

单电子晶体管电流解析模型及数值分析*

苏丽娜¹⁾ 顾晓峰^{1)†} 秦华²⁾ 闫大为¹⁾

1) (轻工过程先进控制教育部重点实验室, 江南大学电子工程系, 无锡 214122)

2) (纳米器件与应用重点实验室, 中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所, 苏州 215123)

(2012年8月20日收到; 2012年11月5日收到修改稿)

本文首先建立单电子晶体管的电流解析模型, 然后将蒙特卡罗法与主方程法结合进行数值分析, 研究了栅极偏压、漏极偏压、温度与隧道结电阻等参数对器件特性的影响. 结果表明: 对于对称结, 库仑台阶随栅极偏压增大而漂移; 漏极电压增大, 库仑振荡振幅增强, 库仑阻塞则衰减; 温度升高将导致库仑台阶和库仑振荡现象消失. 对于非对称结, 源漏隧道结电阻比率增大, 库仑阻塞现象越明显.

关键词: 单电子晶体管, 解析模型, 蒙特卡罗法, 主方程法

PACS: 73.21.La, 73.43.Jn, 85.35.Gv

DOI: 10.7498/aps.62.077301

1 引言

随着集成电路芯片集成度的日益提高, 半导体器件特征尺寸不断缩小, 传统器件的应用受到了前所未有的挑战. 当器件尺寸接近纳米尺度时出现的量子涨落和散热等问题, 使芯片的性能和可靠性变得非常不稳定. 量子效应对半导体器件性能的影响变得格外显著, 宏观输运理论不再适用^[1]. 一些新的器件模型和理论被纷纷提出, 基于量子效应的纳米电子器件的制作及其理论受到了越来越多的关注^[2-4]. 单电子晶体管 (single electron transistor, SET) 是一种基于库仑阻塞效应和单电子隧穿效应的新型纳米电子器件, 具有功耗低、灵敏度高和易于集成等优点. 由于工作原理的不同, SET 的体积可缩小到传统晶体管的 1%, 所需驱动电流也显著减小. 因此, 在大幅提高芯片集成度和工作速度的同时, 能显著降低电路的功耗^[5]. 以 SET 作为集成电路的基本单元, 将引起电子技术的新一轮革命.

本文在单电子正统理论的基础上, 以半经典模型来描述隧道结上离散的单电子隧穿, 建立了 SET 的电路仿真解析模型, 并结合蒙特卡罗法 (Monte

Carlo, MC) 与主方程法 (Master Equation, ME) 对器件进行了理论分析. 与单独采用 MC 或 ME 法对单电子器件进行数值分析相比, 本文将两者有效结合, 得到了精度更高、收敛更快的模拟结果.

2 器件结构与模型

2.1 器件结构

在纳米体系中, 由于能级分立和势垒限制, 当电子进入或离开体系中, 前一个电子会对后一个电子产生库仑排斥, 使电子不能连续地集体传输. 当有电流流通时, 在一定条件下会产生电流中断, 这种电子单个输运的现象称为库仑阻塞现象^[6]. 图 1 为 SET 的结构示意图, SET 由源极、漏极、栅极, 以及介观尺度的量子点构成, 其中量子点又被称为库仑岛. 电子隧穿至库仑岛上时, 将引起岛上能量显著变化, 导致库仑阻塞现象.

SET 可看作一个双隧道结系统, 由库仑岛和两个隧道结组成, 其电容耦合的等效电路如图 2 所示. 图中源极电势为 V_S , 漏极电势为 V_D , 栅极电势为 V_G , 库仑岛上电势为 V_I , 隧道结电阻分别为 R_D , R_S ,

* 国家自然科学基金 (批准号: 11074280)、江苏高校优势学科建设工程项目、中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: JUSRP20914, JUSRP51323B, JUDCF12031, JUDCF12032) 和江苏省自然科学基金 (批准号: BK2012110) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: xgu@jiangnan.edu.cn

隧道结电容分别为 C_D, C_S , 栅极耦合电容为 C_G . 在 SET 器件中, 电子或被束缚在库仑岛上, 或通过隧道效应在库仑岛及电极间传输. 通过两个隧道结来控制岛区内单个电子的隧穿运动, 构成隧道结电流的电子在总的电势差的作用下, 逐个从源极穿过隧道结 S, 经过库仑岛再穿过隧道结 D, 最终运输到漏极. 外加栅压通过电阻或电容耦合至库仑岛上, 通过调节栅压可控制库仑岛上电子的数目, 从而控制电流.

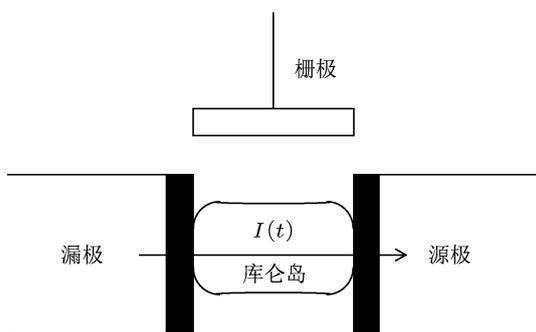


图1 SET的基本结构

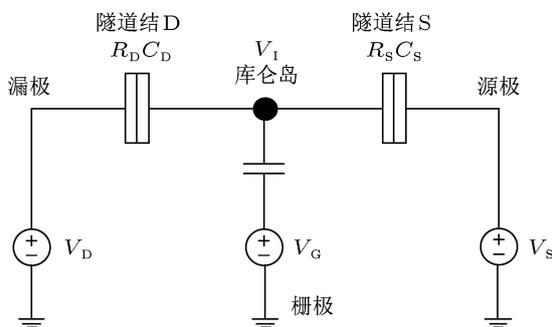


图2 SET电容耦合等效电路

2.2 系统自由能

隧穿概率由系统自由能的增量决定, 因此, 只要得到某一具体隧穿前后系统自由能的变化 ΔF , 即可求得这一事件的隧穿概率 Γ .

假设源极接地, 源极电荷量为 Q_S , 漏极电荷量为 Q_D , 栅极电荷量为 Q_G , 岛上净电子数为 n , e 为基本电荷电量, 则可得到如下方程:

$$Q_D = (V_D - V_1)C_D, \quad (1)$$

$$Q_S = (V_M - V_1)C_S, \quad (2)$$

$$Q_G = (V_G - V_1)C_G, \quad (3)$$

$$Q_S - Q_D - Q_G = -n \cdot e. \quad (4)$$

由(1)—(4)式可求出库仑岛上的电压 V_1 为

$$V_1 = \frac{V_D C_D + V_G C_G - n \cdot e}{C_\Sigma}, \quad (5)$$

其中, 电容总和 $C_\Sigma = C_S + C_D + C_G$.

将库仑岛看成带电 Q 、对外总电容为 C_Σ 的多端系统, 则系统总的静电能 E 为

$$E = \frac{Q_S^2}{2C_S} + \frac{Q_D^2}{2C_D} + \frac{Q_G^2}{2C_G}. \quad (6)$$

隧穿过程中, 外加电源对传输的电荷所做的功 W 为

$$W = \sum_m \int V_m(t) I_m(t) dt, \quad (7)$$

其中, $V_m(t)$ 表示第 m 个电压源, $I_m(t)$ 表示通过第 m 个电压源的电流.

若 n_1 个电子隧穿过隧道结 D, n_2 个电子隧穿过隧道结 S, 则电源 V_D 和 V_G 对通过隧道结 D, S 的电荷所做的功 W_D, W_S 分别为

$$W_D = \frac{n_1 e}{C_\Sigma} [(C_S + C_D)V_D - C_G V_G], \quad (8)$$

$$W_S = \frac{n_2 e}{C_\Sigma} (C_D V_D + C_G V_G). \quad (9)$$

因此, 系统的自由能 F 可表示为

$$\begin{aligned} F &= E - W \\ &= E - W_D - W_S \\ &= \frac{Q_S^2}{2C_S} + \frac{Q_D^2}{2C_D} + \frac{Q_G^2}{2C_G} \\ &\quad - \frac{n_1 e}{C_\Sigma} [(C_S + C_D)V_D - C_G V_G] \\ &\quad - \frac{n_2 e}{C_\Sigma} (C_D V_D + C_G V_G). \end{aligned} \quad (10)$$

由此可得到隧道结 D, S 上发生单电子隧穿时导致的自由能变化分别为

$$\begin{aligned} \Delta F_D^\pm &= F_D(n_1, n_2) - F_D(n_1 \pm 1, n_2) \\ &= \frac{e}{C_\Sigma} \left\{ -\frac{e}{2} \mp [(C_S + C_G)V_D - C_G V_G + ne] \right\} \\ &= -\frac{e^2}{2C_\Sigma} \mp e \cdot (V_D - V_M), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \Delta F_S^\pm &= F_S(n_1, n_2) - F_S(n_1, n_2 \pm 1) \\ &= \frac{e}{C_\Sigma} \left\{ -\frac{e}{2} \pm [ne - C_D V_D - C_G V_G] \right\} \\ &= -\frac{e^2}{2C_\Sigma} \mp e \cdot V_M, \end{aligned} \quad (12)$$

其中, 净电子数 $n = n_1 - n_2$, ΔF_D^+ , ΔF_D^- 分别表示隧道结 D 正向、反向隧穿引起的自由能的变化, ΔF_S^+ ,

ΔF_S^- 分别表示隧道结 S 正向、反向隧穿引起的自由能的变化. 电子隧穿方向如图 3 所示.

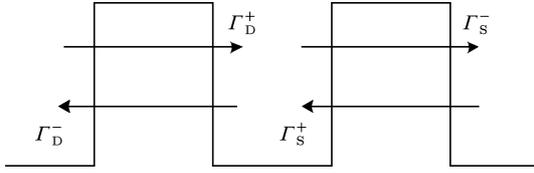


图 3 电子隧穿示意图

2.3 隧穿概率

为简化模型, 忽略了电子隧穿过程的热耗散、隧穿电子对隧道结电极费米能级的影响、以及结电极上电子的能级分裂. 对于金属基隧道结, 其势垒宽度较小、高度相对较大, 可忽略电子的隧穿系数随能量和动量的变化. 根据费米黄金规则, 并考虑自由能的变化, 此时隧穿概率可表示为^[7]

$$\Gamma(\Delta F) = \frac{-\Delta F}{e^2 R_T \left[1 - \exp\left(\frac{\Delta F}{k_B T}\right) \right]}, \quad (13)$$

$$R_T = \frac{\hbar}{2\pi e^2 |T|^2 D_i D_f}, \quad (14)$$

其中, R_T 为隧道结电阻, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度, ΔF 为电子隧穿前后系统自由能的变化量. \hbar 为普朗克常量, $|T|^2$ 为隧穿系数, D_i 为初态时势垒的状态密度, D_f 为末态时势垒的状态密度.

当 $k_B T \ll \Delta F$, 即温度极低或零温度时, Γ 可近似为

$$\Gamma(\Delta F) = \begin{cases} 0, & (\Delta F \geq 0), \\ \frac{-\Delta F}{e^2 R_T}, & (\Delta F < 0). \end{cases} \quad (15)$$

因此, 在零温度下, 只有自由能减少时隧穿事件才会发生. 当 ΔF 为正时, 隧穿概率为 0, 此时隧道结处于库仑阻塞状态.

因此, 电子的隧穿概率 Γ 可表示为

$$\Gamma_{D,S}^{\pm} = \frac{-\Delta F_{D,S}^{\pm}}{e^2 R_{D,S} \left[1 - \exp\left(\frac{\Delta F_{D,S}^{\pm}}{k_B T}\right) \right]}, \quad (16)$$

式中, Γ_D^+ , Γ_D^- 分别表示隧道结 D 的正向、反向隧穿概率, Γ_S^+ , Γ_S^- 分别表示隧道结 S 的正向、反向隧穿概率. 隧道结 D, S 上总的隧穿概率分别表示为

$$\Gamma_D(n) = \Gamma_D^-(n) - \Gamma_D^+(n), \quad (17)$$

$$\Gamma_S(n) = \Gamma_S^+(n) - \Gamma_S^-(n). \quad (18)$$

2.4 库仑阻塞与单电子隧穿条件

通过改变 V_G 可改变 $\Delta F_{D,S}$, 从而控制 SET 处于阻塞或隧穿状态. 当 $\Delta F > 0$ 时, 在绝对零度时隧穿概率 Γ 为 0, 此时隧道结处于库仑阻塞状态, 因此, 由 (11), (12) 式可得到库仑阻塞区为

$$\frac{e^2}{2C_\Sigma} \pm e \cdot (V_D - V_M) < 0, \quad (19)$$

$$\frac{e^2}{2C_\Sigma} \pm e \cdot V_M < 0. \quad (20)$$

将 V_M 代入 (19), (20) 式中, 可求得 $V_D - V_G$ 的关系. 若考虑背景电荷 Q_p , 则相当于在栅压 V_G 上叠加了一个偏压, 可定义为

$$V'_G = V_G + Q_p / C_G. \quad (21)$$

由 (5), (19), (20), (21) 式可得

$$-\frac{e}{2} - n \cdot e + C_G V'_G < V_D < \frac{e}{2} - n \cdot e + C_G V'_G, \quad (22)$$

$$-\frac{e}{2} + n \cdot e - C_G V'_G < V_D < \frac{e}{2} + n \cdot e - C_G V'_G. \quad (23)$$

由 (22), (23) 式可求得库仑阻塞区, 如图 4 所示. 图中黑色区域为库仑阻塞区, 当处于该区域时, 量子点内的电子数目维持为恒定值; 在其他区域, 库仑岛上的电子数目存在涨落, 即存在单电子隧穿.

3 模拟方法

本文采用 MC-ME 法, 即将蒙特卡罗法与主方程法结合起来, 对 SET 进行数值模拟研究.

3.1 蒙特卡罗法

MC 法从所有可能的隧穿事件出发, 计算隧穿概率. 根据单电子正统理论, 所有隧穿事件均独立且按指数分布, 按概率随机选择某一隧穿事件, 以此为基础模拟单电子系统的电子输运过程.

根据目前所处的状态 S_0 , 得出发生一次随机隧穿事件后可能出现的所有状态 S_j ($j = 1, 2, 3, \dots, m$) 的概率 Γ_j , 以及相应隧穿事件的发生时刻 τ_j , 则在 τ_j 时刻发生隧穿的概率为

$$p(\tau_j) = e^{-\Gamma_j \tau_j}. \quad (24)$$

用 [0,1] 内均匀分布的随机数 r 产生 $p(\tau_j)$, 来模拟某个隧穿事件发生与否, 可得

$$\tau_j > \frac{1}{\Gamma_j} \ln \frac{1}{r}. \quad (25)$$

在所有隧穿事件中, 具有最短时间间隔的隧穿事件将会发生. 选择 $\tau_j = \min[\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k]$ 作为下一次实际隧穿事件的发生时刻, 其对应的状态 S_j 即系统的下一个状态. 如此循环, 每一步结束后系统都根据新状态进行调整, 然后进行下一步计算. 若遇到 τ_j 大于某一预先设定的时间, 则认为将要发生的时间是极其稀有事件. MC 方法有利于系统微观过程的理解, 但鉴于稀有事件需要花费大量的运算时间, 因而并不利于模拟稀有事件.

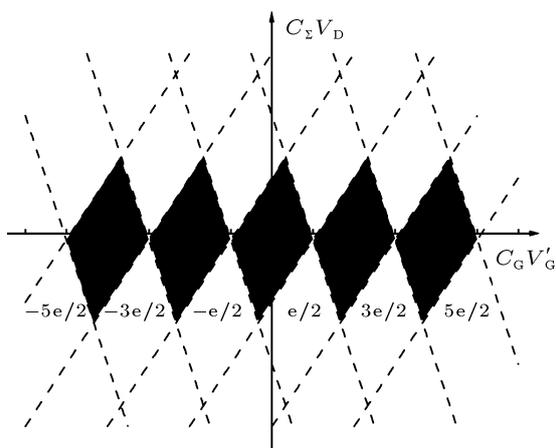


图4 库仑阻塞区示意图

3.2 主方程法

ME 法通过求解单电子系统运输的主方程, 得到系统处于各状态的概率, 从而获得各个电学量的期望值. 若假设系统的电子隧穿与过去状态无关, 即系统无记忆性, 隧穿概率只取决于系统当时的瞬时状态, 则主方程可简化成^[8]

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(n,t)}{\partial t} = & [\Gamma_D^+(n-1) + \Gamma_S^+(n-1)]p(n-1) \\ & + [\Gamma_D^-(n+1) + \Gamma_S^-(n+1)]p(n+1) \\ & - [\Gamma_D^+(n) + \Gamma_S^+(n) + \Gamma_D^-(n) \\ & + \Gamma_S^-(n)]p(n). \end{aligned} \quad (26)$$

由归一化条件 $\sum_{n=-\infty}^{+\infty} p_n = 1$ 可求出隧穿电流

$$I_D = e \left| \sum_{n=-\infty}^{+\infty} p(n) \left[\Gamma_D^-(n) - \Gamma_D^+(n) \right] \right|, \quad (27)$$

$$I_S = e \left| \sum_{n=-\infty}^{+\infty} p(n) \left[\Gamma_S^-(n) - \Gamma_S^+(n) \right] \right|. \quad (28)$$

虽然 ME 法能给出准确的理论结果, 但仍存在许多不可行因素, 限制了 ME 法的精度和可用性.

单电子系统状态数无限, 但大部分状态出现概率为 0. 为了达到仿真的要求, 应尽可能考虑较多的相关态, 但若考虑的态太多, 叠代收敛慢; 反之则难以保证结果的精确度. ME 法有利于分析稀有事件, 但收敛速度慢, 仿真时间极长, 数值稳定性较差.

3.3 MC-ME 法

为了克服 MC 和 ME 两种方法的缺点, 本文提出了 MC-ME 法, 即将蒙特卡罗法与主方程法有效地结合起来, 对器件进行数值模拟分析. 根据态发生的概率把整个空间分成常态空间和稀有空间两部分, 用 MC 法模拟常态空间的事件, 而用 ME 法模拟稀有态空间的事件, 这样能得到精确度较高、收敛较快的模拟结果^[9].

4 结果与讨论

由前文建立的数学模型可以发现, 栅压、漏压、温度、结构参数对器件特性均有影响. 在此模型的基础上, 利用 MC-ME 法对器件进行数值模拟. 计算的结果与文献报道的实验结果^[10-12] 能较好地符合, 表明所建立的解析模型可以真实反映不同参数下隧穿电流的变化趋势.

图 5 所示为 SET 器件的 $I-V_D$ 关系, 从中可以看到明显的库仑台阶现象. 固定栅极电压, 隧穿电流随源漏偏压以台阶式增加变化, 台阶间隔为 e/C_D . 每一个台阶对应库仑岛上增加一个电子, 增加一个电子输运, 发生一次跃迁. 岛上的电子态数目随外加电压的增大而呈量子化增大, 图中则表现为台阶形变趋势, 台阶的个数反映出库仑岛上积蓄的电子数目. 同时, 调控外加栅压可使岛中电荷能增加或降低, 栅压 V_G 影响第一个库仑台阶的出现. V_G 越大, 开启电压越大, 使 $I-V_D$ 曲线向右移动, 但台阶的周期及高度未发生变化.

图 6 给出了 SET 器件的库仑振荡现象, 可以看到电流随栅压呈周期性振荡. 固定源漏极偏压, 隧穿电流将随栅极偏压的变化而振荡. 随着栅压改变, 电荷隧穿进入或离开岛, 岛区电荷数发生改变, 每增加或减少一个电荷 e , 隧穿电流就完成一次振荡. 当库仑岛中的电子数较大或库仑岛的量子能级效应可忽略时, 电流的振荡为周期性的库仑振荡, 振荡周期为 e/C_G . 从图 6 还可以看出, 漏电压 V_D 的越大, 振幅越大, 振荡越明显. 这是由于随着 V_D 的升高, 源极和库仑岛、岛和漏极电势差增加. 此时,

对于势垒两侧相同的能级, 一侧有电子占据而同时另一侧没有电子占据的概率增大, 使隧穿概率增大, 电流增大.

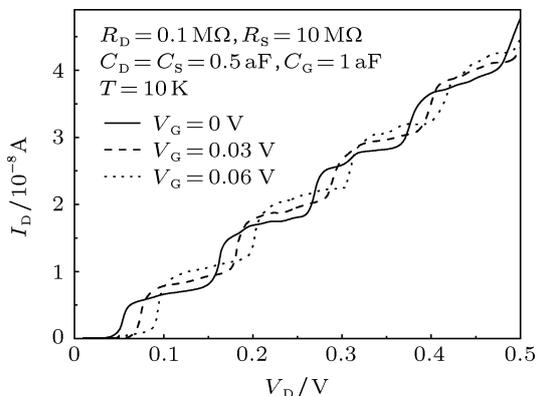


图5 不同栅压下的输运特性

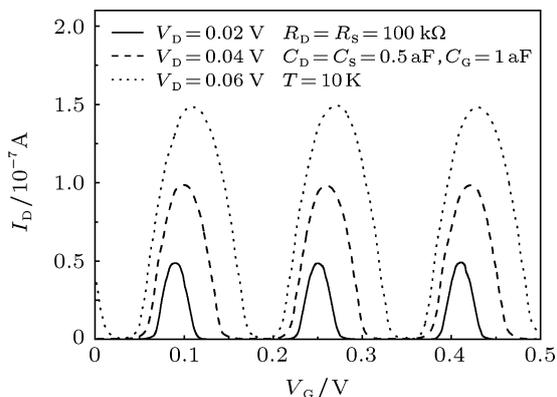


图6 不同漏压下的 SET 的转移特性

图7分析了温度 T 对 SET 器件 I_D-V_D 和 I_D-V_G 的影响. 从图7(a)可看出, 当温度 T 较低时, I_D-V_D 曲线上呈现明显的库仑台阶. 随着温度的升高, 库仑台阶逐渐变模糊. 当温度很高时, $I-V$ 将趋向于线性关系. 这是因为随着温度的升高, 电子的热扰

动增强, $k_B T$ 逐渐大于库仑阻塞能 $e^2/2C = 40$ meV, 隧穿受温度的影响严重, 正统理论不再适用. 要呈现出库仑阻塞现象, 必须抑制电子的热扰动. 从图7(b)可看出, 低温时库仑阻塞现象明显. 随着温度的升高, 库仑阻塞区逐渐变窄直至消失, 且电流振幅逐渐变小.

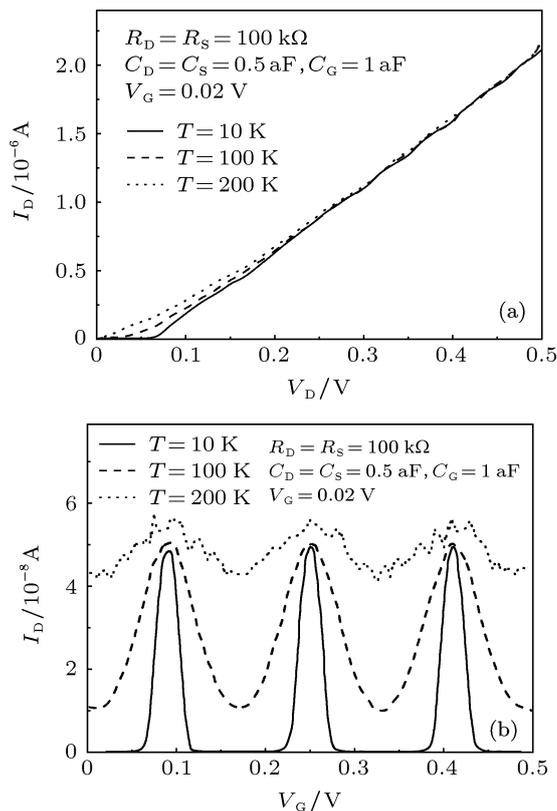


图7 温度对 SET 器件特性的影响 (a) I_D-V_D 曲线; (b) I_D-V_G 曲线

图8给出了隧道结电阻变化对器件特性的影响. 从图8(a)可看出, 当两个隧道结电阻相同时, 台阶现象不明显. 随着电阻比率的增大, 库仑台阶逐

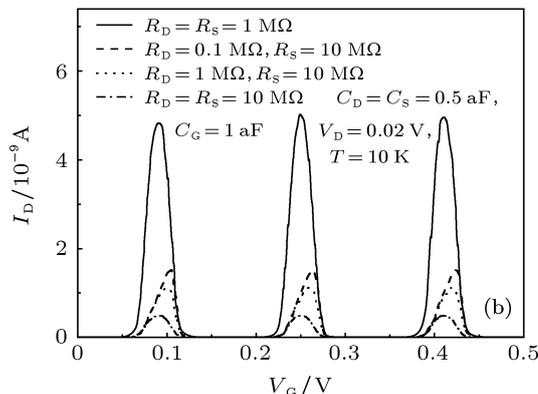
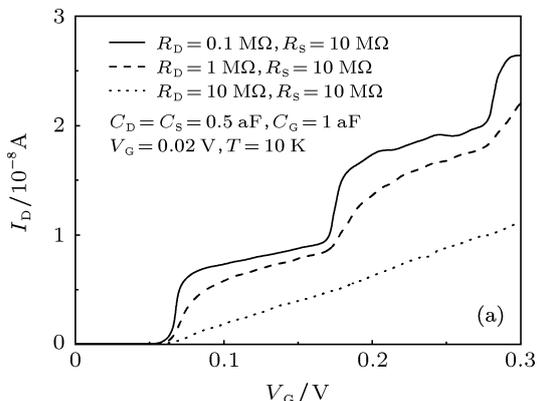


图8 隧道结电阻对 SET 器件特性的影响 (a) I_D-V_D 曲线; (b) I_D-V_G 曲线

渐变得更明显. 两个隧道结电阻的不同导致两个隧道结的隧穿概率相差很大, 势垒较高的隧道结限制着器件的电流. 从图 8(b) 可看出, 当隧道结对称时, 随着隧道结电阻的增加, 库仑振荡的振幅变小. 当隧道结是非对称时, 电阻比率越大, 库仑振荡不对称性越明显. 这是因为当隧道结电阻不相等时, 两个隧道结的隧穿概率不同, 导电能力不同, 导致了振荡曲线的不对称. 同时还可看到, 振荡周期并未随着温度的变化而变化.

5 结论

在正统理论的基础上建立了单电子器件的数

学模型, 并采用 MC-ME 法进行了数值模拟, 研究了栅压、漏压、温度、隧道结电阻等参数对器件特性的影响. 结果表明, 栅压影响库仑岛上的电子数目, 通过控制栅压可周期性地调控电流; 同时, 栅压和漏压的增大均抑制库仑阻塞效应. 随着隧道结电阻比率的增加, 隧穿概率相差越大, 库仑阻塞现象越明显. 随着温度升高, 库仑阻塞效应逐渐变弱. 理论计算值与文献报道的实验结果能很好地符合, 表明所建立的器件模型能较好地反映器件特性的变化趋势. 本文发展的模型简单、易于理解, 对单电子器件的辅助设计和结构参数的选取具有一定的指导意义.

-
- [1] Likharev K K 1999 *P. IEEE* **87** 606
- [2] Sui B C, Fang L, Zhang C 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 077302 (in Chinese) [隋兵才, 方粮, 张超 2011 物理学报 **60** 077302]
- [3] Lui Y X, Wang Y C, Du S Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2734 (in Chinese) [刘彦欣, 王永昌, 杜少毅 2004 物理学报 **53** 2734]
- [4] Wu F, Wang T H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2829 (in Chinese) [吴凡, 王太宏 2002 物理学报 **51** 2829]
- [5] Wang W, Liu M, Hsu A 2006 *J. Comput. Sci. Technol.* **21** 871
- [6] Ali D, Ahmed H 1994 *Appl. Phys. Lett.* **64** 2119
- [7] Wasshuber C 2001 *Computational Single Electronics* (New York: Springer) p9
- [8] Likharev K K 1988 *IBM J. Res. Dev.* **32** 144
- [9] Wasshuber C, Kosina H, Selberherr S 1997 *IEEE T. Comput. Aid D* **16** 937
- [10] Choi B H, Hwang S W, Kim I G, Shin H C, Kim Y, Kim E K 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 3129
- [11] Zhuang L, Guo L, Chou S Y 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 1205
- [12] Tilke A, Pescini L, Blick R H, Lorenz H, Kotthaus J P 2000 *Prog. Mater. Sci.* **71** 357

Analytical I - V model and numerical analysis of single electron transistor*

Su Li-Na¹⁾ Gu Xiao-Feng^{1)†} Qin Hua²⁾ Yan Da-Wei¹⁾

1) (Key Laboratory of Advanced Process Control for Light Industry (Ministry of Education), Department of Electronic Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

2) (Key Laboratory of Nanodevices, Suzhou Institute of Nano-tech and Nano-bionics, Chinese Academy of Sciences, Suzhou 215123, China)

(Received 20 August 2012; revised manuscript received 5 November 2012)

Abstract

The analytical I - V model of single electron transistor has been established and simulated by combining the Monte Carlo method with the Master Equation method. Effects of gate voltage, drain voltage, temperature, and tunneling junction resistance on electrical characteristics of a single electron transistor are analyzed. Simulation results indicate that for the device with symmetrical tunneling junction structure, the Coulomb staircases shift with increasing gate voltage, and the Coulomb oscillation amplitude increases with increasing drain voltage, while the Coulomb gaps decrease. The Coulomb staircases and the Coulomb oscillation disappear gradually with increasing temperature. The Coulomb blockade effects become more significant when the resistance ratio of the two asymmetrical tunneling junctions increases.

Keywords: single electron transistor, analytical model, Monte Carlo, master equation

PACS: 73.21.La, 73.43.Jn, 85.35.Gv

DOI: 10.7498/aps.62.077301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11074280), the PAPD of Jiangsu Higher Education Institutions, and the Fundamental Research Funds for Central Universities (Grant Nos. JUSRP20914, JUSRP51323B, JUDCF12031, JUDCF12032), and the Natural Science Foundation of Jiangsu (Grant No. BK2012110).

† Corresponding author. E-mail: xgu@jiangnan.edu.cn