

纳电子隧穿器件的蒙特卡洛模拟*

周继承 龙思锐 何红波 李义兵

(中南大学计算科学与信息学研究所, 长沙 410075)

摘要: 介绍了一种利用正统理论与蒙特卡洛方法模拟纳电子隧穿器件的程序. 该程序可模拟电子通过包含小隧道结、电容和理想电压源的电路输运过程. 并利用该程序, 对含量子岛和量子岛阵列的纳电子学器件进行了模拟.

关键词: 隧道结; 量子岛; 蒙特卡洛方法; 计算机模拟

PACC: 7790; 7135; 7320

中图分类号: TN3024.2

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2003)S0-0205-04

1 引言

单电子效应的发现可以追溯到 1951 年, 当时 Gorter^[1]在研究粒状金属在低温下的电阻时发现它有反常增大的现象, 他认为可以引入小电容的充电能来解释这个结果. Giaever 与 Zeller^[2,3]、Lambe 与 Jaclevic^[4]在研究超导隧道现象时, 分别独立地发现在极低温度、低偏压下埋藏于氧化物中的金属颗粒样品的电阻表现出异常增大的行为.

1992 年前后, 关于单电子效应的理论已经基本建立, 人们开始思考如何在未来的器件中利用这种效应, 创造出与传统微电子器件相比具有超小型化、超快响应、以及超低功耗等特性的新型器件^[5,6]. 单电子器件的基础是多个串联隧道结体系. 在实际应用中, 部分或全部量子岛都与外电路通过耦合电容相连, 并且可以被一个栅电源控制来连续改变量子岛上的电荷.

单电子隧道效应、库仑阻塞以及单电子振荡是纳电子器件工作的物理基础. 对于通常的金属电极隧道结, 当在结的两端加上偏置电压后, 就会有隧道电流流过, 此时有大量电子从结中隧穿, 外界扰动相比之下可以忽略. 然而, 一旦当隧道结的结面积缩小到纳米量级后, 电子将逐个地穿过隧道结, 外界的扰动影响就会变得突出, 其中主要包括热扰动、量子扰动和电磁扰动. 要想观察到单电子隧道效应, 必须克

服上述三方面的外界扰动.

首先, 为使库仑阻塞能抑制电子的热扰动, 必须满足:

$$q^2/2c > k_B T \quad (1)$$

其中 k_B 为波尔兹曼常数; T 为环境温度; c 为纳米结的电容; q 为一个电子的电荷量. 其次, 电子电荷能 $q^2/2c$ 要远大于量子扰动能量 $\frac{h}{8RC}$, 其中 h 为普朗克常数, R 为纳米结的结电阻. 这就要求 R 远大于量子电阻 R_Ω :

$$R \gg R_\Omega = \frac{h}{4q^2} \approx 6.5 (\text{k}\Omega) \quad (2)$$

只有当此条件满足, 才能抑制量子扰动. 再次是电磁扰动问题. 它主要包括引线的分布电容和分布电感所带来的电磁干扰. 最好的办法是把多个纳米结串联起来, 形成相互间的自我保护. 在以下的讨论中, 假设条件(1)和(2)都满足, 且无电磁干扰, 即不考虑扰动问题.

2 模拟方法

纳电子隧穿电路包括一些由隧道结、电容、理想电压源所联结的量子岛组成. 电压源为理想的, 故其内阻为零. 电子独立地通过隧道结在结与结之间隧穿, 从而改变电路中电荷的分布.

在纳电子器件电路模拟中, 目前有两种普遍使用的方法, 即蒙特卡洛方法和主方程方法. 蒙特卡洛

* 国家自然科学基金(批准号: 69971007, 60171043)与教育部优秀青年教师基金资助项目

方法从所有可能的隧穿事件出发,计算其几率,按其几率随机地选择某一隧穿事件.以此为基础,对电子在整个网络中的输运过程进行模拟.所有的隧穿事件均为独立且指数分布.蒙特卡洛方法以非常直接的方法模拟了单电子电路中电子从一个量子岛到另一个岛的微观过程,因而它能给出电路较好的瞬态和动力学行为.主方程方法则从宏观的角度来模拟纳电子电路的各种可能的状态及状态之间的转变.一个状态可定义为电压源的一组电压值及电路中的电荷分布.忽略背景电荷,每个岛上的电荷量均为整数.求解主方程即要考虑有限的状态数及状态之间转变的几率,主方程的解即为该状态的概率分布.

本文中,采用蒙特卡洛方法,并以正统理论^[5]为基础.隧穿事件发生的几率可由隧穿发生前后系统自由能的变化求得:

$$\Delta F = \frac{1}{2} \left(\sum_i q_i' \phi_i' - \sum_i q_i \phi_i \right) - \Delta W$$

$$\Delta W = \sum_n V_n \Delta q_n \quad (3)$$

式中 ϕ_i, ϕ_i' 分别为电子隧穿发生前后量子岛 i 的电势; q_i, q_i' 分别为电子隧穿前后量子岛的电荷量; V_n 为电压源 n 的电压; Δq_n 为电压源 n 的电荷变化量.

根据正统理论,某一个隧穿事件发生的几率为:

$$\tau = (e^2 R_T)^{-1} \frac{\Delta F}{1 - \exp(-\Delta F/k_B T)} \quad (4)$$

其中 ΔF 为 Helmholtz 自由能的变化; R_T 为隧穿结的电阻; $k_B T$ 为热能.

设库仑岛的电荷分布为 $\{n\} = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$, 其中 n_i 为岛 i 上的剩余电荷.考虑某一分布 $\{n\}$, 设在某一充分长的模拟过程中分布 $\{n\}$ 出现 $S_{\{n\}} (\gg 1)$ 次.

设岛 i 通过隧道结与岛 k 相连,则在分布 $\{n\}$ 时, $S_{\{n\}}$ 中会发生 $f_i^k x S_{\{n\}}$ 次从岛 i 到岛 k 电子的隧穿,其中:

$$f_i^k = \frac{\tau_i^k(\{n\})}{\sum_{i=1}^N \sum_{\Delta(i)} \tau_i^{\Delta(i)}(\{n\})} \quad (5)$$

其中 $\Delta(i)$ 为与岛 i 通过隧道结相连的所有岛的集合; $\tau_i^{\Delta(i)}(\{n\})$ 为岛 i 通过隧道结隧穿到岛 $\Delta(i)$ 的几率.系统在分布 $\{n\}$ 所停留的平均时间为:

$$\Delta t(\{n\}) = \left(\sum_{i=1}^N \sum_{\Delta(i)} \tau_i^{\Delta(i)}(\{n\}) \right)^{-1} \quad (6)$$

这样系统在分布 $\{n\}$ 的总时间为:

$$S_{\{n\}} \Delta t(\{n\}) \quad (7)$$

设连结岛 i 与岛 k 的隧道结为 J_{i-k} , 则在上式所示的总时间内电荷通过结 J_{i-k} 的转移量为:

$$e S_{\{n\}} (f_i^k - f_k^i) = e S_{\{n\}} \left(\frac{\tau_i^k(\{n\})}{\sum_{i=1}^N \sum_{\Delta(i)} \tau_i^{\Delta(i)}(\{n\})} - \frac{\tau_k^i(\{n\})}{\sum_{i=1}^N \sum_{\Delta(k)} \tau_k^{\Delta(k)}(\{n\})} \right) \quad (8)$$

通过结 $i-k$ 的总电流可将所有的电荷分布下转移电荷量除以该分布的时间求得,即:

$$I_{i-k} = e \frac{\sum_{\{n\}} S_{\{n\}} \left(\frac{\tau_i^k(\{n\})}{\sum_{i=1}^N \sum_{\Delta(i)} \tau_i^{\Delta(i)}(\{n\})} - \frac{\tau_k^i(\{n\})}{\sum_{i=1}^N \sum_{\Delta(k)} \tau_k^{\Delta(k)}(\{n\})} \right)}{\sum_{\{n\}} (S_{\{n\}} \Delta t(\{n\}))} \quad (9)$$

考虑到外电极,可将单电子电路中的结点分为两类:外结点,即外电极;内结点,即量子岛.量子岛上的电荷和电势由电容矩阵相联系:

$$q = \hat{C} \phi \quad (10)$$

\hat{C}_{ij} 可理解为在其余电极电势为 0, 电极 i 为单单位电势时电极 j 所诱导产生的电荷量.

\hat{C} 是一个 $N \times N$ 矩阵,其中 $N = N_e + N_i$, N_e, N_i 分别为电路中外部电极结点和内部量子岛结点的数目.将所有的外部结点均排在内部结点之间,矩阵可写为:

$$\hat{C} = \begin{bmatrix} \otimes & -\tilde{C} \\ -\tilde{C}^T & C \end{bmatrix} \quad (11)$$

其中 C 为量子岛之间的 $N_i \times N_i$ 阶对称矩阵; \tilde{C} 是外电极与量子岛之间的 $N_e \times N_i$ 阶矩阵,外电极之间的电容在我们的模拟中可不做考虑.

从(10)、(11)式可得岛 i 的电势:

$$\phi_i = \sum_{j \in \text{island}} C_{ij}^{-1} (q_j + \tilde{q}_j) \quad (12)$$

$$\tilde{q}_j = \sum_{k \in \text{external}} \tilde{C}_{kj} V_k$$

或

$$\phi_i = \sum_{j \in \text{island}} C_{ij}^{-1} q_j + \sum_{k \in \text{ext}} \alpha_{ik} V_k \quad (13)$$

$$\alpha_{ik} = \sum_{j \in \text{island}} C_{ij}^{-1} \tilde{C}_{kj}$$

其中 V_k 为外电极电势.上述关系式使我们能建立外电极电势 $\{V_k\}$ 与岛上电荷分布 $\{q_i\}$ 的关系,系统的动力学行为可由岛上电势的分布 $\{\phi_i\}$ 求得.

利用蒙特卡洛方法模拟首先在于选择一初始电

荷分布 $\{n\}$. 由几率 τ_i^k 决定一马尔可夫链 $\{n\}_0 \rightarrow \{n\}_1 \rightarrow \{n\}_2 \rightarrow \dots$. 在模拟时间充分长以后, 根据(9)式可计算纳电子电路的电流分布.

3 模拟实例

在实际的模拟中, 要输入隧道结的结电阻 R_T 与结电容 C_T , 外加电容的电容值及恒压源的电压. 在电容矩阵 C 中, 量子岛 i 所对应的 C_{ii} 为与岛 i 联结的所有结电容与外加电容之和, 而结点之间的电容 C_{ij} 为联接结点 i 和结点 j 之间所有结电容与外加电容之和. 多余电子在岛间的转移是以整数电子电荷为单位, 在计算自由能变化时, 还必须在每个岛的剩余电荷分布上加上该岛的残余电荷. 量子岛上残余电荷体现了纳电子器件中栅极的作用.

在选定电荷的分布 $\{n\}$ 之后, 就可根据电容矩阵计算各结点的电势, 然后利用蒙特卡洛方法根据各种分布的停留时间及分布之间的相互转换几率, 计算出电流的分布.

用蒙特卡洛方法对图 1 所示单量子岛晶体管进行了模拟. 图 2 为其在 $T=10\text{K}$, 栅电压 $V_g=0$, 岛上残余电荷 $Q_b=0, 0.25e, 0.5e$ 时的 $I-V$ 曲线. 从图中, 可以发现在 $Q_b=0.5e$ 时库仑阻塞基本消失.

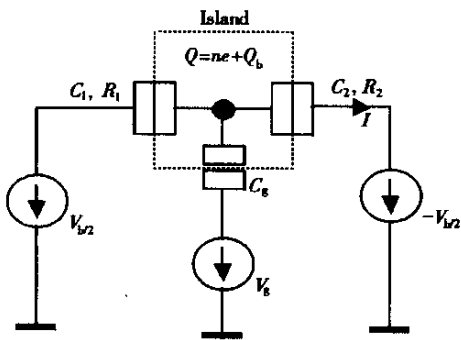


图 1 单量子岛纳电子晶体管模型

Fig.1 SET model of coulomb single island

为消除背景电荷的影响, 考虑图 3 多量子岛晶体管, 它可以由纳米粒子自组装体系得到. 本文模拟一个包含 50 个量子岛、124 个隧道结组成的六边形网格状的多岛纳电子隧穿器件. 为考虑各种纳米粒子颗粒的大小分布, 模拟中设定, 所有的结电容和结电阻在 0.1aF 和 $60\text{M}\Omega$ 附近 $\pm 20\%$ 的范围内随机取值. 图 4 中可以看出库仑阻塞同样存在, 只是由于在多量子器件中串联的电阻比并联的多而导致整个

电流下降. 从图 4 中, 还可以发现, 当在各岛上加以

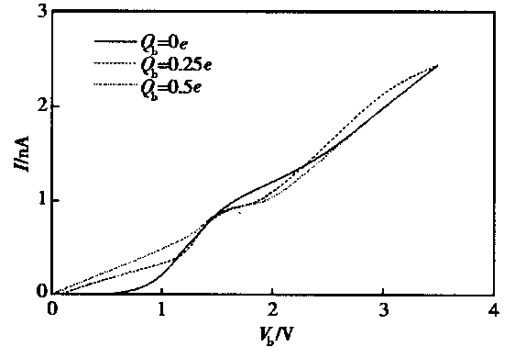


图 2 三种不同背景残余电荷下单量子岛晶体管的 $I-V$ 特性曲线

Fig. 2 $I-V$ curves of single island SET

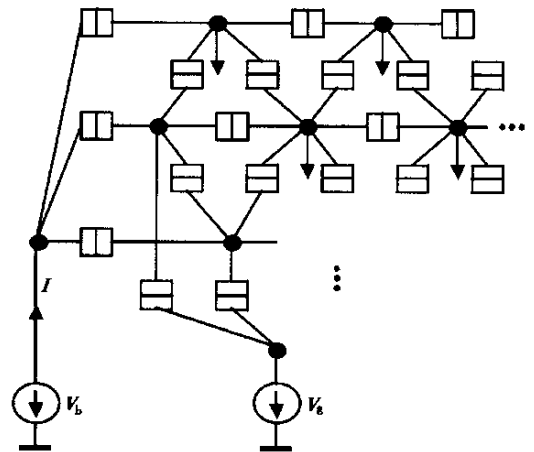


图 3 多量子岛纳电子晶体管阵列

Fig. 3 SET array of coulomb multi-islands

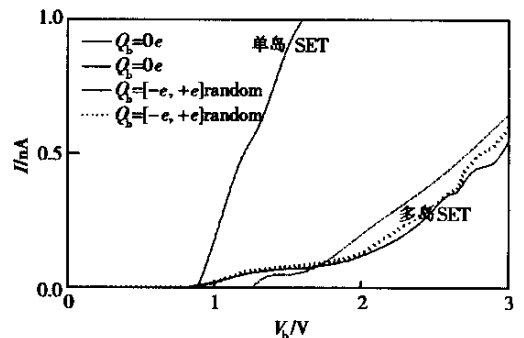


图 4 单量子岛与多量子岛晶体管在 $V_g=0$ 时的 $I-V$ 特性曲线的比较

Fig. 4 Compare of $I-V$ curves for single and multi islands

$[-e, +e]$ 范围内的残余电荷后, 库仑阻塞现象并

没有明显的减弱,有时反而有所增强,这表明多量子岛阵列对残余电荷不十分敏感.

4 结语

蒙特卡洛方法在纳电子器件的半经典模拟中取得了好的结果.对二维量子岛点阵而言,正确选择量子岛之间的电容矩阵以及隧道结电阻都是十分重要的.在实际模拟中,应不断调整选择的参数以更好地拟合实际曲线.计算机模拟技术在量子器件性能的理解与辅助设计方面正起着愈来愈大的作用.计算机模拟工具将对新器件概念的理解与开发新的纳米功能器件十分有意义.研究者们已经得到了一些量子器件的物理模型,并且对 I - V 特性的重复与预测做了大量的工作.然而对不同的材料与器件结构而

言,精确的 I - V 特性预测是十分困难的.这主要是由于材料与器件的复杂结构及工艺方面的某些不确定性.因此,更精确的模型与模拟工具变得十分迫切.

参考文献

- [1] Gorter C J. *Physica A*,1951,17:777
- [2] Giaever I,Zeller H R. *Phys Rev Lett*,1968,20:1504
- [3] Zeller H R,Giaever I. *Phys Rev*,1969,181:789
- [4] Lambe J,Jaclevic R C. *Phys Rev Lett*,1969,22:1371
- [5] Averin D V,Likharev K K. *Mesoscopic phenomena in Solids*. Amsterdam;Elsevier,1991
- [6] Liu H C. Quantum well infrared photodetectors: the basic design and new research directions. *Chinese Journal of Semiconductors*,2001,22(5):529

Monte Carlo Simulation of Tunneling Nanoelectronics Device *

Zhou Jicheng, Long Sirui, He Hongbo and Li Yibing

(*Institute for Computational Science and Informatics, Central South University, Changsha 410075, China*)

Abstract: A simulator based on orthodox theory and Monte Carlo method is depicted. The simulator is suitable for a kind of quantum device—single electron transistors (SET). It simulates the propagation of electrons through a network consisting of quantum tunnel junctions, capacitors and ideal voltage sources. The simulation of the SET which is comprised of coulomb single island and multi-islands are done using the simulator.

Key words: tunnel junction; quantum island; Monte-Carlo method; computer simulation

PACC: 7790; 7135; 7320

Article ID: 0253-4177(2003)S0-0205-04

* Project supported by National Natural Science Foundation of China (Nos. 69971007, 60171043) and by EYTP