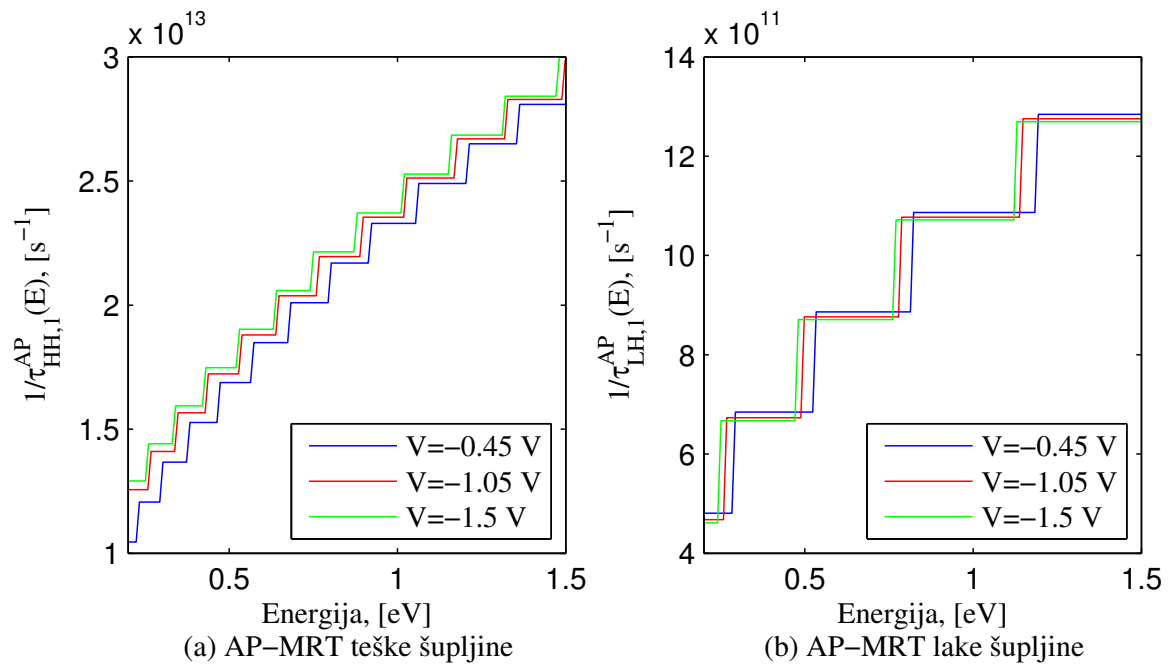
Ukoliko promotrimo izdvojeno sliku 5.1a za  $T_{Ge} = 18$  nm vidi se zanimljivo ponašanje u pojasu HH. Sa povećanjem napona do oko  $V_G = 1$  V stanja  $F_{HH;1,1}$  i  $F_{HH;1,2}$  skupa rastu. Vraćanjem na sliku 4.1a i 4.2a vidi se da su za manje napone  $|\phi_{HH,1}|^2$  i  $|\phi_{HH,2}|^2$  prostorno rasprostranjeni na istom području. S povećanjem napona povećava se i vrh  $|\phi_{HH,j}|^2$  što dovodi do rasta FF u pojasu HH za  $j = 1, 2$ . Međutim za napone iznad  $V_G = 1$  V događa se prostorno razdvajanje nivoa  $j = 1, 2$  koja se lokaliziraju kraj suprotnih oksida te se smanjuje preklap. Zato  $F_{HH;1,1}$  još više raste a  $F_{HH;1,2}$  počinje padati.  $F_{HH;1,3}$  nema izraženu naponsku modulaciju i manji je od prva dva FF jer je preklapanje  $|\phi_{HH,1}|^2$  i  $|\phi_{HH,3}|^2$  malo za svaki napon. Time je objašnjeno kako napon modulira FF u debljim slojevima za pojas HH. Pojas LH također nema naponsku modulaciju. Kvadrati valnih funkcija  $|\phi_{LH,1}|^2$  za pojas LH su prikazani na slici 4.1b za više napona. Vidi se da valna funkcija LH nema izraženu naponsku modulaciju kao HH. Ne događaju se veoma izražene lokalizacije uz samo jedan oksid kao za pojas HH i preklapanja su minimalno promijenjena naponom.

FF za tanji sloj  $T_{Ge} = 4$  nm je prikazan na 5.1b. Pozivanjem na raniju sliku 4.3b vidi se da je kod tanjih slojeva modulacija naponom na valnu funkciju puno manja nego za deblje slojeve. Raspodjela valnih funkcija za sve pojaseve je primarno određena geometrijom. Isto svojstvo se prenosi i na FF koji ima slabije izraženu modulaciju naponom u tanjim slojevima. Ukoliko usporedimo  $F_{HH;1,j}$  i  $F_{LH;1,j}$  vidljivo je da za  $j = 1$  imamo maksimalno preklapanje dok je za  $j = 2, 3$  manje. To je u skladu sa slikom 4.2b gdje se vidi da viši nivoi imaju sve više čvorova pa se gubi prostorno preklapanje valnih funkcija međusobno različitih nivoa. Iako je slika 4.2b prikazana za  $T_{Ge} = 20$  nm, isto svojstvo se pojavljuje i za tanje slojeve.

## 5.2 Impulsno relaksacijsko vrijeme

Svojstvene valne funkcije i energije iz samosuglasnog Schrödinger-Poissonovog simulatora se koriste prilikom izračuna MRT za raspršenja na akustičkim fononima (AP) i optičkim fononima (OP). Rezultati MRT računa za prvi nivo i  $T_{Ge} = 15$  nm su prikazana na slici 5.2 za AP.

AP-MRT za pojas HH su prikazana na slici 5.2a. Vremena općenito idu do  $1/\tau_{HH,1}^{AP} \approx 4 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$  za energije pri vrhu potencijalne jame. Vrh je na oko 2.5 – 3 eV, i ovisi o naponu kao što je rečeno u potpoglavlju 4.2. Radi jasnoće je prikazan samo dio za  $E = 0.2 - 1.5$  eV. Vide se stepenice iz Heavisideove funkcije u izrazu (3.9) koje potječu od gustoće stanja 2D fermionskog plina u (2.19). Sa porastom napona vidi se da inverzna vremena rastu, odnosno da se MRT smanjuje. Veći naponi ubrzavaju šupljine na veće brzine, tj. na veće energije što dovodi do kraćeg vremena života zbog češćih sudara s fononima. Ukoliko se pogleda oblik valnih funkcija na slici 4.1a vidi se da se povećanjem napona valne funkcije za pojas HH izoliraju više uz oksid i povećava im se vrh. To dovodi do većeg FF koji preko jednadžbe (3.9) smanjuje AP-



Slika 5.2: Inverzna relaksacijska vremena pojas HH i LH za raspršenja na akustičkim fononima. Naponi su prikazani kao parametar. Indeksi HH,1 označavaju pojas HH i vrijeme života prvog nivoa a LH,1 označava pojas LH i vrijeme života prvog nivoa.  $T_{Ge} = 15$  nm.

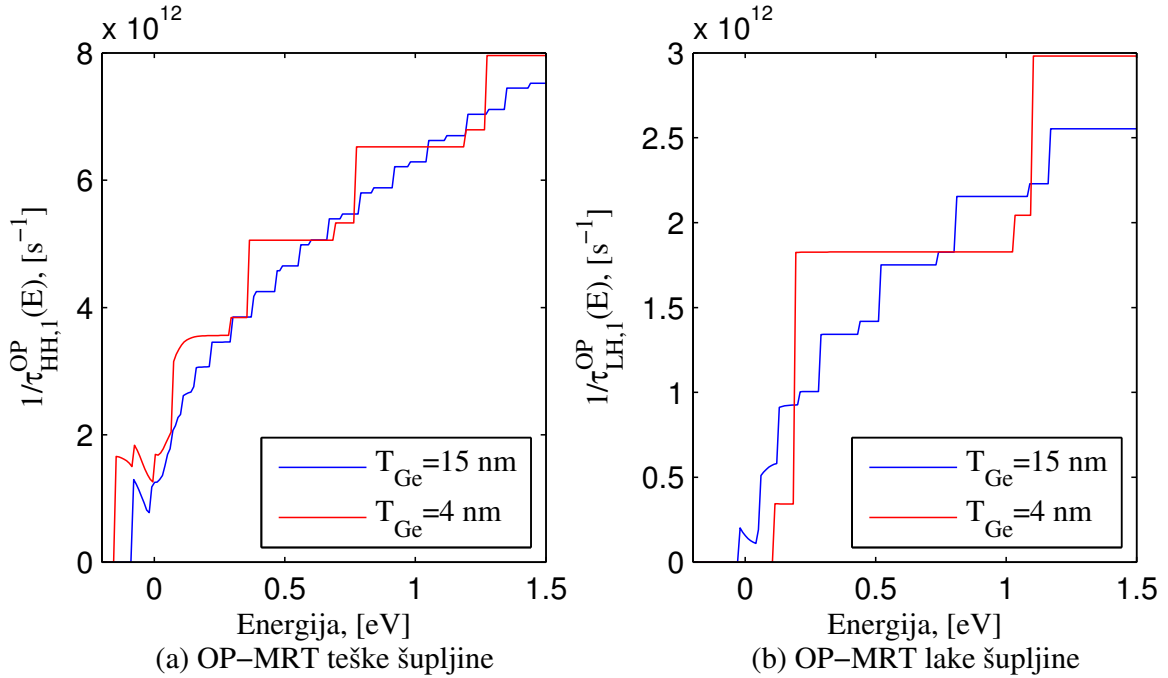
MRT za veće napone. Treba napomenuti da se to ne događa nužno i za valne funkcije viših energetske nivoa čiji maksimumi nisu nužno lokalizirani uz oksid. Nije navedeno na slikama ali npr.  $F_{HH;3,3}$  ima pad za povećanje napona kod debljih slojeva. Međutim udio viših nivoa je nizak kao što je vidljivo na slici 4.2 pa takvo ponašanje nije previše od praktičnog interesa u ovom slučaju.

AP-MRT za pojas LH je prikazana na slici 5.2b. Vremena općenito idu do  $1/\tau_{LH,1}^{AP} \approx 2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$  za energije pri vrhu potencijalne jame. Manja masa LH u odnosu na HH koja ulazi linearno u 3.9 dovodi do manjih inverznih vremena. Ponovno radi jasnoće je prikazan samo dio. Energije su iste kao kod prikaza za pojas HH,  $E = 0.2 - 1.5$  eV, da bi imali referentnu usporedbu za različite pojaseve. Manji je broj stepenica, što je u skladu sa obrazloženjem uz izraz (2.17) i potpoglavlje 4.2. Manja masa dovodi do manjeg broja energetskih nivoa u jami pa posljedično i manjeg broja stepenica. Međutim, različito od predhodnog objašnjenja za HH, kod LH se vidi da su inverzna vremena manja za veći napon. AP-MRT za pojas LH raste s naponom. Razlog se vidi na slici 4.1b. Povećanjem napona valna funkciju prvog nivo LH, tj. njen kvadrat  $|\phi_{LH,1}|^2$  se širi u prostoru i smanjuje joj se vrh;  $F_{LH;1,1}$  se smanjuje i AP-MRT raste preko (3.9).

Pomaci u lijevo Heavisideovih funkcija na oba crteža u 5.2 za povećanje napona prikazuje kako se za veće napone snižavaju energetske nivoi. Navedeno svojstvo je bilo opisano u potpoglavlju 4.2 a sad je i jasnije prikazano na slici 5.2. Odstupanje od savršene Heavisideove funkcije prema nagnutom obliku je radi konačnog koraka

u energiji prilikom numeričkog dijela računa.

Raspršenja na OP, tj. pripadna MRT u ovisnosti o energiji izračunata preko (3.13) se vide na slici 5.3. Za primjer su opet prikazani rezultati prvog nivoa pojasa HH i



Slika 5.3: Inverzna relaksacijska vremena pojasa HH i LH za raspršenja na optičkim fononima. Debljine su prikazane kao parametar. Indeksi HH,1 označavaju pojas HH i vrijeme života prvog nivoa a LH,1 označava pojas LH i vrijeme života prvog nivoa.  $V_G = 1.5$  V.

LH za napon  $V_G = 1.5$  V. Raspon prikazanih energija je širi od raspona na slici 5.2. Vidljivo na  $x$ -osi raspon iznosi  $E = -0.2 - 1.5$  eV, i odabran je da bi vidjeli detaljnije što se događa oko Fermijevog nivoa na 0 eV. Bitna razlika u odnosu na AP-MRT se vidi za stanja nižih energija i kod HH i kod LH. Ukoliko se usporede izrazi (3.9) i (3.13), OP-MRT ima kompliciraniji dio kojim je opisano neelastično raspršenje. Izraz (3.13) ima član ovisan o energiji koji sadrži Bose-Einsteinovu (fononi su bozoni) i Fermi-Diracovu (šupljine su fermioni) raspodjelu. Posljedica je odstupanje od Heavisideove funkcije za niže energije; viši nivoi se nalaze daleko od Fermijevog nivo te OP-MRT dobiva oblik Heavisideove funkcije. Još jedna razlika dolazi radi mogućnosti emitiranja ili apsorpcije fonona. Oko svake stepenice Heavisideove funkcije koja bi se pojavljivala za AP-MRT javljaju se dva dodatna nivoa pomaknuta za energiju optičkog fonona  $\pm E_{OP}$ . Opet je vidljiv veći broj i gušća raspodjela stanja kod OP-MRT za HH na slici 5.3a u odnosu na OP-MRT za LH na slici 5.3b radi razlike u masi. Utjecaj debljine germanijskog sloja je kvalitativno vidljiv u izrazu (2.17). Smanjenjem  $T_{Ge}$  dovodi do većeg razmaka, a pošto je jama konačne dubine i manjeg broja energetskih stanja. Svojestvo je vidljivo na obje slike 5.3 preko manjeg broja stepenica Heavisideovih funkcija.

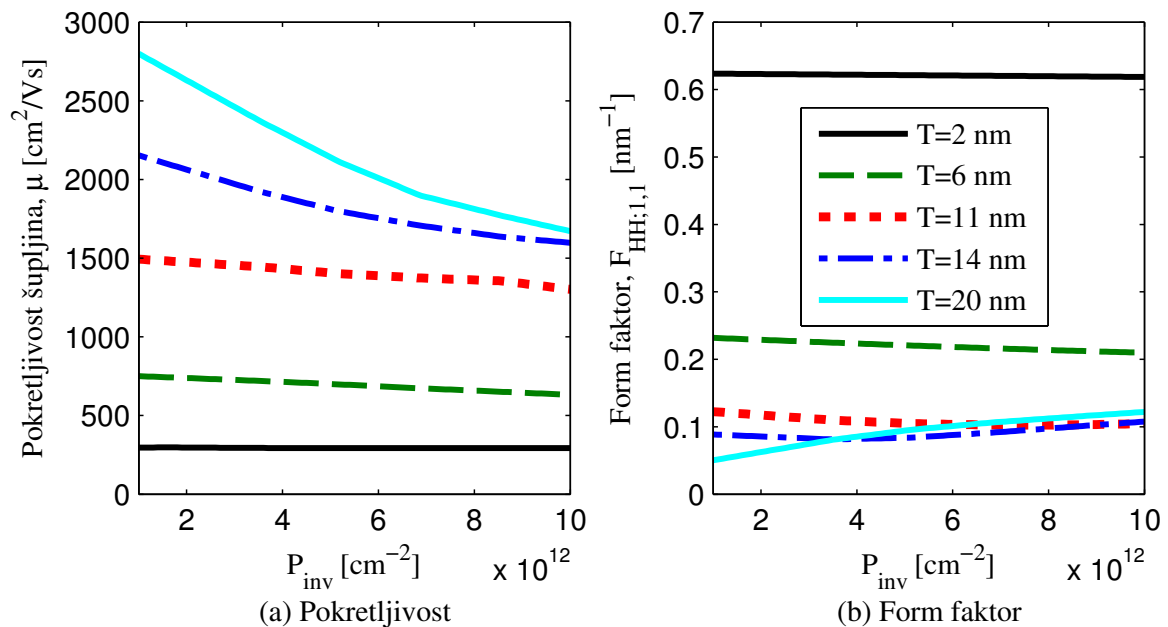
Raspršenja na AP i OP se gledaju kao međusobno nezavisni događaju. Izračunata

MRT se preko Matthiessenovog pravila (3.14) kombiniraju u jedinstveno relaksacijsko vrijeme za pojedini pojas i nivo s kojim se onda dalje računa pokretljivost.

### 5.3 Pokretljivost i utjecaj debljine germanija

Pokretljivosti za pojedine pojaseve i nivoe su računate preko Kubo-Greenwood formule (3.15). Ovisnost o težinskom udjelu pojedinog pojasa šupljina u ukupnoj populaciji je izražena u (3.16). Preko nje se računa ukupna pokretljivost, koja sadrži doprinos od svih pojasevi i nivoa za šupljine u germaniju. U prethodnom dijelu teksta utjecaj napona se izražavao direktno vrijednošću napona na upravljačkoj elektrodi. Za svaki napon se preko (2.22) može izračunati plošna gustoća induciranog napona u germanijskom kanalu. Kako bi se olakšala usporedba sa drugim materijalima i strukturama, prelazi se na prikaz podataka gdje inverzijska gustoća postaje direktan parametar koji indirektno ukazuje na napon.

Ovisnost pokretljivosti šupljina o inverzijskoj gustoći je prikazana na slici 5.4a sa nekoliko debljina germanija  $T_{Ge}$  kao parametrom. Jasno se vidi pad pokretljivosti sa



Slika 5.4: Pokretljivosti šupljina i FF u ovisnosti o inverzijskoj gustoći. Za oba grafa debljine germanijskog sloja su prikazane kao parametar od 2 do 20 nm .

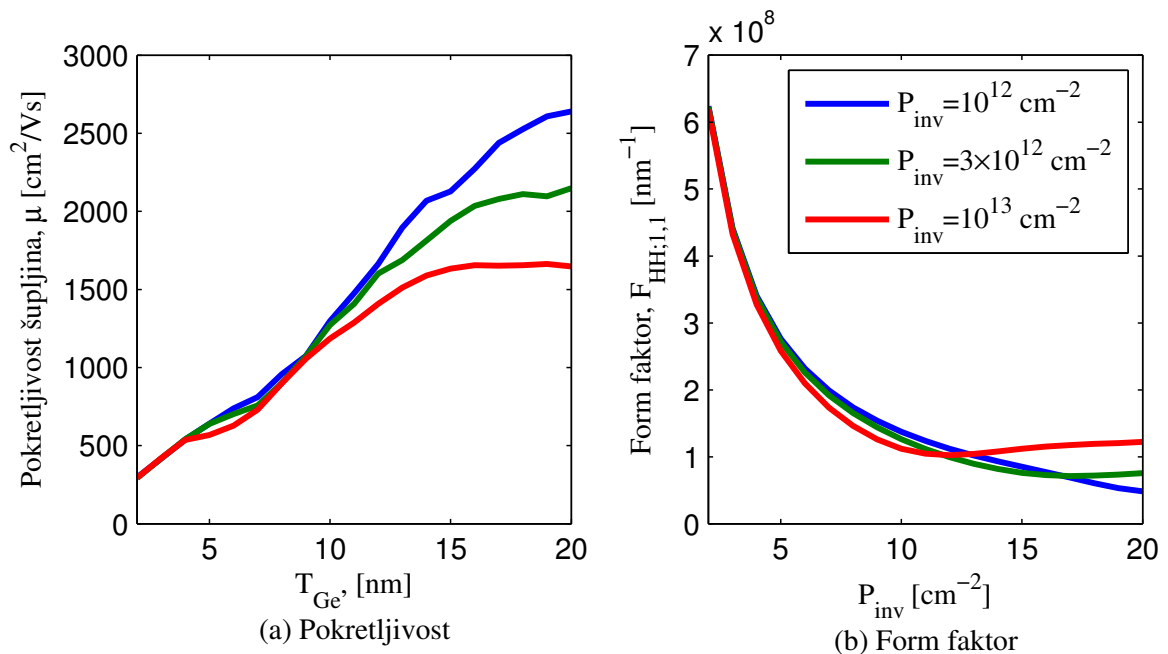
smanjenjem  $T_{Ge}$ . Deblji slojevi,  $T_{Ge} > 11$  nm, posjeduju inverzijsku modulaciju koju izaziva vanjsko polje. Za  $T_{Ge} = 20$  nm mobilnost opada za 38% od  $P_{inv} = 3 \times 10^{12}$   $\text{cm}^{-2}$  do  $P_{inv} = 10^{13}$   $\text{cm}^{-2}$ . Mobilnost u tanjim slojevima,  $T_{Ge} < 11$ , je skoro konstantna i određena jedino  $T_{Ge}$ , tj. geometrijom Ge sloja. Za objašnjenje navedenih podataka dva važna efekta se moraju razmotriti, zatočenje izazvano poljem i zatočenje izazvano geometrijom.

Veza između FF i  $P_{inv}$  je prikazana na slici 5.4b; sjetimo se da FF opisuje koliko se vjerojatnosti pojedinih šupljina preklapaju. Vidljivo na slici 4.7a, šupljine su više

izolirane uz oksid za deblje slojeve Ge. Dominira zatočenje izazvano poljem uz sloj oksida za veće napone, a posljedično i za veće  $P_{inv}$ . Utjecajem vanjskog napona, odnosno promjenom  $P_{inv}$  može se modulirati FF. Za  $T_{Ge} = 20$  nm FF padne za 39% sa  $P_{inv} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  na  $P_{inv} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Također, za velike inverzije, oko  $P_{inv} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  FF je praktički isti za  $T_{Ge}$  od 11 do 20 nm. Ovo je dokaz zatočenja izazvanog poljem za deblje slojeve, gdje se šupljine sve više lokaliziraju blizu oksida sa povećanjem napona.

Kod tanjih slojevi FF je konstantan za  $P_{inv}$  i raste sa smanjenjem  $T_{Ge}$ . Slika 4.7b pokazuje kako su u tanjim slojevima šupljine većinom lokalizirane u sredini kanala. Iznos FF je određen sa  $T_{Ge}$ , odnosno geometrijom strukture pa takav slučaj naziva zatočenje izazvano geometrijom. Pozivanjem na objašnjenje uz sliku 4.3 vidi se da oblik valnih funkcija ima modulaciju naponom za deblje slojeve a praktički nema za tanje slojeve; isto svojstvo se prenosi i na FF. Veći FF u izrazima (3.9) i (3.13) smanjuje MRT koji zauzvrat smanjuje  $\mu$  preko izraza (3.15); na isti način smanjenje FF povećava  $\mu$ . Zaključak je da modulacija pokretljivosti naponom potječe od modulacije FF. Sa slike 5.4 to je vidljivo kako se poklapaju debljine koje imaju modulaciju  $\mu$  i FF sa inverznom gustoćom.

Utjecaj debljine na mobilnost šupljina je prikazan na slici 5.5a. Inverzijske gustoće su navedene kao parametri. Vidi se da smanjenjem  $T_{Ge}$  sa 20 na 2 nm mobilnost pada



Slika 5.5: Pokretljivosti šupljina i FF u ovisnosti o debljini germanijskog sloja. Za oba grafa inverzijska gustoća je prikazana kao parametar od  $P_{inv} = 1, 3, 10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

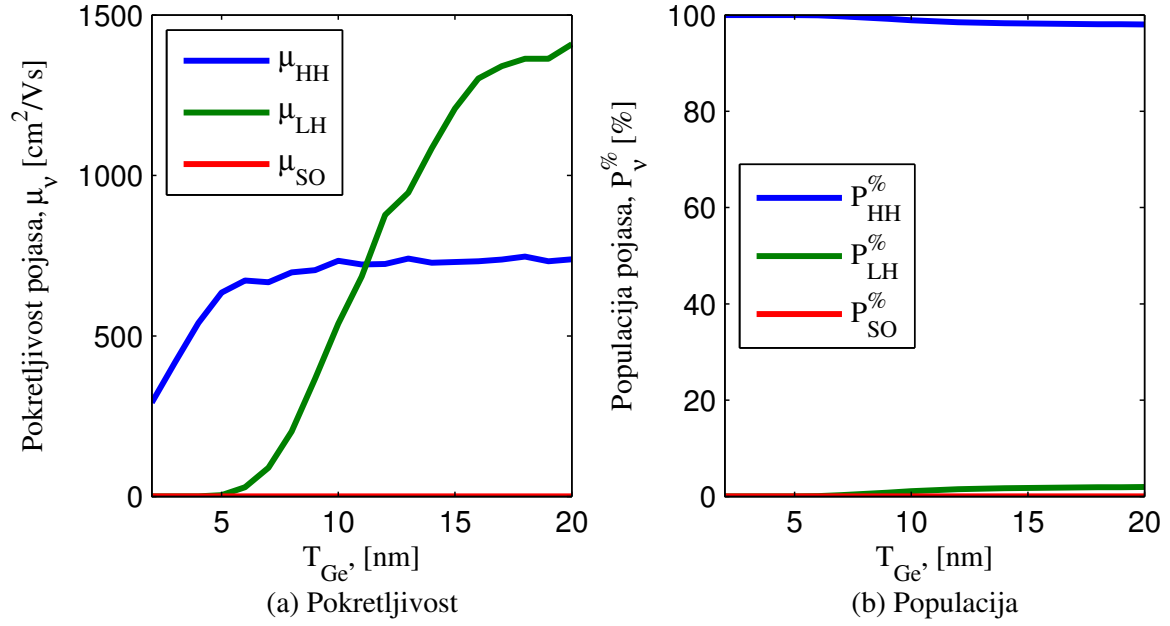
za 88% za  $P_{inv} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  i 83% za  $P_{inv} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Zatočenje izazvano geometrijom se opet vidi za tanje slojeve jer nema modulacije za različite  $P_{inv}$ . Zatočenje izazvano poljem postaje izraženo u slojevima iznad 12 nm. Za  $P_{inv} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  mobilnost počinje značano opadati za  $T_{Ge} < 12$  nm. Od 12 do 4 nm mobilnost pada sa

1400 cm<sup>2</sup>/Vs na 500 cm<sup>2</sup>/Vs. Zanimljivo je usporediti rezultate sa drugim radovima za pokretljivost šupljina u siliciju. Donetti L.; et al. [32], također uzimajući u obzir samo AP i OP dolaze do mobilnosti za šupljine pri  $P_{inv} = 3 \times 10^{12}$  cm<sup>-2</sup>:  $\mu = 200$  cm<sup>2</sup>/Vs za  $T_{Si} = 10$  nm,  $\mu = 150$  cm<sup>2</sup>/Vs za  $T_{Si} = 5$  nm,  $\mu = 120$  cm<sup>2</sup>/Vs za  $T_{Si} = 3$  nm. Mobilnosti šupljina u Si su 70-80 % manje nego rezultati za Ge iz ove simulacije. Ipak rezultati se trebaju uzeti sa rezervom jer model razvijen u ovom radu nije baždaren dok su rezultati u [32] iz baždarenog modela.

Više detalja o manjoj mobilnosti u tanjim slojevima i nedostatku modulacije inverzijskom gustoćom se vidi proučavanjem FF. U ovom slučaju posebno se promatra ovisnost FF o debljini koja je prikazana na slici 5.5b. FF raste prilikom stanjivanja  $T_{Ge}$  sa 20 na 2 nm. Događa se pad od 88 % za  $P_{inv} = 3 \times 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> i pad od 81 % za  $P_{inv} = 10^{13}$  cm<sup>-2</sup> za prijelaz sa 2 na 20 nm. Sličnost sa veličinama kod mobilnosti prilikom promjene  $T_{Ge}$  pokazuje da je rast FF jedan od glavnih uzroka smanjenja mobilnosti kod tanjih slojeva. Geometrijsko zatočenje je dominantno za tanje slojeve jer se valne funkcije više preklapaju. Ako pogledamo opet sliku 4.3, vidi se da se smanjenjem  $T_{Ge}$  maksimumi valnih funkcija sele više prema sredini i povećava se preklapanje valnih funkcija šupljina izoliranih na suprotnim krajevima spoja oksid sa germanijem. Kod debljih slojeva, valne funkcije su razmaknute i preklop je manji. Za  $T_{Ge} = 20$  nm FF je najveći za  $P_{inv} = 10^{13}$  cm<sup>-2</sup> jer visoki napon tjera valne funkcije u manji prostor uz spoj oksida sa germanijem i povećava preklop, tj FF. Usporedbom slika 5.5a i 5.5b se vidi da područja koja imaju modulaciju FF debljinom ista svojstva prenose i na mobilnost. Kao što je već rečeno prije, veći FF dovodi do manje  $\mu$ . Navedeno objašnjava manju pokretljivost u debljim slojevima za veće inverzije na slikama 5.4a i 5.5a. Također objašnjava i općenito manju pokretljivost za tanje slojeve koja se vidi na istim slikama.

#### 5.4 Pokretljivost i utjecaj populacija

Dosad objašnjeni modeli i njihovi rezultati su dovoljni za opis pokretljivosti šupljina u germaniju i utjecaj debljine germanija. Međutim, još jedan zanimljivi efekt se vidi ako se detaljnije prouče doprinosi pojedinog pojasa u ukupnoj mobilnosti. Vrijednosti mobilnosti su prikazane na slici 5.6, za  $P_{inv} = 3 \times 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> i  $T_{Ge}$  od 2 do 20 nm. Kod debljih slojeva mobilnost LH je veća nego mobilnost HH. Za  $T_{Ge} = 20$  nm  $\mu_{HH}$  je 52% niža nego  $\mu_{LH} = 1600$  cm<sup>2</sup>/Vs. Oko  $T_{Ge} = 12$  nm pokretljivosti je ista za oba pojasa. Nagli pad u mobilnosti za LH se događa od  $\mu_{LH} = 1400$  cm<sup>2</sup>/Vs za  $T_{Ge} = 15$  nm do  $T_{Ge} = 5$  nm gdje se  $\mu_{LH}$  može zanemariti za praktičnu primjenu. Mobilnost LH u tom području ima jaku ovisnost o geometriji. Mobilnost HH je skoro konstantna za debljine iznad 6 nm, dok se geometrijska ovisnost pojavljuje za slojeve ispod  $T_{Ge} = 6$  nm. Mobilnost HH padne za 58% sa  $\mu_{HH} = 700$  cm<sup>2</sup>/Vs za  $T_{Ge} = 6$  nm na  $\mu_{HH} = 300$  cm<sup>2</sup>/Vs za  $T_{Ge} = 2$  nm. Pokretljivost za SO pojas je iznimno mala u ovoj simulaciji, najveća vrijednost je  $\mu_{SO} = 0.002$  cm<sup>2</sup>/Vs te se može smatrati



Slika 5.6: Pokretljivosti i populacije za sva tri pojasa u ovisnosti o debljini Ge.  $P_{inv} = 3 \times 10^{12}$

nulom za sve praktične primjene. Slika je kvalitativno ista za različite  $P_{inv}$  što znači da je geometrija dominantna za pojavu ovakvog efekta. Da bi se objasnio veliki raspon  $\mu_{LH}$ , odvojene inverzijske gustoće i njihov udio za pojedini pojas  $P_v^{\%}$  se moraju promotriti.

Populacija se računa kao udio šupljina pojedinog pojasa u ukupnoj populaciji šupljina; već je korištena prilikom računanja ukupne pokretljivosti preko izraza (3.16). Populacije pojedinih šupljina su prikazane na slici 5.6b. Za svaki  $T_{Ge} = 2 - 20$  nm populacija HH dominira, sa  $P_{HH}^{\%}$  preko 99.99% za  $T_{Ge} = 2$  nm i polako opada prema  $P_{HH}^{\%} = 97.75\%$  za  $T_{Ge} = 20$  nm. Iznimno veliki udio HH u volumnoj populaciji je bio već prikazan u potpoglavlju 4.3 na slici 4.6. Populacija LH je  $P_{LH}^{\%} \approx 0\%$  za  $T_{Ge} = 2$  nm. Ako pogledamo opet sliku 5.6a, zanimljiva debljina je  $T_{Ge} = 6$  nm sa  $P_{LH}^{\%} = 0.07\%$  gdje  $\mu_{LH}$  počinje doprinositi ukupnoj pokretljivosti,  $T_{Ge} = 12$  nm sa  $P_{LH}^{\%} = 1.54\%$  gdje  $\mu_{HH} = \mu_{LH}$  i najveća debljina  $T_{Ge} = 20$  nm sa  $P_{LH}^{\%} = 2.25\%$  gdje je mobilnost LH duplo veća. Postavlja se pitanje kako LH sa tako malim populacijama doprinosi tako puno u ukupnoj pokretljivosti. Preko relacije (3.15) u kombinaciji sa (3.9) ili (3.13) se vidi veza pokretljivosti i mase:

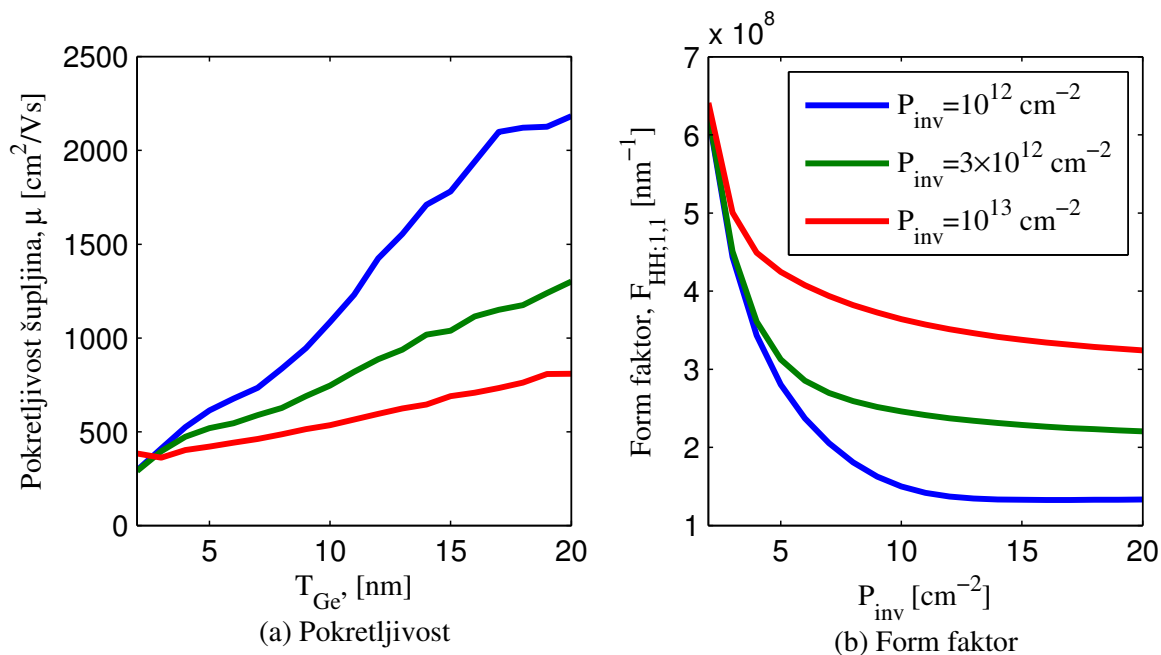
$$\mu_v = \frac{e}{m_{c,v}} \langle \tau \rangle \sim \frac{1}{m_{c,v}} \frac{1}{m_{d,v}}. \quad (5.1)$$

Velika razlika u masama između LH i HH,  $m_{HH}^2/m_{LH}^2 \approx 60$  je odgovorna što je  $\mu_{LH}$  istog reda veličine kao  $\mu_{HH}$  čak i za male populacije kao  $P_{LH}^{\%} \approx 1 - 2\%$ .



## 5.5 Pokretljivosti u uređajima sa jednom upravljačkom elektrodom

Opis strukture sa jednom upravljačkom elektrodom (SG) je već spomenut u potpoglavlju 4.5 i potpunije opisan u dodatku A. Na slici 5.7a je prikazana ukupna pokretljivost svih pojaseva zajedno za SG. Za razliku od uređaja sa dvije upravljačke

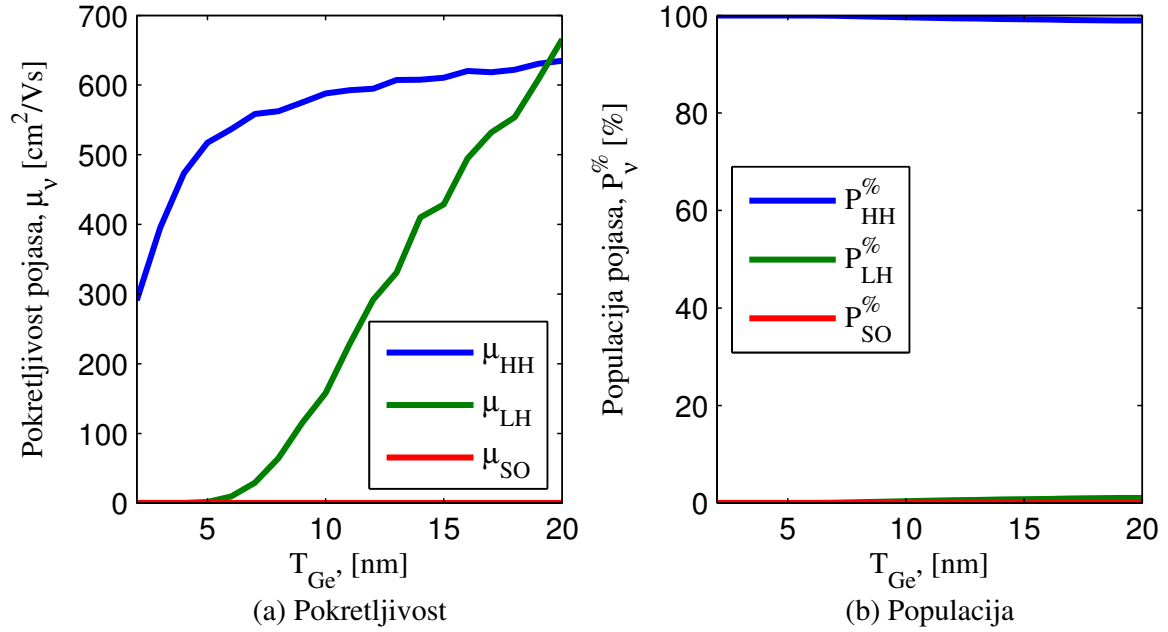


Slika 5.7: Pokretljivosti šupljina i FF u ovisnosti o debljini germanijskog sloja za uređaj sa jednom upravljačkom elektrodom. Za oba grafa inverzijska gustoća je prikazana kao parametar od  $P_{inv} = 1, 3, 10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

elektrode (DG) prikazanog na slici 5.5a vidi se da je ukupna pokretljivost manja, sa maksimumom za  $P_{inv} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  i za  $T_{Ge} = 20 \text{ nm}$  od  $\mu = 2300 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Kod visokih inverzija  $P_{inv} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  rezultat za  $T_{Ge} = 20 \text{ nm}$  je  $\mu = 800 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Pokretljivost sa stanjivanjem  $T_{Ge}$  pada i dolazi do sličnih veličina kao kod DG struktura za  $T_{Ge} = 2 \text{ nm}$ .

FF prikazan na slici 5.7b za SG uređaj ima izraženiju ovisnost o razini inverzijske gustoće nego DG uređaj prikazan na slici 5.5b. Razlog je jer kod DG uređaja valne funkcije su izolirane uz oba oksida dok kod SG uređaja to je samo oko jednog oksida kao što je prikazano na slici 4.9a. Sa stanjivanjem  $T_{Ge}$  utjecaj opada i FF je sličniji DG stukturi na slici 5.5b. Razlog je vidljiv na slici 4.9b; raspodjela šupljina u tankim slojevima za SG strukturu je rasprostranjena i u sredini kanala. Valne funkcije se preklapaju u uskim slojevima neovisno o naponu i broju upravljačkih elektroda pa je FF isti.

Pokretljivost šupljina za pojedine pojaseve je prikazana slici 5.8a. Vidi se da za pojas LH kod SG uređaja nema izrazito velikog doprinosa  $\mu_{LH}$  kao kod DG uređaja prikazanog na slici 5.6a. Pad  $\mu_{LH}$  je nagli kao i za DG, vidi se da je za  $T_{Ge} = 6 \text{ nm}$



Slika 5.8: Pokretljivosti i populacije za sva tri pojasa u ovisnosti o debljini Ge za uređaj sa jednom upravljačkom elektrodom.  $P_{inv} = 3 \times 10^{12}$

vodljivost zanemariva. Rezultati su isti za različite inverzije i ovo je opet isključivo geometrijski efekt. Pokretljivost  $\mu_{HH}$  u SG uređajima počinje naglo padati tek oko  $T_{Ge} = 6$  nm što je isto kao i kod DG uređaja. Opet vidimo da je to geometrijski efekt. Masa HH je veća od mase LH te su potrebi tanji slojevi da bi se efekt kvantnog zatočenja pokazao i za pojas HH.

Populacija šupljina je prikazana na slici 5.8b. Numerički podaci govore da je  $P_{LH}^{\%} = 1.07\%$  za  $T_{Ge} = 20$  nm gdje vidimo da još doprinosi u ukupnoj vodljivosti sa jednakim iznosima  $\mu_{HH} = \mu_{LH} = 600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Za  $T_{Ge} = 6$  nm kad prestaje praktično doprinositi u ukupnoj mobilnosti udio u ukupnoj populaciji je  $P_{LH}^{\%} = 0.03\%$ . Svojestvo se opet objašnjava preko relacije (5.1) i velike razlike u masi između HH i LH.

## 6 Zaključak i budući rad

### 6.1 Zaključak

Kroz ovaj rad je numerički modelirana pokretljivost šupljina u MOSFET-u sa iznimno tankim tijelom (UTB) i dvije upravljačke elektrode (DG). Fizikalno modeliranje energetskih nivoa i distribucija šupljina unutar navedene strukture je napravljeno pomoću samosuglasnog Schrödinger-Poissonovog simulatora. U obzir su uzete teške, lake i split-off šupljine zajedno sa kvantnim efektima koji se pojavljuju radi prostornog zatočenja šupljina unutar germanija između dva oksidna sloja  $\text{SiO}_2$ . Jednostavni model masa je korišten gdje su efektivne mase zatočenja, gustoće stanja i vodljivosti jednake. Posebni je naglasak dan na proučavanje osnovnih veličina: valnih funkcija i energetskih nivoa. Svi efekti koji nastaju promjenom napona ili debljine germanija se prenose sa valnih funkcija i energetskih nivoa na gustoću čestica, form faktor, vremena raspršenja i mobilnost. Iz vjerojatnosti prelaska u vremenu preko raspršenja na AP i OP za slojeve germanija od 2 do 20 nm je dobivena pokretljivost šupljina. Za usporedbu su modelirani i rezultati za MOSFET sa jednom upravljačkom elektrodom (SG). Jasno se vidi pad pokretljivosti šupljina sa stanjivanjem germanijskog sloja. Na prijelazu sa 20 na 2 nm pokretljivost pada za 83% pri manjim inverzijama ( $P_{inv} = 3 \times 10^2 \text{ cm}^{-2}$ ) i 88% za veće inverzije ( $P_{inv} = 10^3 \text{ cm}^{-2}$ ). U slojevima ispod 12 nm pad pokretljivosti je neovisan o naponu na upravljačkoj elektrodi. Glavni ograničavajući faktor za pokretljivost šupljina je geometrijsko zatočenje. Debljina Germanija preklapanje valnih funkcija koje je prikazano pomoću form faktora. U slojevima iznad 12 nm glavni utjecaj ima zatočenje izazvano poljem i napon je glavna modulacija pokretljivosti šupljina. Pokretljivost šupljina u DG MOSFET je veća za deblje slojeve u odnosu na SG MOSFET. Za tanje slojeve rezultati dolaze do sličnih vrijednosti i u DG i SG MOSFET-u.

Veća pokretljivost lakih šupljina u odnosu na teške šupljine prilikom niske populacije lakih šupljina,  $P_{LH}^{\%} \approx 1 - 2\%$  za DG, je objašnjena preko velike razlike masa šupljina,  $m_{HH}^2/m_{LH}^2 \approx 60$ . U usporedbi sa silicijem, germanij ima više potencijala prilikom smanjenja poluvodičkog sloja zbog veće pokretljivosti šupljina. Usporedbom rezultata za raspršenja na akustičkim i optičkim fononima prikazuje 70-80% manju pokretljivost šupljina kod silicija.

### 6.2 Budući rad

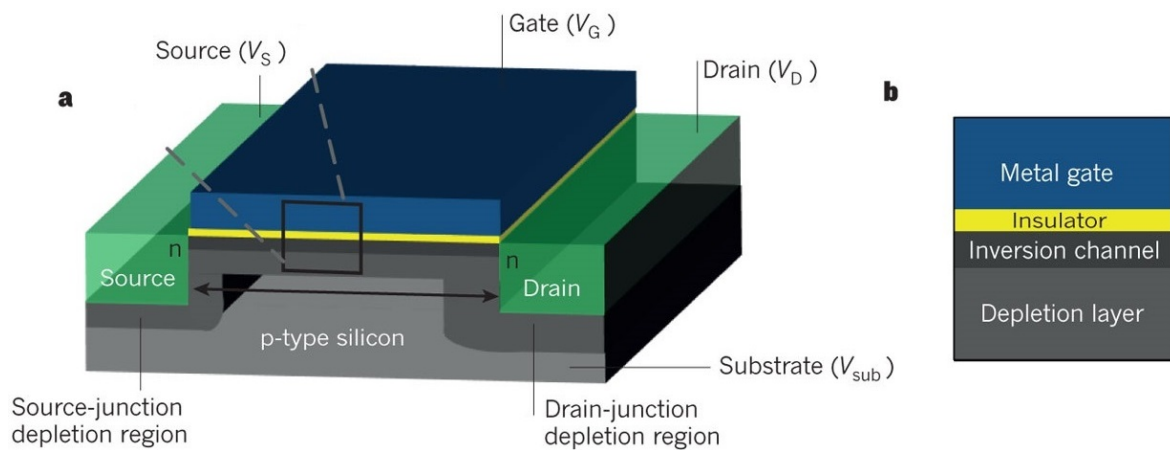
Navedeni simulator se lako može proširiti uzimanjem u obzir veći broj fizikalnih mehanizama. Raspršenja šupljina se događaju na geometrijskim nepravilnostima na sučelju oksid sa germanijem koji se pojavljuju kao posljedica nesavršenosti tehnološkog procesa proizvodnje. Za takvo raspršenje je izuzetno bitan oblik valne funkcije koji je ovdje već razjašnjen. Također Coulombovo raspršenje se može uzet u obzir zajedno sa statičkim zasjenjenjem. Kako su pojasevi šupljina izrazito prostorno

ovisni zbog veće blizine valentnih elektrona jezgri u odnosu na vodljive, može se uzeti precizniji model masa gdje različite orijentacije u kristalu utječu na iznos mase. Razmatranjem simetrija u kristalu na nivou teorije grupa može se proučiti da li treba uzeti u obzir i raspršenja između pojaseva a ne samo unutar njega. Promjenom visine barijere lako se simuliraju drugačiji materijali za oksidni sloj. Kao najveće povećanje kompleksnosti računa bilo bi uzeti u obzir  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  račun smetnje za pojas šupljina ili čak DFT račun za manje strukture. U tim slučajevima se mogu promatrati i naprezanja u kristalnoj rešetci koja mogu biti namjerno uvedena radi poboljšavanja transportnih svojstva. Za svaki model trebalo bi izvršiti i baždarenje simulatora na stvarnim mjerenjima ukoliko su podaci za slične geometrije dostupni.

# Dodaci

## Dodatak A Osnove MOSFET-a

Da bi se shvatilo zašto se u poglavlju 2.2.3 proučava  $\text{SiO}_2\text{-Ge-SiO}_2$  struktura i kakva je točno geometrija problema potrebno je objasniti osnove MOSFET-a. MOSFET je skraćeni naziv za metal-oksid-poluvodič tranzistor s efektom polja<sup>10</sup> i prikazan je na slici A.1a. Na slici je nMOSFET u kojem su elektroni većinski nosioci unutar



Slika A.1: Na lijevoj strani je prikazan nMOSFET sa jednom upravljačkom elektrodom. Na desnoj je izdvojena MOS struktura [34].

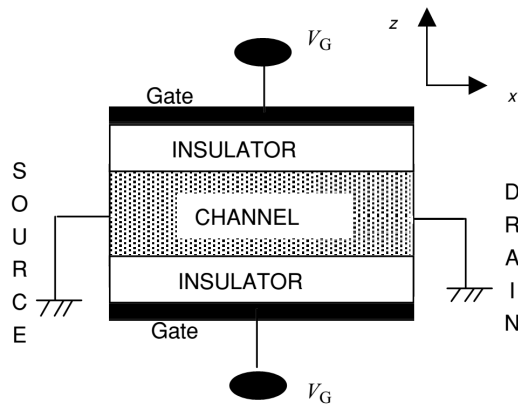
inverzijskog sloja. Unutar pMOSFET-a su većinski nosioci šupljine koje se proučavaju u ovom radu. Iako je na slici nMOSFET, princip rada i stvaranje inverzijskog sloja je isti i za pMOSFET.

Pripadna geometrija kad nije od posebnog interesa sva tranzistorska struktura (napon na odvodu, izlazne karakteristike, dužina kanala i slično) se naziva MOS struktura. MOS strukturu čini sloj metala na oksidu ispod kojeg se nalazi poluvodič i prikazana je na slici A.1b. SG<sup>11</sup> MOSFET ima jednu upravljačku elektrodu koja se nalazi iznad oksida. Inverzijski kanal se stvara pri vrhu poluvodiča uz oksidni sloj primjenom napona  $V_G$  na upravljačkoj elektrodi. Na crtežu je upravljačka elektroda od metala ali u modernijim strukturama to je češće visoko dopirani Si. Struktura i rad takvih uređaja je već duže vremena dobro poznat i opisan u mnogim knjigama, npr. [33]. Naprednije strukture slijede iste fizikalne principe pri stvaranju inverzijskih kanala ali koriste kompliciranije geometrije. DG<sup>12</sup> MOSFET ima dvije upravljačke elektrode i prikazan je na slici A.2a. Kanal je od poluvodičkog materijala, okružen sa dvije strane oksidom na kojima se nalazi metalna upravljačka elektroda. Na vertikalnoj  $z$ -osi vidi se struktura od posebnog interesa: oksid-poluvodič-oksid. Unutar

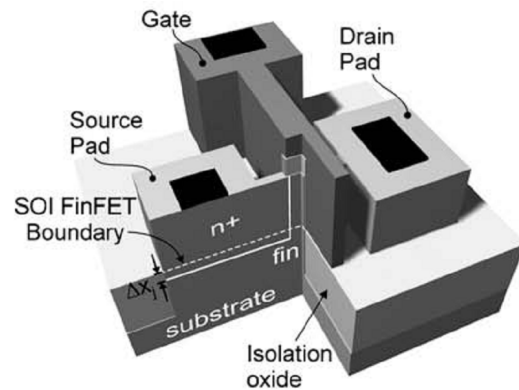
<sup>10</sup>eng. Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor

<sup>11</sup>eng. single gate

<sup>12</sup>eng. double gate



(a) MOSFET sa dvije upravljačke elektrode [25]



(b) FinFET [10]

Slika A.2: Naprednije MOSFET strukture

poluvodiča elektroni, odnosno šupljine osjećaju efekt kvantnog zatočenja u  $z$  smjeru, dok se u  $xy$  smjeru elektroni mogu slobodno kretati. Dimenzije pojedinih slojeva su nanometarske. Realni 3D prikaz FinFET-a prezentiran je na slici A.2b. Kvantno zatočenje se osjeća u tankom dijelu poluvodiča pod nazivom fin<sup>13</sup> čiji se presjek shematski može zamisliti slično kao i DG MOSFET struktura.

Realni problemi u primjeni Ge u MOSFET-u, kao i materijali koji se koriste za oksidne slojeve i upravljačke elektrode se mogu naći u [13].

<sup>13</sup>eng. fin → hr. peraja

## Dodatak B Gustoće stanja i gustoća čestica

Detaljniji opis gustoće stanja i kako se računa je predstavljen u ovom dodatku. Kroz B.1 dio postupno je izveden izraz za gustoću stanja i gustoću čestica za 2D sustav sa slobodnim elektronima. U B.2 dijelu je izveden općeniti slučaj za različite dimenzionalnosti pod pretpostavkom da se elektroni nalaze u vodljivoj vrpici te mogućnost prijelaza na šupljine u valentnoj vrpici.

### B.1 Gustoće stanja i gustoća čestica u 2D

Ukoliko se na slobodne elektrone prilikom rješavanja Schrödingerove jednadžbe [23]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (\text{B.1})$$

u 2D primjene Born-von Karman rubni uvjeti

$$\Psi(x + L_x, y, z) = \Psi(x, y, z), \quad \Psi(x, y + L_y, z) = \Psi(x, y, z) \quad (\text{B.2})$$

kao rješenje u  $xy$ -smjeru dobivaju se ravni valovi

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{A}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{A}} \exp[i(k_x x + k_y y)] \quad (\text{B.3})$$

sa diskretiziranim vrijednostima  $k_x$  i  $k_y$

$$k_x = n\frac{2\pi}{L_x}, \quad k_y = m\frac{2\pi}{L_y}, \quad n, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{B.4})$$

Površina u realnom prostoru koja se promatra je  $A = L_x L_y$ . Sva elektronska stanja i energije su određene odgovarajućim vektorom  $\mathbf{k}$  koji ustvari označava par  $(n, m)$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{A}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (\text{B.5})$$

Valna funkcija u takvom obliku je normalizirana i ortogonalna za različite  $\mathbf{k}$ . Kako svaka točka  $(n, m)$  označava jedno dopušteno kvantno stanje u inverznom prostoru, postoji jedno stanje za površinu

$$\frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y} = \frac{(2\pi)^2}{A}. \quad (\text{B.6})$$

Zaključak je da postoje  $A/(2\pi)^2$  točaka po jediničnoj površini inverznog prostora. Ukoliko se pretpostavi da su sva stanja unutar Fermijevog kruga, radijusa  $k_F$ , zauzeta a izvan su prazna, ukupno je dostupno

$$N = 2 \cdot \frac{A}{(2\pi)^2} \cdot \pi k_F^2 = \frac{A}{2\pi} k_F^2 \quad (\text{B.7})$$

stanja ili elektrona na temperaturi 0 K, gdje faktor 2 dolazi od dvije mogućnosti spina. Za temperature iznad 0 K treba uzeti u obzir vjerojatnost nalaženja elektrona preko Fermi-Diracove raspodjele

$$f_{FD}(E(\mathbf{k})) = 1 / \{1 + \exp [(E(\mathbf{k}) - E_F) / k_B T]\}. \quad (\text{B.8})$$

Ukupni broj elektrona je

$$N = 2 \cdot \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E(\mathbf{k})) = 2 \cdot A \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} f_{FD}(E(\mathbf{k})), \quad (\text{B.9})$$

koji se uz transformacije

$$d^2\mathbf{k} = 2\pi k dk, \quad dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk, \quad (\text{B.10})$$

gdje se prelazi sa integracije po  $\mathbf{k}$  na integraciju po energiji, može zapisati kao

$$N = A \int_0^{+\infty} dE g_{2D}(E) f_{FD}(E), \quad g_{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}. \quad (\text{B.11})$$

$g_{2D}(E)$  je gustoća (dostupnih) stanja za slobodni 2D plin koja je konstantna, [27]. Zapis sa ovisnosti o energiji je zadržan jer općenito gustoća stanja različitih disperzija i dimenzionalnosti ovisi o energiji. Vidi se sličnost sa izrazom (2.19) gdje su uzeti u obzir svi mogući  $\nu, n$  kao i eventualni multiplicitet pojasa. Konačno, gustoća elektrona po jedinici površine je

$$n = \frac{N}{A} = \int_0^{+\infty} dE g_{2D}(E) f_{FD}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} k_B T \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F}{k_B T} \right) \right]. \quad (\text{B.12})$$

Vidi se sličnost sa izrazima za gustoću šupljina (2.20) i (2.21) u kojem su granice integracije malo drugačije i dodana je ovisnost o  $z$ -smjeru.

## B.2 Općenita gustoća stanja i gustoća čestica

Gustoća stanja za neki sustav se može izračunati preko

$$g(E) = n_{sp} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{S(E)} \frac{d^{(d-1)}S}{|\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|}, \quad (\text{B.13})$$

gdje  $n_{sp}$  označava multiplicitet spina,  $E(\mathbf{k})$  disperziju sustava,  $d$  dimenzionalnost sustava [20]. Navedeni izraz je ekvivalentan (2.18) [18]. Integracija ide po granicama plohe  $S(E)$ , određenim Fermijevim vektorom  $k_F$ , čija je dimenzionalnost za jedan manja od sustava koji se promatra. Tako je za 3D sustav ploha integracije sfera i gustoća je [35]

$$g_{3D}(E) = \frac{(2m_d)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C}. \quad (\text{B.14})$$



Energija  $E_C$  označava dno vodljive vrpce a iznad toga se pretpostavlja da se elektroni ponašaju kao slobodni, tj. imaju kvadratnu ovisnost energije o  $k$ . Za 2D sustave granica plohe je kružnica; gustoća stanja je

$$g_{2D}(E) = \frac{m_d}{\pi \hbar^2} \quad (\text{B.15})$$

koja je konstantna i ne ovisi o energiji. Kod 1D sustava granica "plohe" su točke  $\pm k_F$  i gustoća stanja je

$$g_{1D}(E) = \frac{\sqrt{2m_d}}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{1}{E - E_C}} \quad (\text{B.16})$$

Koriste se efektivne mase za računanje gustoće stanja  $m_d$  i opisane su u potpoglavlju 2.2.2.

Koncentracija elektrona u 3D sustavu

$$n_{3D} = \int_{E_C}^{+\infty} g_{3D}(E) f_{FD}(E) dE = \frac{(2m_d)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_C}^{+\infty} \frac{\sqrt{E - E_C}}{1 + \exp[(E - E_F)/k_B T]} dE, \quad (\text{B.17})$$

uz supstitucije

$$\varepsilon = \frac{E - E_C}{k_B T}, \quad \eta_F = \frac{E_F - E_C}{k_B T}, \quad N_{3D} = 2 \left( \frac{2\pi m_d k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad (\text{B.18})$$

prelazi u jasniji oblik koji se sastoji od konstantnog člana i integrala

$$n_{3D} = N_{3D} \mathcal{F}_{1/2}(\eta_F). \quad (\text{B.19})$$

$\mathcal{F}_{1/2}(\eta_F)$  označava Fermijev integral reda 1/2 koji se rješava samo numerički. Slično se može pokazati da je za 2D sustav koncentracija dana sa [35]

$$n_{2D} = N_{2D} \mathcal{F}_0(\eta_F). \quad (\text{B.20})$$

$\mathcal{F}_0(\eta_F)$  je Fermijev integral nultog reda koji se može riješiti analitički

$$\mathcal{F}_0(\eta_F) = \int_0^{+\infty} \frac{\varepsilon^0 d\varepsilon}{1 + \exp(\varepsilon - \eta_F)} = \ln[1 + \exp(\eta_F)]. \quad (\text{B.21})$$

Za 1D sustav koncentracija je dana sa

$$n_{1D} = N_{1D} \mathcal{F}_{-1/2}(\eta_F), \quad (\text{B.22})$$

gdje je  $\mathcal{F}_{-1/2}(\eta_F)$  Fermijev integral reda  $-1/2$  koji se rješava samo numerički. Općeniti izraz za Fermijev integral  $j$ -tog red je

$$\mathcal{F}_j(\eta_F) \equiv \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{+\infty} \frac{\varepsilon^j d\varepsilon}{1 + \exp(\varepsilon - \eta_F)}. \quad (\text{B.23})$$

Račun za koncentraciju elektrona se može poopćiti i u sličnom obliku izvesti za koncentraciju šupljina promjenama granica integracije  $[E_C, +\infty] \rightarrow [-\infty, E_V]$ .

## Dodatak C Fermijevo zlatno pravilo

Pretpostavimo da imamo neperturbirani Hamiltonijan i malu perturbaciju koju onda razmatrati preko perturbativnog računa [21]. Uvodi se notacija

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \zeta \hat{H}', \quad \hat{H}_0 |\psi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n\rangle, \quad \hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle. \quad (\text{C.24})$$

$\hat{H}_0$  označava Hamiltonijan neperturbiranog sustava,  $|\psi_n\rangle$  je neperturbirano svojstveno stanje i  $E_n^{(0)}$  je svojstvena energija odgovarajućeg neperturbiranog svojstvenog stanja. Parametar  $\zeta$  omogućava uključivanje perturbacije  $\hat{H}'$  te je pretpostavka da je mala veličina što omogućava Taylorov razvoj u  $\zeta$ .  $\hat{H}$  označava Hamiltonijan perturbiranog sustava,  $|\varphi_n\rangle$  je perturbirano svojstveno stanje i  $E_n$  je svojstvena energija odgovarajućeg perturbiranog svojstvenog stanja. Pretpostavlja se da se znaju riješenja neperturbirane stacionarne Schrödingerove jednadžbe sa pripadnim  $\{|\psi_n\rangle\}$  i  $\{E_n^{(0)}\}$ . Cilj je naći perturbirana svojstvena stanja  $\{|\varphi_n\rangle\}$  i perturbirane svojstvene energije  $\{E_n\}$ .

Schröingerova jednadžba je

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle = \hat{H} |\varphi\rangle. \quad (\text{C.25})$$

Vremenska evolucija neperturbiranog svojstvenog stanja je dana sa

$$|\psi_n(t)\rangle = \exp\left(-i \frac{E_n^{(0)} t}{\hbar}\right) |\psi_n\rangle, \quad (\text{C.26})$$

i ona čine potpunu bazu u kojoj se raspisuju druga stanja. Perturbirana valna funkcija u bazi neperturbiranih stanja

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_j c_j(t) |\psi_j\rangle \exp\left(-i \frac{E_j^{(0)} t}{\hbar}\right), \quad \sum_j |c_j(t)|^2 = 1. \quad (\text{C.27})$$

Uvrštavanjem (C.27) u (C.25) uz pretpostavku komutacije  $\hat{H}'(t)$  i  $c_j(t)$  daje

$$\begin{aligned} \sum_j i\hbar \dot{c}_j |\psi_j\rangle \exp\left(-i \frac{E_j^{(0)} t}{\hbar}\right) + \sum_j c_j E_j^{(0)} |\psi_j\rangle \exp\left(-i \frac{E_j^{(0)} t}{\hbar}\right) = \\ = \sum_j c_j \left[ \hat{H}_0 + \zeta \hat{H}'(t) \right] |\psi_j\rangle \exp\left(-i \frac{E_j^{(0)} t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

Uvrštavanjem  $E_j^{(0)} |\psi_j\rangle$  umjesto  $\hat{H}_0 |\psi_j\rangle$  i množenjem s lijeve strane s  $\langle \psi_k |$  se dobiva

$$i\hbar \dot{c}_k \exp\left(-i \frac{E_k^{(0)} t}{\hbar}\right) = \sum_j c_j \exp\left(-i \frac{E_j^{(0)} t}{\hbar}\right) \langle \psi_k | \zeta \hat{H}'(t) | \psi_j \rangle. \quad (\text{C.29})$$

Uz korištenje pokrate za Bohrovu frekvenciju  $\omega_{kj} = (E_k^{(0)} - E_j^{(0)}) / \hbar$  promjena koeficijenta  $c_k$  u vremenu je

$$\dot{c}_k = \frac{1}{i\hbar} \sum_j \langle \psi_k | \zeta \hat{H}'(t) | \psi_j \rangle c_j \exp(i\omega_{kj} t), \quad (\text{C.30})$$

dok se sva vremenska ovisnost radi jednostavnosti prebacuje u član  $H'_{kj}(t)$  koji glasi

$$H'_{kj}(t) = \langle \psi_k | \zeta \hat{H}'(t) | \psi_j \rangle \exp(i\omega_{kj}t). \quad (\text{C.31})$$

Poznavanje svih  $c_k$  je ekvivalentno sa rješavanjem Schödingerove jednadžbe (C.25). Koeficijenti se razvijaju u Taylorov red oko  $\zeta = 0$

$$c_k = c_k^{(0)} + \zeta c_k^{(1)} + \zeta^2 c_k^{(2)} + \dots. \quad (\text{C.32})$$

Grupirajući iste potencije od  $\zeta$  dolazi se do skupa diferencijalnih jednadžbi za  $c_k$

$$\dot{c}_k^{(s+1)} = \frac{1}{i\hbar} \sum_j \hat{H}'_{kj}(t) c_j^{(s)}, \quad (\text{C.33})$$

gdje je  $\dot{c}_k^{(0)} = 0$  jer bez perturbacije imamo stacionarna stanja koja ne evoluiraju u vremenu. Bez gubitka općenitosti pretpostavlja se da su svi osim jednog  $c_k^{(0)}$  nula tako da je sistem u početku u neperturbiranom stanju  $l$ . Integriranjem po vremenu (C.33) prelazi u

$$c_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' H'_{kl}(t'). \quad (\text{C.34})$$

Vremenske oznake su takve da perturbacija nije djelovala u prošlosti, tj. za vremena  $-\infty < t < 0$ . Perturbacija je uključena u vremenu  $t = 0$  te je isključena kasnije u  $t = t_\infty$ . Pod pretpostavkom da perturbacija ima harmoničku ovisnost, članu (C.31) se razdvaja vremenska ovisnost

$$H'_{kl}(t) = \langle \psi_k | \hat{H}'_i | \psi_l \rangle \exp(i\omega_{kl}t) \sin \omega t, \quad (\text{C.35})$$

gdje član  $\langle \psi_k | \hat{H}'_i | \psi_l \rangle$  ne ovisi o vremenu. Vjerojatnost nalaženja sustava u stanju  $k$  u prvom redu perturbativnog računa za neko vrijeme nakon što je isključena perturbacija je dana sa

$$\wp(l \rightarrow k) = |c_k^{(1)}(t \geq t_\infty)|^2 = \frac{|\langle \psi_k | \hat{H}'_i | \psi_l \rangle|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{\sin [\frac{1}{2}(\omega_{kl} - \omega)t_\infty]}{\frac{1}{2}(\omega_{kl} - \omega)} \right\}^2, \quad (\text{C.36})$$

gdje je vidljivo da je vjerojatnost prelaska veća kad je nazivnik manji, tj. kad su stanja u energiji bliska. Da bi se dobila vjerojatnost prelaska u vremenu integrira se po svim dostupnim energijama i dijeli sa ukupnim vremenom

$$\wp_{trans} = \frac{1}{t_\infty} \int dE_k |c_k^{(1)}(t \geq t_\infty)|^2 \rho(k), \quad (\text{C.37})$$

gdje je  $\rho(k)dE_k$  broj konačnih stanja sa energijom između  $E_k$  i  $E_k + dE_k$  a  $\rho(k)$  je energijska gustoća konačnih stanja. Konačna vjerojatnost prelaska u vremenu se dobiva uvrštavanjem (C.36) u (C.37) i glasi

$$\wp_{trans} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(k) \left| \langle \psi_k | \hat{H}'_i | \psi_l \rangle \right|^2. \quad (\text{C.38})$$

Jednadžba (C.38) se naziva Fermijevo zlatno pravilo i opisuje prijelaz sustava iz svojstvenog stanja neperturbiranog hamiltonijana  $l$  u  $k$  pod utjecajem male perturbacije. Populacija stanja  $k$  raste linearno u vremenu djelovanja perturbacije.

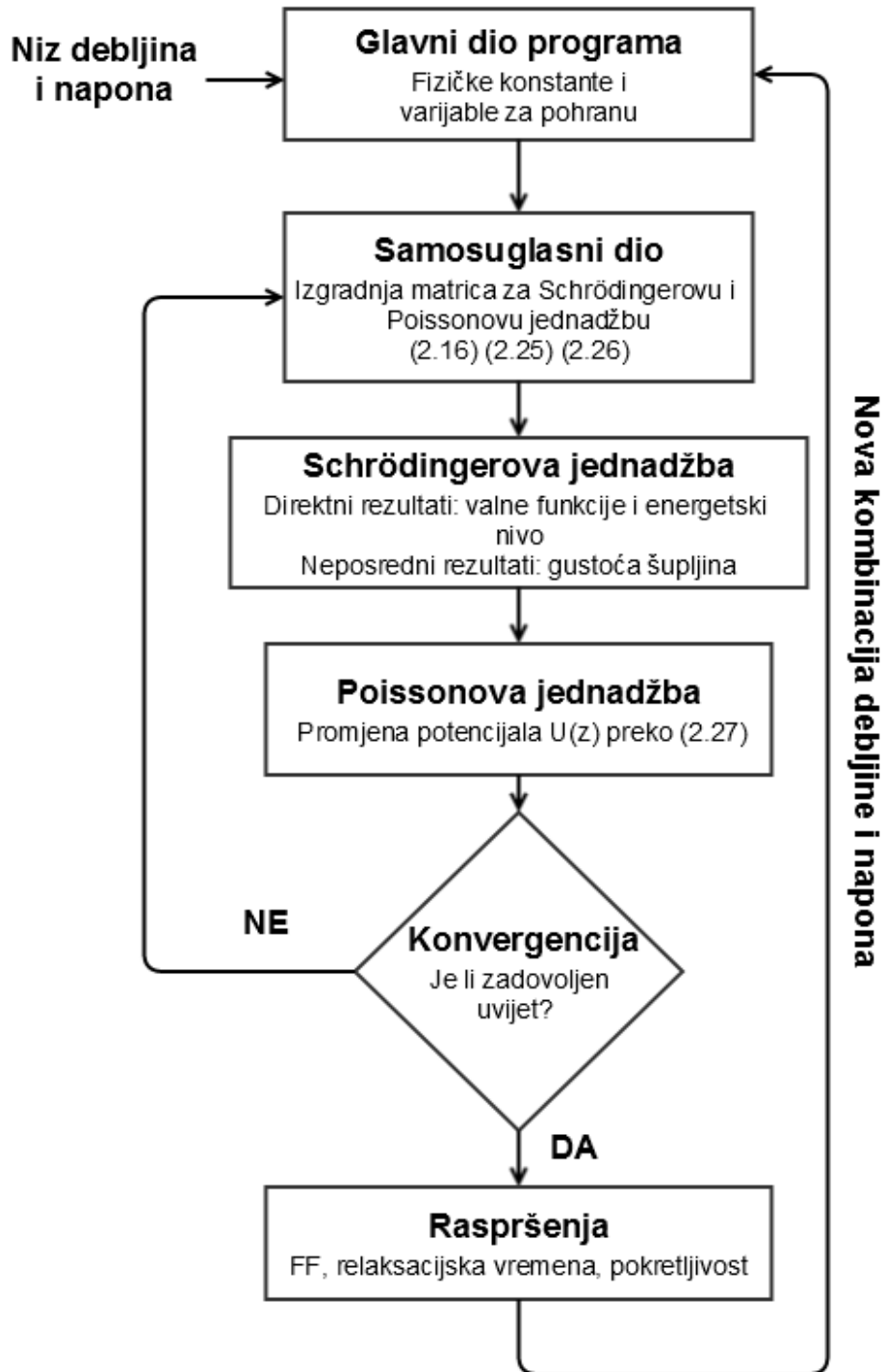
Izraz sličan (C.38) može se izvesti krećući od pretpostavke da je perturbacija stacionarna u vremenu i prostoru te čestica nailazi na nju [22], [27]. Ekvivalencija leži u tome što kad je čestica daleko možemo gledati kao da ne osjeća perturbaciju što je u ovom izvodu opisano vremenima  $-\infty < t < 0$ . Dolazak u prostorno područje djelovanja perturbacije se gleda kao dio u izvodu opisan s vremenima kad je uključena perturbacija  $0 \leq t \leq t_\infty$ . Konačno kad čestica napusti područje djelovanja perturbacije gleda se kao dio nakon što je perturbacija isključena, odnosno vremena  $t \geq t_\infty$ .

## Dodatak D MATLAB

Numeričko modeliranje je obavljeno u programskom paketu MATLAB (R2013a) i sadrži 525 linija koda u koji su uključeni i komentari. Dio koda za generiranje slika sadrži +1000 linija koda. To podrazumjeva formatiranje podataka u pogodan oblik za prikaz kao i sveukupni format slika koje su predstavljene kroz 4. i 5. poglavlje. Kopija svih skripti je priložena uz diplomski rad na CD-u.

Dijagram toka je prikazan na slici D.1. Radi eliminiranja potrebe za pokretanjem simulatora odvojeno za svaki napon i debljinu germanija na početku se unosi niz od 10 napona u rasponu od 0.15-1.5 V i 19 debljina u rasponu od 2-20 nm. Za svaku kombinaciju napona i debljine pokreće se samosuglasni dio koji naizmjenice pokreće skriptu za računanje Schrödingerove i Poissonove jednadžbe. Teorijski detalji su već dani u potpoglavlju 2.2.5. Nakon što su uzastopni izračuni potencijala dovoljno bliski,  $\varepsilon < 10^{-4}$  eV, uvjet konvergencije je zadovoljen. Rezultati, koji su i predstavljeni u 4. poglavlju su valne funkcije, energetske nivoe i gustoće čestica. Svi podaci se prosljeđuju u skriptu za računanje raspršenja koja računa inverzna vremena i pokretljivost šupljina predstavljenih u 5. poglavlju. Nakon toga skripta prelazi na novi par napona i debljina germanija te provodi cijelokupni račun ponovno.

Ukupni rezultati su spremni u višedimenzionalne matrice. Jedan od primjera su valne funkcije koje su spremne u 5D matrice gdje 1. dimenzija bira duljinu, 2. napon, 4. pojas, 5. nivo, 6. položaj unutar germanija. Npr. odabirom indeksa (19, 10, 2, 1, :) ispisuju se valna funkcija za  $T_{Ge} = 20$  nm,  $V_G = 1.5$  V, pojas lakih šupljina i 1. energetske nivoe. Većina podataka je spremna na sličan način kako bi im se lako i brzo moglo pristupiti.



Slika D.1: Dijagram toka korišten za modeliranje pokretljivosti šupljina u nanometarskim germanijskim slojevima.

## Literatura

- [1] Skotnicki, T.; et al. Innovative materials, devices, and CMOS technologies for low-power mobile multimedia. // IEEE transactions on electron devices. Vol. 55, 1(2008), str. 96-130.
- [2] Esseni, D.; Abramo, A.; Selmi, L.; Sangiorgi E. Physically Based Modeling of Low Field Electron Mobility in Ultrathin Single- and Double-Gate SOI n-MOSFETs. // IEEE transactions on electron devices. Vol. 50, 12(2003), str. 2445-2455.
- [3] Khakifirooz, A.; Antoniadis, D. A. On the Electron Mobility in Ultrathin SOI and GOI. // IEEE electron device letters. Vol. 25, 2(2004), str. 80-82.
- [4] Low, T; et al. Investigation of Performance Limits of Germanium Double-Gated MOSFETs // International Electron Devices Meeting 2003. Washington, USA : IEEE, 2003. Str. 29.4.1 - 29.4.4
- [5] Low, T.; et al. Electron mobility in Ge and strained-Si channel ultrathin-body metal-oxide semiconductor field-effect transistors // Applied Physics Letters. Vol. 85, 12(2004), str. 2402-2404.
- [6] Park, J.-T.; Colinge, J.-P. Multiple-gate SOI MOSFETs: device design guidelines. // IEEE transactions on electron devices. Vol 49, 12(2002), str. 2222-2229.
- [7] Pham, A. T.; Jungemann, C.; Meinerzhagen, B. Physics-Based Modeling of Hole Inversion-Layer Mobility in Strained-SiGe-on-Insulator. // IEEE transactions on electron devices. Vol. 54, 9(2007), str. 2174-2182.
- [8] Low, T.; et al. Study of Mobility in Strained Silicon and Germanium Ultra Thin Body MOSFETs. // IEEE transactions on electron devices. Vol. 52, 1(2005), str. 2430-2439.
- [9] Hisamoto, D.; Lee, W.-C.; Kedzierski, J.; Takeuchi, H.; Asano, K.; Kuo, C.; et al. FinFET - a self-aligned double-gate MOSFET scalable to 20 nm. // IEEE transactions on electron devices. Vol. 47, 12(2000), str. 2320- 2325.
- [10] Poljak, M.; Jovanović, V.; Suligoj, T. Improving bulk FinFET DC performance in comparison to SOI FinFET. // Microelectron. Eng., Vol. 86, 10(2009), str. 2078–2085.
- [11] International Technology Roadmap for Semiconductors, (2012), Update Overview, [www.itrs.net](http://www.itrs.net), 18.9.2014.
- [12] Takagi, S.; Iisawa, T.; Tezuka, T.; Numata, T.; Nakaharai, S.; Hirashita, N.; et al. Carrier-transport-enhanced channel CMOS for improved power consumption

and performance. // IEEE transactions on electron devices. Vol(55), 1(2008), str. 21-39.

- [13] Claeys, C.; Simoen, E. Germanium-based technologies: From Materials to Devices. 1st ed. Oxford : Elsevier, 2007.
- [14] Poljak, M.; Jovanović, V.; Grgec, D.; Suligoj, T. Assessment of electron mobility in ultra-thin body InGaAs-on-insulator MOSFETs using physics-based modeling. // IEEE transactions on electron devices. Vol. 59, 6(2012), str. 1636-1643.
- [15] Takagi, S.; Takenaka, M. III-V/Ge CMOS technologies on Si platform. // VLSI Symp. 2010, str. 147-148.
- [16] Lee, C. H.; et al. Record-high Electron Mobility in Ge n-MOSFETs exceeding Si Universality // International Electron Devices Meeting 2009. Baltimore, USA : IEEE, 2009. Str. 1-4.
- [17] Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. 8th ed. New Jersey : John Wiley & Sons, Inc., 2005.
- [18] Sólyom, J. Fundamentals of the Physics of Solids: Volume I - Structure and Dynamics. 1st ed. Berlin : Springer, 2007.
- [19] Batistić, I. Fizika čvrstog stanja, (2014), Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb, HR, [http://grdelin.pmf.unizg.hr/~ivo/Nastava/Fizika\\_Cvrstog\\_Stanja/index.php](http://grdelin.pmf.unizg.hr/~ivo/Nastava/Fizika_Cvrstog_Stanja/index.php), 19.9.2014.
- [20] Sólyom, J. Fundamentals of the Physics of Solids: Volume II - Electronic Properties. 1st ed. Berlin : Springer, 2007.
- [21] Auletta, A.; Fortunato, M.; Parisi, G. Quantum Mechanics. 1st ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2009.
- [22] Esseni, D.; Palestri, P.; Selmi, L. Nanoscale MOS Transistors. 1st. ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2011.
- [23] Rana, F. The Free Electron Gas in 1D, 2D, and 3D, (28.1.2013), Physics of Semiconductors and Nanostructures, <https://courses.cit.cornell.edu/ece407/Lectures/handout2.pdf>, 5.9.2014.
- [24] Energy band structure of germanium, (12.9.2009), Materials Design, <http://www.materialsdesign.com/appnote/energy-band-structure-germanium>, 18.9.2014.
- [25] Datta, S. Quantum Transport: Atom to Transistor. 1st ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2005.



- [26] New Semiconductor Materials, Characteristics and Properties, (2001), Ioffe Physical-Technical Institute, St. Petersburg, RF, <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/>, 18.9.2014.
- [27] Lundstrom, M. Fundamentals of carrier transport. 2nd ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2000.
- [28] Fischetti, M. V. Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures-Part I: Homogeneous Transport. // IEEE transactions on electron devices. Vol. 38, 3(1991), str. 634-649.
- [29] Maksimović, A. Numeričke metode i praktikum, (2006), Institut Ruđera Boškovića, Zagreb, HR, <http://www.irb.hr/users/maks/numericke.html>, 19.9.2014.
- [30] Poljak, M. Carrier transport in low-dimensional nanoelectronic devices. Doktorski rad. Zagreb : Fakultet elektrotehnike i računarstva, 2013.
- [31] Fischetti, M. V.; Laux, S. E. Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys. // Journal Of Applied Physics. Vol. 80, 4(1996), str. 2234-2252.
- [32] Donetti L.; Gamiz F.; Rodriguez N.; Godoy A. Hole mobility in ultrathin double-gate SOI devices: the effect of acoustic phonon confinement. // IEEE electron device letters. Vol. 30, 12(2009), str. 1338 - 1340.
- [33] Biljanović, P. Poluvodički elektronički elementi. 3. izdanje. Zagreb : Školska Knjiga, 2004.
- [34] Ferain, I.; Colinge, C. A.; Colinge, J. Multigate transistors as the future of classical metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. // Nature. 479(2011), str. 310-316.
- [35] Kim, R.; Lundstrom, M. Notes on Fermi-Dirac Integrals. 3rd Edition, (4.8.2011), <https://nanohub.org/resources/5475>, 5.9.2013.