

非对称性隧穿电容单电子器件模型与模拟

罗佳亮, 李 焱

(中国科学技术大学物理系, 安徽合肥 230026)

摘要: 在基于单电子晶体管的半经典理论和主方程模型的基础上, 提出了一种采用非对称隧穿电容设计的单电子晶体管, 并用计算机模拟了对称结构的单电子晶体管和非对称隧穿电容(电阻)结构单电子晶体管的特性. 模拟结果表明, 用主方程法模拟非对称隧穿电容(电阻)结构设计的晶体管, 其伏安特性曲线除仍保留对称结构具有的周期性以外, 还具有正弦态、电阻态、方波态、截止态四种形态, 其性能也有差异.

关键词: 单电子; 主方程; 隧穿电容; 非对称性

中图分类号: TN323+.5 **文献标识码:** A

Modeling and simulation of single-electron devices by asymmetric tunneling capacitance

LUO Jia-liang, LI Yao

(Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: After reviewing some intriguing literature regarding the orthodoxy theories, a new single-electron transistor constructed by unsymmetrical tunneling capacitance was proposed. Through the master-equation methods, both the symmetry tunneling capacitance and asymmetric tunneling capacitance were simulated on the computer. The results indicate that the characteristic curve of the single-electron transistor based on asymmetric tunneling capacitance presented not only the periodicity in structure of symmetry tunneling capacitance but also four states: sine wave-state, resistance-state, pane-state as well as forbid-state, all with different capabilities.

Key words: single-electron; master-equation; tunneling capacitance; unsymmetry

0 引言

单电子器件因为其低功耗、高速率及灵敏度, 成为新器件的宠儿. 然而它增益低, 不利于级联; 正反向逻辑同时存在, 可能出现干扰; 由于隧穿几率问题, 无法准确控制器件逻辑及其时间^[1]等缺点. 因此现单电子器件主要用于晶体管^[2]、存储器、单电子回转栅^[3]、单电子参量逻辑器件^[4]等. 为克服单电子器

件的缺点和工艺上的困难, 人们提出了很多解决办法, 理论上也有了完整的解析表达式和近似计算方法. Yano 等^[5], Lutwyche 等^[6]阐明了隧穿电阻和隧穿电容之间的关系. 1985 年 Averin 等构造了单电子的半经典理论^[7]为其数值模拟奠定了基础. Ben-Jacob 小组提出了描述单电子的主方程理论^[8]. 目前单电子器件出于工艺方面的考虑, 主要采用对称设计, 非对称设计的研究比较少. 而采用非对称设

计,能有效减少正反逻辑同时存在造成的干扰. 本文从单电子的主方程理论出发,讨论其隧穿电容(电阻)的非对称性对器件性能造成的影响,以期找出单电子器件设计的新思路.

图 1 是单电子晶体管的结构及等效电路图. 它由两个隧穿结 J_D 和 J_S 联结而成. 两个隧穿结中间称为库仑岛. 两结的隧穿电阻和隧穿电容分别为 R_D, R_S 和 C_D, C_S . G 极接控制栅电压 V_G , 栅电容为 C_G . B 极接衬底层, 底电容为 C_B . 由于量子的隧穿是离散的, 故库仑岛上的电荷数目为整数 N .

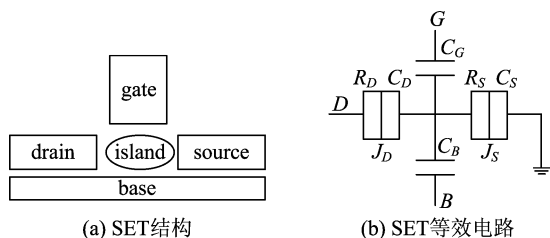


图 1 单电子器件

Fig. 1 Single-electron transistor

1 模型

单电子系统的计算主要基于半经典理论, 该理论将隧穿哈密顿量 H_T 相对 H_0 看成一个小量, 用微扰论计算电子的隧穿几率^[9,10], 即

$$H = H_0 + H_T \quad (1)$$

$$H_0 = H_D + H_S + H_I + H_{CH} \quad (2)$$

式中, H_D, H_S, H_I 分别表示漏结、源结及库仑岛准粒子的哈密顿量; H_{CH} 表示库仑岛的充电能, 其表达式分别为

$$H_{D/S/I} = \sum_{k, \sigma \in D/S/I} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \quad (3)$$

$$H_{CH} = (\hat{n}e - Q_G)/(2C) \quad (4)$$

式中, ϵ_k 为准粒子能量, $c_{k\sigma}^{\dagger}$ 和 $c_{k\sigma}$ 分别是准粒子的产生湮灭算符; k 和 σ 分别为准粒子的波矢和自旋量子数. C 为库仑岛的总电容, \hat{n} 为库仑岛的量子数算符, Q_G 为电容耦合库仑岛感应电荷, 称为剩余电荷.

而 $H_T = H_{T \cdot D} + H_{T \cdot S}$ 为隧穿哈密顿量, 表示为源、漏隧穿结的哈密顿量之和. 漏隧穿哈密顿量则可表示为

$$H_{T \cdot D} = \sum_{k, \sigma \in D} \sum_{q, \sigma \in I} T_{kq} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{q\sigma} + hc = H_{T \cdot D}^{\dagger} + H_{T \cdot D} \quad (5)$$

源隧穿结亦有类似表示.

运用费米黄金规则^[11]并考虑自由能的变化, 则

初态 i 到末态 f 的隧穿几率为

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_T | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f) \quad (6)$$

式中, 初、末态均为准粒子的本征态. 设初、末态均为连续分布的准粒子态, 则通过漏结向库仑岛隧穿电子的几率对体系可能的初、末状态积分可得

$$\Gamma_D^{\dagger} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dE_i dE_f dr_D dr_I \rho(r, E_i) \rho(r, E_f) \cdot |\langle E_i | H_{T \cdot D}^{\dagger} | E_f \rangle|^2 f_D(E_i) [1 - f_I(E_f)] \delta(E_i - E_f) \quad (7)$$

式中, $f_{D/I}$ 为漏极和库仑岛准粒子的费米分布函数, $\rho(r, E)$ 为初、末态密度(单位体积单位能量间隔内的状态数). 由式(5) $H_{T \cdot D}^{\dagger}$ 的具体表达式可推出其矩阵元仅当初态 $|E_i\rangle = |\dots 1k\sigma \dots 0q\sigma \dots\rangle$, 末态为 $|E_f\rangle = |\dots 0k\sigma \dots 1q\sigma \dots\rangle$ 时不为零, 其他皆为零. 代入式(7)得

$$\Gamma_D^{\dagger} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dE_i dE_f dr_D dr_I \rho(r, E_i) \rho(r, E_f) \cdot \sum_{k, q, \sigma} |T_{kq}|^2 f_D(\epsilon_k) [1 - f_I(\epsilon_q)] \delta(\epsilon_k - \epsilon_q - \Delta E_{CH}) \quad (8)$$

式中, $\Delta E_{CH} = E_{CH}(n+1, Q_G) - E_{CH}(n, Q_G) - eV_L$ 为系统前后静电能的变化.

设隧穿矩阵元与准粒子能量 ϵ_k 无关, 并用平均隧穿矩阵元 T^2 代替 $\sum_{k, q, \sigma} |T_{kq}|^2$, 即 $T^2 \equiv \sum_{k, q, \sigma} |T_{kq}|^2$. 当温度较低时, 式(8)中的态密度可以用费米能级处的态密度代替, 并假设其态密度在两极与库仑岛是均匀分布的, 这样态密度可以提到积分号外, 令

$$R_T \equiv \frac{\hbar}{4\pi e^2 |T|^2 \rho_D(\epsilon_k) \rho_I(\epsilon_q) V_D V_I} \quad (9)$$

则式(8)可简化为

$$\Gamma_D^{\dagger} = \frac{1}{e^2 R_T} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_k d\epsilon_q f_D(\epsilon_k) [1 - f_I(\epsilon_q)] \delta(\epsilon_k - \epsilon_q - \Delta E_{CH}) \quad (10)$$

当纳米隧穿结的电极为金属时, 费米能级远高于导带底, 且用自由能变化 ΔF 表示静电能变化 ΔE_{CH} , 因此

$$\Gamma(\Delta F) = \frac{\Delta F}{e^2 R_T \left[1 - \exp\left(\frac{\Delta F}{K_B T}\right) \right]} \quad (11)$$

实际上, 势垒的形状和高度会影响到 $|T|^2$. 例

如,电子能量 E 大于势垒高度 U 或者共振隧穿都可能使 $\Gamma=1$ 或接近 1. 由于通常情况下该单电子器件工作电压很小,所以只是用到高方势垒近似即可. 因此后面本文将直接对 R_T 取值,不再直接计算 $|T|^2$.

系统的自由能又强烈影响到隧穿几率. 当自由能增加的时候,隧穿几率大大降低. 自由能 ΔF 的变化包括电场能的变化、费米势的变化、束缚能的变化以及电场力做功等. 假设电极与库仑岛采用相同的材料制作,则自由能的变化主要与电场能及做功有关,于是

$$\Delta F_D^\pm(N, V_D, V_S, V_G, V_B) = \frac{e^2}{2C_\Sigma} \pm e[V_D - V_I(N, V_D, V_S, V_G, V_B)] \quad (12)$$

$$\Delta F_S^\pm(N, V_D, V_S, V_G, V_B) = \frac{e^2}{2C_\Sigma} \pm e[V_S - V_I(N, V_D, V_S, V_G, V_B)] \quad (13)$$

式中, C_Σ 是各部分电容之和, V_I 为库仑岛上电压.

当各电极电压都确定下来时, V_I 和岛上电荷数目 N 只有一个是独立的,因此可以将 V_I 用 N 表示代入得到 Γ . 不同电子数占据几率 $P(N, t)$ 将满足库仑岛不同电子数态占据概率的主方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(N, t)}{\partial t} = & [\Gamma_D^+(N-1) + \Gamma_S^+(N-1)]P(N-1) + \\ & [\Gamma_D^-(N+1) + \Gamma_S^-(N+1)]P(N+1) + \\ & [\Gamma_D^+(N) + \Gamma_S^+(N) + \Gamma_D^-(N) + \Gamma_S^-(N)]P(N) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\sum_{N=-\infty}^{\infty} P(N) = 1 \quad (15)$$

若求稳态解,则式(14)左边为零. 求解出 $P(N)$,则可得电流 $I^{[12,13]}$ 为

$$\begin{aligned} I(V_G, V_S, V_D, V_B) = & e \left\{ \sum_{N=-\infty}^{\infty} P(N) [\Gamma_S^+(N) - \Gamma_S^-(N)] \right\} = \\ & e \left\{ \sum_{N=-\infty}^{\infty} P(N) [\Gamma_D^-(N) - \Gamma_D^+(N)] \right\} \end{aligned} \quad (16)$$

岛上电势亦可得

$$V_I(V_G, V_S, V_D, V_B) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} P(N) (C_D V_D + C_G V_G + C_S V_S + C_B V_B + Ne) / C_\Sigma \quad (17)$$

所以模拟的关键就在于式(14)主方程的求解. 在计算和模拟中,取遍 N 的所有可能值, N 从 $-\infty$ 到 ∞ 是不可能的. 可行的做法是,在 \bar{N} 附近取若干个状态,并计算这若干个状态的概率. 这样模拟的结

果与实际情况并不会有多大的误差,因为距离 \bar{N} 差距较大的值取得的概率是按指数递减的. 一般取 \bar{N} 附近 4~20 个状态就可以了. 故

$$A = \bar{N} = \text{Int} \left(-\frac{1}{e} \left(C_\Sigma \frac{R_S V_D}{R_S + R_D} - C_D V_D - C_G V_G - C_S V_S - C_B V_B \right) \right) \quad (18)$$

取 $S=4\sim 20$,那么计算 $A-S$ 到 $A+S$ 这 $2S+1$ 个状态即可.

由式(14)主方程及式(15)归一化条件可得矩阵方程

$$\mathbf{M}\mathbf{P} = \mathbf{b} \quad (19)$$

式中, \mathbf{P} 即 $P(N)$ 矩阵表示, \mathbf{b} 是末项为 1,其余为 0 的 $(2S+2) \times 1$ 矩阵,故

$$M(i, j) = \begin{cases} 1, & i = 2S + 2 \\ -\Gamma_S^+(i) - \Gamma_S^-(i) - \Gamma_D^+(i) - \Gamma_D^-(i), & i = j \\ \Gamma_S^+(j) + \Gamma_D^+(j), & i = j + 1 \\ \Gamma_S^-(j) + \Gamma_D^-(j), & i = j - 1 \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (20)$$

2 模拟结果

利用 Matlab 软件很容易编程进行数值模拟及求解. 由于单电子晶体管在正常工作时,必需满足 $KT < e^2/2C$. C 越小, T 越高. 当 C 为 10^{-15} F 时,工作温度约为 1 K,要使器件在常温下工作,则 C 要小于 $3a$ F^[14]. 同时要观察到库仑阻塞效应,还要保证系统的总电阻 R 大于量子电阻 $R_k = h/e^2 \approx 26$ k Ω , h 为普朗克常数,这样才能避免由量子涨落引起的波动^[15].

取 $T=4.2$ K, $V_B = V_S = 0$ V, V_D 为 10~120 mV,每 10 mV 做一条 $I-V_G$ 特性曲线, V_G 从 20 mV 到 500 mV 连续变化, $R_S = R_D = 10^6$ Ω ,各部分电容均为 10^{-18} F. 这时,可以看到典型的单电子 $I-V_G$ 特性曲线. 如图 2 所示,随着 V_G 增大,隧穿电流 I 周期性地变大变小,分别对应库仑阻塞和库仑导通区域,其周期为 $T=e/C_G=160$ mV. 当 V_D 增大时,其特性曲线趋于平缓,将类似于电阻的 $I-V$ 特性曲线. 此时由于器件采用完全对称的设计,源、漏结形状、大小、参数完全一样,所以其隧穿电容及电阻都完全相同. 这样设计的优点是工艺简单,器件连接方便.

为解决增益以及因正反逻辑同时存在对器件逻

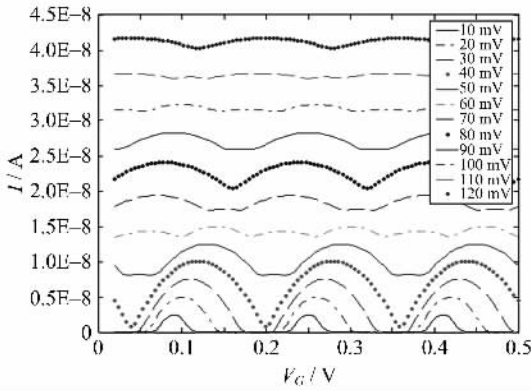


图 2 对称结构的 $I-V_G$ 特性曲线

Fig. 2 Characteristic curve of $I-V_G$ of symmetry structure

辑产生干扰等缺点, 本文考虑采用非对称设计来提高增益及消除反向逻辑.

采用非对称性隧穿电容设计时, 如果源漏之间的隧穿电容或者隧穿电阻有较大不同时, 如当 $C_S = 10, C_D = 10^{-17}$ F, 将能较好地分辨非对称设计与对称设计之间的差异. 隧穿电阻 $R \propto \frac{1}{|T|^2}$, 由量子力学有限高方势垒隧穿几率 $|T|^2 \approx \frac{16E(U-E)}{U^2} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}d\right)$ 确定. 其中, U 为势垒高度, m, E 分别为电子质量与能量. 可见势垒高度和宽度对隧穿电阻有明显的影响, 相比较而言, 势垒宽度比势垒高度影响更显著. 在具体制造中, 势垒宽度和高度都很容易控制. 例如, 由半导体异质结构 2 维电子气制造平面型电子晶体管, 改变栅极图形, 就可以改变势垒的高度和宽度, 栅极突出部分直接影响该势垒的宽度, 栅极突出部分的长度可影响势垒(最低部分)的高度, 而将左右势垒分开制作, 分别加上不同的电压, 就可以控制两个势垒

的高度. 运用以上技术, 很容易制造左右势垒不对称的单电子晶体管, 以满足不同需要.

由于不同的单电子器件可能采取不同的形状及构造, 因此本文同时考虑三种典型的电容计算公式

$$\text{平板电容器 } C = \frac{\epsilon S}{d}$$

$$\text{圆柱电容器 } C = \frac{2\pi\epsilon L}{\ln \frac{R_{\text{外径}}}{R_{\text{内径}}}}$$

$$\text{球电容 } \frac{4\pi\epsilon R_{\text{外径}} R_{\text{内径}}}{R_{\text{外径}} - R_{\text{内径}}} = \frac{4\pi\epsilon R_{\text{外径}} R_{\text{内径}}}{d}$$

式中, d 为两电极之间的距离, 由上述三种电容器对应函数公式易得, 若其他参数不变, 则 C 变大, 则 d 要变小, 进而隧穿电阻 R 变小. 为与上面对称情形下进行对比, 我们不妨取 $R_S = \frac{1}{2} R_D, \frac{1}{5} R_D, \frac{1}{10} R_D$, R_D 仍然为 $10^6 \Omega$ 的情形, 则分别得到三组 $I-V_G$ 特性曲线.

由图 3 可以看到, 这组特性曲线都具有相同的特征: ① 电流 I 随 V_G 变化具有周期性, 周期仍然为 e/C_G ; ② 源漏电压 V_{DS} 可分为 4 个区域: 当 V_{DS} 极小时, 仍出现对称单电子晶体管的 $I-V$ 特性曲线; 随着 V_{DS} 的增大, 很快变成电阻的典型 $I-V$ 特性曲线; V_{DS} 进一步增大, 到某一区间时, 库仑阻塞和库仑导通再次周期性出现, 不过此时的特性曲线呈方波形状. 然而对于这组新增的方波曲线, I_{max} 缓慢增大, 但是 V_{DS} 的细微变化都能引起占空比的剧烈变化, 在 V_{DS} 改变约 20 mV 的区间内, 其占空比却从 1 变化到 0, 这种状态称为方波态. V_{DS} 若继续增大, 则电流 I 基本为 0, 称为截止态. 与对称设计相比较而言, 非对称结构的器件电阻态区间更宽, 但库仑阻塞和库仑导通的工作区间变窄. 也就意味着在栅极电

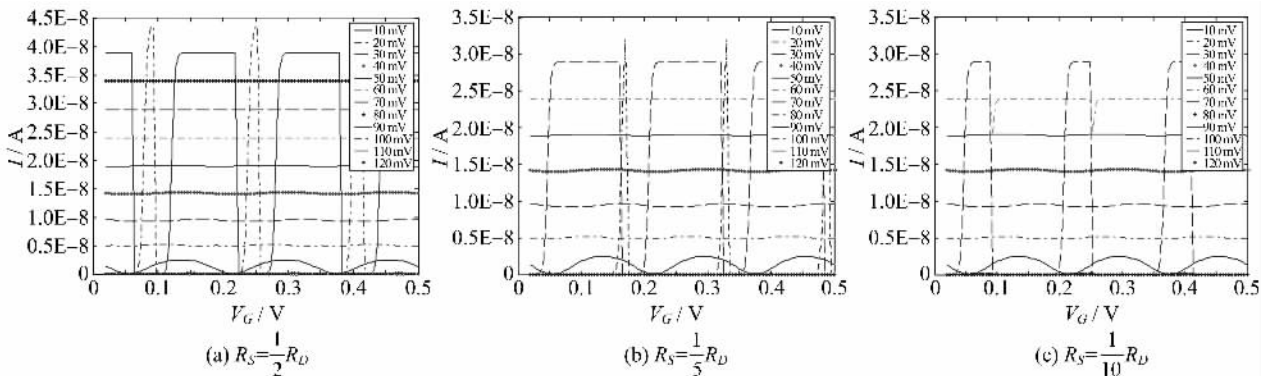


图 3 $I-V_G$ 特性曲线

Fig. 3 I via V_G

压为库仑阻塞时,非对称设计的晶体管截止/导通频率更低.在电阻态区间的相同工作条件下,非对称结构的隧穿电流也显得更大,或者说增益提高了.采用非对称设计结构的单电子管不仅有良好的截止状态,而且还增加了一个特殊状态,这个状态会随着栅极电压的改变,产生不同占空比的电流方波曲线.而方波态和截止态这两种特殊状态的产生可能是由于采用非对称结构时,库仑岛上可能的电子态数目大大增加.而在模拟过程中,由于计算的局限性,我们用有限的态去模拟无穷的态,将导致奇异性产生.解决办法是增加模拟的态,变量 S 变大,这可以减少或者延迟奇异性出现,但是不能完全消除,仍然可以观察到方波态和截止态的存在.具体机制有待实验和进一步研究.若这两种状态由器件结构决定,则可利用构造新类型的电子器件.

3 结论

从单电子的半经典理论模型出发,利用主方程方法,分别对单电子晶体管的对称和非对称设计进行了模拟和对比.由模拟结果可知,采用主方程法模拟非对称性设计的单电子晶体管不仅仍然保留了对称性单电子器件的周期性特性,而且随着源漏电压 V_{DS} 的变化,出现奇异性的方波态和截止态.这种态有可能是主方程法中模拟的态数目有限产生的,采用非对称设计的单电子晶体管比对称设计的晶体管增益略有提高,截止/导通电压更低.

参考文献(References)

- [1] LI Yao, LIU Rong-kan, FU Xiang-ning, et al. Energy transport model of scaling SiGe HBT[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2005, 35(5): 595-599.
李焱,刘嵘侃,傅湘宁,等.按比例缩小 SiGe HBT 能量传输模型[J]. 中国科学技术大学学报,2005, 35(5): 595-599.
- [2] Mullen K, Ben-Jacob E. I-V characteristics of coupled ultra small-capacitance normal tunnel junctions[J]. Physical Review B, 1988, 37(1): 99-105.
- [3] Geerligs L J, Andereg V F, Holweg P A M, et al. Frequency-locked turnstile device for single electrons[J]. Physical Review Letters, 1990, 64(22): 2 691-2 694.
- [4] Korotkov A N, Likharev K K. Single-electron-parametron-based logic device[J]. Journal of Applied Physics, 1998, 84(11): 6 114-6 126.
- [5] Yano K, Ishii T, Hasimoto T, Kobayashi F, et al. Room-temperature single-electron memory[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 1994, 41(9): 1 628-1 638.
- [6] Lutwyche M I, Wada Y. Estimate of the ultimate performance of the single-electron transistor[J]. Journal of Applied Physics, 1994, 75(7): 3 654-3 661.
- [7] Averin D V, Likharev K K. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions[J]. Journal of Low Temperature Physics, 1986, 62 (3/4): 345-373.
- [8] Ben-Jacob E, Bergman D J, Matkowsky B J, et al. Master-equation approach to shot noise in Josephson junctions[J]. Physical Review B, 1986, 34 (3): 1 572-1 581.
- [9] Likharev K K. Correlated discrete transfer of single electron in ultrasmall tunnel junction[J]. IBM Journal of Research and Development, 1988, 32(1): 144-157.
- [10] 杜磊,庄弈琪.单电子晶体管隧穿电阻的量子计算[J].西安电子科技大学学报,2002, 29(3): 314-318.
- [11] 周世勋.量子力学教程[M].北京:人民教育出版社,1980.
- [12] Scholze A. Simulation of single-electron devices[D]. Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, 2000.
- [13] 杜磊,庄弈琪,江文平.单电子晶体管 I-V 特性数值分析[J].西安电子科技大学学报,2002, 29(2): 153-156.
- [14] Amman M, Mullen K, Ben-Jacob E. The charge-effect transistor[J]. Journal of Applied Physics, 1989, 65 (1): 339-346.
- [15] Ahmed H. Single electron electronics: challenge for nanofabrication[J]. Journal of Vacuum Science and Technology B, 1997, 15(6): 2 101-2 108.