## UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI FEDERICO II



### Scuola Politecnica e delle Scienze di Base Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

DIPARTIMENTO DI FISICA "ETTORE PANCINI"

LAUREA TRIENNALE IN FISICA

### Introduzione alla capacità quantistica

Relatore:

Prof. Carmine Antonio Perroni

Candidato: Alfonso Annarelli N85001397

ANNO ACCADEMICO 2020/2021

# Indice

| 1        | Intr   | roduzione   | 3        |
|----------|--|---|----------|
| <b>2</b> | Corrente in un device a singolo livello energetico |   | <b>5</b> |
|          | 2.1  | Modello di FET  | 5        |
|          | 2.2  | Origine della corrente  | 8        |
|          | 2.3  | Quanto di conduttanza   | 10       |
|          | 2.4  | Potenziale nel canale e metodo del self-consistent field $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$ | 11       |
|          | 2.5  | Blocco coulombiano  | 14       |
|          | 2.6  | Approccio euristico ai conduttori macroscopici  | 15       |
| 3        | Formulazione della capacità quantistica            |   | 18       |
|          | 3.1  | Matrice densità   | 18       |
|          | 3.2  | Modello atomico ed equazione della massa efficace $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$ | 19       |
|          | 3.3  | Schrödinger-Poisson solver  | 20       |
|          | 3.4  | Capacità quantistica  | 23       |
|          | 3.5  | Applicazioni: gas di elettroni 2D   | 26       |
|          | 3.6  | Applicazioni: grafene   | 26       |
| 4        | Cor  | nclusioni   | 31       |
| A        | DO   | S 2D  | 33       |
| Bi       | Bibliografia                                       |   |          |

## Capitolo 1

## Introduzione

Scopo di questo lavoro di tesi è illustrare una particolare proprietà quantistica di conduttori e semiconduttori, ossia la capacità quantistica. Prima di introdurre tale grandezza, è necessario però fornire determinati prerequisiti utili alla sua comprensione. Nel Cap.2, infatti, ci soffermeremo sulla conduzione in dispositivi microscopici, facendo uso in particolare di un semplice modello di FET (field-effect transistor), costituito da un canale e tre contatti (source, drain e gate). Porremo in evidenza soprattutto l'effetto di tali contatti sulla conducibilità del canale e formuleremo un metodo iterativo per ricavare le grandezze caratterizzanti di quest'ultimo, ossia I (corrente), U (potenziale) ed N (numero di elettroni liberi). Parallelamente otterremo l'espressione del quanto di conduttanza, uno dei principi basilari della fisica mesoscopica. Infatti risulta che la conduttanza di un canale a singolo livello energetico (degenere nello spin) è  $2q^2/h$ , con  $q = 1.602176634 \cdot 10^{-19}C$  la carica dell'elettrone ed  $h = 6.62607015 \cdot 10^{-34} J \cdot s$  la costante di Planck. Questo risultato è valido esclusivamente in regime balistico. Tale affermazione verrà poi discussa nell'ultima sezione del Cap. 2, dove ci confronteremo con le difficoltà tecniche nel passare da un canale microscopico ad uno macroscopico, in regime diffusivo (descritto dalla legge di Ohm). Un breve cenno è dedicato infine al blocco coulombiano, un effetto che limita la conduzione a basse polarizzazioni e dovuto all'interazione coulombiana tra elettroni, normalmente trascurata nel metodo iterativo.

Il Cap.3 apre poi la trattazione sulla capacità quantistica. In particolare viene ripresentato in forma più generale il metodo del campo autoconsistente del capitolo precedente, chiamato *Schrödinger-Poisson solver*, assieme ad una sua versione semiclassica, più semplice dal punto di vista computazionale. Inoltre viene modellizzato il canale come un semiconduttore perfetto con banda di conduzione parabolica ed introdotto il concetto di massa efficace dei portatori, una semplificazione incredibilmente utile per descrivere il moto (quasi)libero delle cariche in un cristallo ideale. A partire da N ed U, la definizione della capacità quantistica risulta piuttosto intuitiva:

$$C_{\rm Q} \equiv -\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}V} = -q^2 \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}U} \,,$$

ossia descrive l'immagazzinamento della carica intrinseca nel materiale in rapporto ad una piccola variazione di potenziale elettrico. Dal punto di vista storico l'espressione capacità quantistica è relativamente nuova, coniata nel 1988 [4], ma il concetto è precedente. Fondamentalmente deriva dall'energia finita necessaria per generare ulteriori portatori liberi nel sistema, a causa dei livelli energetici quantizzati, che hanno un numero finito di stati, e del principio di esclusione, che ne regola il riempimento. Pertanto mostreremo come  $C_Q$  dipenda fortemente dalla DOS (density of states) del nostro sistema.

Sottolineiamo fin da subito che la capacità osservata in qualsiasi circuito è una combinazione (in particolare una serie) della capacità quantistica con una capacità esterna elettrostatica  $C_{ES}$ ; infatti la presenza di due terminali implica necessariamente l'instaurarsi di un campo elettrico, la cui energia dipende da  $C_{ES}$ . Proprio a causa di tale serie, non tutta la tensione applicata si presenterà ai capi dei terminali, ma verrà ripartita anche su  $C_Q$ ; uno dei nostri scopi sarà valutare la capacità quantistica in rapporto a quella elettrostatica.

Chiudono la trattazione due applicazioni, con annesso calcolo di  $C_Q$  a partire dalla relazione di dispersione dei sistemi analizzati. La prima riguarda i nanotransistor, il cui canale può essere approssimato ad un semiconduttore 2D con banda di conduzione parabolica [1], mentre la seconda riguarda un monostrato di carbonio, ossia il grafene, con legge di dispersione lineare attorno ai coni di Dirac [2].

## Capitolo 2

# Corrente in un device a singolo livello energetico

In questo capitolo ci soffermeremo inizialmente sullo studio della corrente attraverso dispositivi microscopici, con un unico livello energetico. In particolare metteremo in luce il ruolo fondamentale dei contatti nella conduzione a scale così piccole, giungendo in seguito anche a risultati quantitativi tramite l'uso di un metodo auto-consistente. Chiude il capitolo una generalizzazione del modello formulato applicata ai conduttori su scala macroscopica, distinguendo il regime balistico da quello diffusivo.

### 2.1 Modello di FET

La struttura generica che analizzeremo spesso è una versione semplice di un nanotransistor (Fig. 2.1), che consiste di un canale semiconduttore separato da uno strato isolante (tipicamente diossido di silicio) dal gate metallico. Le regioni contrassegnate come source e drain sono le due placchette di contatto, che si suppone siano altamente conduttive. La resistenza del canale determina la corrente che scorre dalla source al drain quando una tensione  $V_D$  è applicata tra di loro. La tensione  $V_G$  sul gate è usata per controllare la densità di elettroni nel canale e quindi la sua resistenza. Un tale resistore controllato dalla tensione è l'essenza di qualsiasi transistor a effetto di campo (FET, *field-effect transistor*) anche se i dettagli differiscono da una versione all'altra. Il canale può essere realizzato anche con dimensioni al di sotto di 0.1  $\mu$ m.

La figura 2.2 mostra la tipica caratteristica corrente-tensione per un transistor del tipo mostrato in Fig. 2.1. A basse tensioni di gate, il transistor è nel suo stato OFF e scorre una corrente trascurabile in risposta ad una tensione di drain  $V_D$ . Oltre una certa tensione di gate, chiamata tensione di soglia  $V_T$ , il transistor è acceso e la corrente (stato ON) cresce



Figura 2.1: Sketch di un nanotransistor ad effetto di campo; [1].



Figura 2.2: Caratteristica  $I - V_G$  di un FinFET, la tensione di soglia  $V_T$  è ricavata tramite estrapolazione in regione lineare; [8].

all'aumentare di  $V_G$ . Il primo passo per capire il funzionamento di un qualsiasi dispositivo a struttura disomogenea è quello di disegnare un diagramma dei livelli energetici all'equilibrio, supponendo che non ci sia tensione applicata tra il source e il drain; infatti gli elettroni in un semiconduttore occupano un insieme di livelli energetici che formano delle bande, come abbozzato in Fig. 2.3.

Al contrario la distribuzione di stati nei contatti è continua, essendo questi dei conduttori metallici.

Ai fini dello studio della corrente elettrica su scala microscopica è necessario introdurre poi la distribuzione di Fermi-Dirac, ossia la distribuzione statistica dei fermioni (nel nostro caso particolare faremo riferimento agli elettroni) negli stati di energia di un sistema in equilibrio



Channel energy levels with

Figura 2.3: Livelli energetici consentiti che possono essere occupati da elettroni nella regione attiva di un dispositivo, come il canale di un nanotransistor; [1].

termico:

$$f_0(E-\mu) = \frac{1}{1 + \exp\left[(E-\mu)/k_{\rm B}T\right]},$$

dove E rappresenta l'energia dello stato considerato,  $\mu$  il potenziale elettrochimico e T la temperatura assoluta. I livelli energetici molto al di sotto di  $\mu$  sono sempre pieni in modo che  $f_0 = 1$ , mentre i livelli energetici molto al di sopra di  $\mu$  sono sempre vuoti con  $f_0 = 0$ . I livelli energetici entro pochi  $k_{\rm B}T$  da  $\mu$  sono occasionalmente vuoti e occasionalmente pieni, così che il numero medio di elettroni si trovi tra 0 e 1. Si noti che questo numero non può superare 1 perché il principio di esclusione proibisce più di un elettrone per livello.

Tornando ad osservare la Figura 2.3, se  $V_G>0$ , notiamo che i livelli energetici nel canale



Figura 2.4: Distribuzione di Fermi-Dirac; [9].

si abbassano mentre il potenziale elettrochimico resta inalterato, non avendo modificato i

livelli energetici di source e drain. Come risultato i livelli di energia si muovono rispetto a  $\mu$ , "spingendolo" nella banda vuota. Questo rende il canale più conduttivo e accende il transistor, poiché, come vedremo nella prossima sezione, il flusso di corrente sotto bias dipende dal numero di livelli energetici disponibili intorno a  $E = \mu$ . La tensione di soglia di gate necessaria per accendere il transistor è quindi determinata dalla differenza di energia tra il potenziale elettrochimico di equilibrio e lo stato vuoto più basso disponibile. Tale funzionamento è detto di tipo n, mentre è possibile anche un funzionamento di tipo p. Infatti una tensione di gate negativa riduce il numero di elettrochimico viene "spinto" nella banda piena sottostante, a causa della disponibilità di stati (riempiti o meno) intorno a  $E = \mu$ . Questo è un esempio di conduzione di tipo p ossia di lacune.

### 2.2 Origine della corrente

Abbiamo affermato che la conduzione dipende dalla disponibilità di stati intorno a  $E = \mu$ , cerchiamo ora di motivare ciò.

La batteria mantiene una differenza di  $qV_D$  tra i potenziali elettrochimici dei due contatti:

$$\mu_1 - \mu_2 = qV_{\rm D},$$

pertanto le distribuzioni di Fermi saranno:

$$f_1(E) \equiv \frac{1}{1 + \exp\left[\left(E - \mu_1\right)/k_{\rm B}T\right]} = f_0\left(E - \mu_1\right),$$
$$f_2(E) \equiv \frac{1}{1 + \exp\left[\left(E - \mu_2\right)/k_{\rm B}T\right]} = f_0\left(E - \mu_2\right).$$

Ogni contatto cerca di portare il canale in equilibrio con se stesso, il quale è quindi costretto ad uno stato di non-equilibrio intermedio. Questo atto di bilanciamento è facile da studiare se consideriamo un semplice sistema a un livello, polarizzato in modo tale che la sua energia  $\epsilon$  sia compresa tra i potenziali elettrochimici dei due contatti. Il contatto 1 forza il numero di elettroni nel canale ad  $f_1(\epsilon)$ , mentre il contatto 2 ad  $f_2(\epsilon)$ , dove  $f_1$  e  $f_2$  sono le funzioni di Fermi di source e drain. Pertanto ci sarà un flusso netto  $I_1$  attraverso la giunzione sinistra:

$$I_1 = \frac{q\gamma_1}{\hbar} \left( f_1 - N \right)$$

e allo stesso modo un flusso netto  $I_2$  attraverso la giunzione destra:

$$I_2 = \frac{q\gamma_2}{\hbar} \left( f_2 - N \right).$$

Possiamo interpretare i rate  $\gamma_1/\hbar = \gamma_2/\hbar$  come le velocità con cui un elettrone posto inizialmente nel livello  $\epsilon$  sfuggirà rispettivamente nei contatti di source e drain.  $\gamma_1 = \gamma_2$  hanno le



Figura 2.5: Flusso di corrente attraverso il canale; [1].

dimensione di un'energia, mentre abbiamo indicato con N il numero di elettroni di conduzione nel canale.

I lati destri delle precedenti equazioni possono essere interpretati come la differenza tra il flusso entrante e uscente rispettivamente dalla source e dal drain (Fig. 2.5).

Più precisamente andrebbe considerato il Pauli blocking, conseguenza del principio di esclusione di Pauli, che nel nostro caso riduce i due flussi poichè gli stati finali hanno un certa probabilità di essere già occupati. I flussi allora saranno (al contatto della source)  $\gamma_1/\hbar f_1(1-N)$ e  $\gamma_1/\hbar N(1-f_1)$ , la cui differenza restituisce però esattamente  $I_1/q$ . Analogo è il bilancio dei flussi al contatto col drain.

In regime stazionario non c'è un flusso netto di corrente verso l'interno o l'esterno del canale  $(I_1 + I_2 = 0)$ , quindi:

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2}$$

Sostituendo nell'equazione della corrente:

$$I = I_1 = -I_2 = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \left[ f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon) \right].$$

Questa è la corrente per spin. Dovremmo moltiplicarla per 2 se ci sono due stati di spin con la stessa energia. In primo luogo notiamo che nessuna corrente scorrerà se  $f_1(\epsilon) = f_2(\epsilon)$ . Pertanto solo quando il livello  $\epsilon$  si trova entro pochi  $k_B T$  dai potenziali  $\mu_1 \in \mu_2$  abbiamo che  $f_1(\epsilon) \neq f_2(\epsilon)$  e scorre una corrente. Il contatto 1 continua a pompare elettroni nel canale cercando di portarne il numero da N a  $f_1$ , mentre il contatto 2 continua a tirarli fuori cercando di portarlo a  $f_2$ . L'effetto netto è un continuo trasferimento di elettroni dal contatto 1 al 2, che corrisponde ad una corrente I nel circuito esterno.

Risulta pertanto chiaro perché il processo di conduzione in un canale a più livelli energetici e con potenziale elettrochimico  $\mu$  richieda la presenza di stati attorno ad  $E = \mu$  (pieni o vuoti).

### 2.3 Quanto di conduttanza

Consideriamo un dispositivo con una piccola tensione applicata attraverso di esso, che provoca una separazione dei potenziali elettrochimici di source e drain. Possiamo scrivere la corrente attraverso questo dispositivo a partire dall'equazione precedente e semplificarla assumendo che  $\mu_1 > \epsilon > \mu_2$  e la temperatura sia abbastanza bassa tale che  $f_1(\epsilon) \simeq 1$  e  $f_2(\epsilon) \simeq 0$ :

$$I = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{q \gamma_1}{2\hbar},$$

se  $\gamma_1 = \gamma_2$ .

Questo suggerisce che potremmo pompare una corrente illimitata attraverso questo dispositivo a un livello aumentando  $\gamma_1$  (e  $\gamma_2$ ), cioè accoppiandolo sempre più fortemente ai contatti. Tuttavia, uno dei risultati principali della fisica mesoscopica è che la conduttanza massima di un dispositivo ad un livello è uguale a  $G_0 = q^2/h$ . Infatti non abbiamo considerato l'allargamento del livello  $\epsilon$  che accompagna inevitabilmente qualsiasi processo di accoppiamento al canale. Questo fa sì che una parte del livello energetico si espanda al di fuori del range di energia tra  $\mu_1$  e  $\mu_2$  dove scorre la corrente. La corrente effettiva è quindi ridotta al di sotto di quello che ci aspettiamo di un fattore  $\frac{\mu_1 - \mu_2}{C\gamma_1}$ , ossia la frazione del livello che si trova nell'intervallo tra  $\mu_1$  e  $\mu_2$ , dove  $C\gamma_1$  è l'effettiva larghezza del livello, con C costante numerica. Poiché  $\mu_1 - \mu_2 = qV_D$ :

$$I = \frac{q\gamma_1}{2\hbar} \frac{qV_{\rm D}}{C\gamma_1} \to G = \frac{I}{V_{\rm D}} = \frac{q^2}{2C\hbar}$$

dove G è indipendente dall'accoppiamento con i contatti. La curva della DOS passa quindi da una delta di Dirac ad una forma con larghezza definita e centrata su  $\epsilon$ , il cui integrale su tutta l'energia sarà comunque 1 (ossia il canale potrà ospitare comunque un solo elettrone alla volta, 2 contando anche la degenerazione di spin). La funzione più semplice per descrivere la DOS avrà la forma di una distribuzione di Cauchy:

$$D_{\varepsilon}(E) = \frac{\gamma/2\pi}{(E-\varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}.$$

La larghezza  $\gamma$  sarà proporzionale all'accoppiamento con i contatti, in particolare  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ . Tale risultato può essere compreso alla luce del principio di indeterminazione, per cui il prodotto della vita media dell'elettrone nel canale (=  $\frac{\hbar}{\gamma_1 + \gamma_2}$ ) con lo splitting del livello energetico ( $\gamma$ ) deve valere  $\hbar$ .

A questo punto è necessario modificare le espressioni della corrente e del numero di elettroni nel canale:

$$I = \frac{q}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}E D_{\varepsilon}(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \left[ f_1(E) - f_2(E) \right], \quad N = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}E D_{\varepsilon}(E) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2}$$

A basse temperature:

$$f_1(E) - f_2(E) = 1$$
 se  $\mu_1 > E > \mu_2$   
= 0 altrimenti.



Figura 2.6: Allargamento della DOS dovuto all'accoppiamento con i contatti,  $\epsilon = 0, \gamma = 0.05$ eV; grafico da MATLAB.

quindi:

$$I = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \int_{\mu_2}^{\mu_1} \, \mathrm{d} E D_{\varepsilon}(E) \,.$$

Se la polarizzazione è abbastanza piccola da poter assumere che la DOS sia costante nell'intervallo  $\mu_1 > E > \mu_2$ , allora:

$$I = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \left(\mu_1 - \mu_2\right) \frac{\left(\gamma_1 + \gamma_2\right)/2\pi}{\left(\mu - \varepsilon\right)^2 + \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right)^2},$$

dove  $\mu = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2}$ .

La massima corrente si ottiene se il livello energetico  $\epsilon = \mu$ . Possiamo quindi definire la massima conduttanza come:

$$G \equiv \frac{I}{V_{\rm D}} = \frac{q^2}{h} \frac{4\gamma_1\gamma_2}{(\gamma_1 + \gamma_2)^2} = \frac{q^2}{h} = 38.7\mu S, \text{ se } \gamma_1 = \gamma_2.$$

### 2.4 Potenziale nel canale e metodo del self-consistent field

Studiamo ora il potenziale all'interno del canale in risposta alle tensioni di source, drain e gate. Quando applichiamo una tensione tra la source e il drain, i potenziali elettrochimici si separano di qV. Sappiamo che una corrente scorre (a basse temperature) solo se il livello  $\epsilon$  si trova tra  $\mu_1$  e  $\mu_2$ . Se ignoriamo il gate, potremmo aspettarci che il potenziale nel canale si trovi a metà strada tra il source e il drain, sia per V positivo che negativo (ciò supponendo gli accoppiamenti tra canale e contatti uguali). Se invece consideriamo prevalente



Figura 2.7: Modello capacitivo per il potenziale interno al canale; [1].

l'accoppiamento con il gate, il valore di  $\epsilon$  dipenderà da  $V_G$  ma non da V, pertanto rimarrà fisso rispetto alla source (presa come punto a comune). Ciò determina una caratteristica I-V asimmetrica (la corrente fluisce solo in uno dei due casi tra V<0 e V>0, ossia quando  $\epsilon$  è compreso tra  $\mu_1 \in \mu_2$ ).

Quantitativamente consideriamo il canale un mezzo disomogeneo :

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\varepsilon_r \vec{\nabla} V\right) = 0,$$

soggetto alle condizioni al contorno V = 0 (source),  $V = V_G$  (gate), e  $V = V_D$  (drain). Possiamo visualizzare la soluzione di questa equazione in termini del modello capacitivo mostrato in Fig. 2.7, se trattiamo il canale come un singolo punto ignorando qualsiasi variazione spaziale del potenziale al suo interno. L'energia potenziale nel canale si ottiene moltiplicando il potenziale elettrostatico V per la carica elettronica q e tramite un semplice partitore di tensione:

$$U_{\rm L} = \frac{C_{\rm G}}{C_{\rm E}} \left(-qV_{\rm G}\right) + \frac{C_{\rm D}}{C_{\rm E}} \left(-qV_{\rm D}\right).$$

Nel calcolare  $U_L$  abbiamo ignorato qualsiasi cambiamento nella densità elettronica all'interno del canale. Qualora considerassimo tale variazione avremmo un'equazione di Poisson:

$$\vec{\nabla} \cdot \left( \varepsilon_{\mathrm{r}} \vec{\nabla} V \right) = -\Delta \rho / \varepsilon_{\mathrm{0}} \,,$$

che, in termini del nostro modello capacitivo, si traduce in un accumulo di cariche sui tre condensatori:

$$-q\Delta N = C_S V + C_G \left( V - V_G \right) + C_D \left( V - V_D \right).$$

Il cambiamento  $\Delta N$  nel numero di elettroni è calcolato rispetto al numero di elettroni di riferimento  $N_0$ , originariamente nel canale, quando non è applicato alcun bias.

In tal modo l'energia potenziale U = -qV sarà la somma del potenziale ottenuto dall'equazione di Laplace e un termine proporzionale a  $\Delta N$ :

$$U = U_{\rm L} + \frac{q^2}{C_{\rm E}} \Delta N.$$

La costante  $q^2/C_E \equiv U_0$  rappresenta la variazione dell'energia potenziale dovuta all'aggiunta di un singolo elettrone.

Per un piccolo dispositivo, l'effetto del potenziale U è quello di traslare la DOS in funzione dell'energia:

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE D_{\varepsilon} (E - U) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2},$$
  
$$I = \frac{q}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE D_{\varepsilon} (E - U) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \left[ f_1(E) - f_2(E) \right].$$

Poiché le due equazioni precedenti contengono U, che a sua volta è funzione di N, per la loro risoluzione è necessario un metodo iterativo. Iniziamo con un valore ipotetico per U, calcoliamo N (con  $D_{\epsilon}(E)$  dato dalla curva lorentziana), ricaviamo infine un nuovo valore di U tramite  $U = U_{\rm L} + \frac{q^2}{C_{\rm E}}\Delta N$ , con  $U_{\rm L} = \frac{C_{\rm G}}{C_{\rm E}}(-qV_{\rm G}) + \frac{C_{\rm D}}{C_{\rm E}}(-qV_{\rm D})$  e confrontiamolo con la nostra ipotesi di partenza. Se questo nuovo U non è sufficientemente vicino (entro qualche  $k_BT$ ) ad essa, ripetiamo il ciclo con un nuova ipotesi opportunamente ricavata, ad esempio  $U_{\rm new} = U_{\rm old} + \alpha (U_{\rm calc} - U_{\rm old})$ , dove  $\alpha$  è un numero positivo minore di 1 onde evitare che la soluzione diverga. Terminato il processo iterativo, utilizziamo la migliore stima di U (SCF, self-consistent field) per il calcolo della corrente I. I grafici in Fig. 2.8 sono ottenuti con il metodo appena descritto facendo uso di MATLAB e iterando finchè ( $U_{\rm calc} - U_{\rm old}$ ) < 10<sup>-6</sup>.



(a) Numero di elettroni vs. tensione di drain



(b) Corrente vs. tensione di drain

Figura 2.8: Grafici ottenuti tramite il metodo SCF con i seguenti parametri:  $U_0 = 0.025 eV, \ \mu = 0, \ \epsilon = 0.2 eV, \ V_G = 0, \ k_BT = 0.025 eV, \ C_D/C_E = 0.5, \ \gamma_1 = \gamma_2 = 0.005 eV;$ grafici da MATLAB.

### 2.5 Blocco coulombiano

Non abbiamo tuttavia considerato finora effetti di scambio (principio di esclusione di Pauli) nè effetti di correlazione tra elettroni. Poiché persino un canale a singolo livello energetico può ospitare 2 elettroni, a seguito della degenerazione di spin, dobbiamo aspettarci in generale un certo effetto, detto blocco coulombiano (CB, Coulomb blockade). Se studiassimo il sistema solo tramite il metodo SCF, avremmo tutte le quantità di interesse raddoppiate rispetto a quelle della sezione precedente, compresa la DOS. In realtà l'interazione tra i due elettroni comporta uno splitting dei livelli energetici pari proprio ad  $U_0$  (Fig. 2.9). Se applichiamo un piccolo bias ( $V < U_0/q = q/C_E$ ), avremo quindi una quasi assenza di corrente poiché non ci sono stati compresi tra  $\mu_1$  e  $\mu_2$ ; ciò è osservabile sperimentalmente per sistemi in



Figura 2.9: Splitting delle densità di stati up-spin e down-spin,  $\gamma = 0.05 \text{eV}, U_0 = 0.25 \text{eV}; [1].$ 

cui l'energia  $U_0$  supera la larghezza dei picchi  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ . Per comprendere tale splitting (non descritto dal metodo SCF), supponiamo che il livello up-spin venga riempito per primo, facendo innalzare il livello down-spin di  $U_0$  dopo l'arrivo del secondo elettrone. Naturalmente, è altrettanto probabile che il down-spin si riempia per primo. Il blocco coulombiano diventa dominante solo se  $U_0$  supera sia  $K_BT$  che  $\gamma$ , rendendo i due picchi distinguibili come in figura. Altrimenti, il metodo SCF darà risultati più accurati. Qualitativamente possiamo immaginare che  $U_0$  dipenda dall'estensione spaziale della funzione d'onda condivisa dai due elettroni, la quale se è particolarmente delocalizzata sfavorisce l'interazione, abbassando  $U_0$ .

#### 2.6 Approccio euristico ai conduttori macroscopici

Ci concentreremo in questa sezione sui conduttori macroscopici ed in particolare in regime SCF, più semplice da trattare rispetto al CB. Modellizziamo il conduttore come una sequenza di celle, con energia di accoppiamento intercella t, tale che  $U_0 < t$  (l'allargamento dei livelli energetici dipende infatti da t). Ogni cella avrà il proprio livello energetico e l'assunzione più semplice possibile è quella che ogni livello conduca indipendentemente dagli altri. In tal caso possiamo utilizzare le equazioni delle sezioni precedenti, dove sostituiamo a  $D_{\epsilon}(E)$  la somma delle DOS di ogni singola cella (modello a livelli indipendenti).

Come esempio possiamo trattare un nanotransistor come un conduttore 2D (altezza lungo z trascurabile), con la seguente DOS:

$$D(E) = m_{\rm c} S / \pi \hbar^2 \vartheta \left( E - E_{\rm c} \right),$$

dove S è la superficie,  $m_c$  la massa effettiva e  $E_c$  il fondo della banda di conduzione, gli ultimi due dipendenti dal tipo di semiconduttore che costituisce il canale (vedi Appendice). Grazie al metodo SCF e usando la DOS precedente, possiamo rappresentare la caratteristica I-V (Fig. 2.10).

Notiamo che dopo un certo valore di  $V_D$  la corrente satura; ciò è una diretta conseguenza



Figura 2.10: Caratteristica I-V con i seguenti parametri:  $m_c = 0.25 m_e$ ,  $C_G = \epsilon_0 \epsilon_r S/L_z$ ,  $\epsilon_r = 4$ ,  $L_x = 10 nm$ ,  $L_y = 1 \mu m$ ,  $S = L_x \cdot L_y$ ,  $L_z = 1.5 nm$ ,  $C_S = C_D = 0.05 C_G$ ,  $V_G = 0.5 V$ ,  $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.007 eV$ ; grafico da MATLAB.

della particolare DOS utilizzata, la quale è positiva e costante per  $E > E_c$  e nulla per  $E < E_c$ . Infatti, per  $V_D$  sufficientemente grande,  $\mu_2$  scende al di sotto di  $E_c$  ( $\mu_1 - \mu_2 = qV_D$  con  $\mu_1$  fissato) e quindi il numero di stati utili per la conduzione raggiunge il suo massimo. Infine osserviamo come  $C_G$  sia molto maggiore rispetto alle altre due capacità, ciò permette di mantenere il potenziale nel canale circa costante al variare di  $V_D$ , se  $V_G$  è costante.

Il modello a livelli indipendenti, tuttavia, non fornisce una descrizione accurata dei conduttori macroscopici, non riuscendo a riprodurre la legge di Ohm. Infatti, dato un conduttore di lunghezza L e sezione S, la corrente sarà proporzionale alla DOS, la quale dipenderà a sua volta dal volume  $S \cdot L$  del conduttore. Inoltre I dipende dagli accoppiamenti con i contatti  $\gamma_1 e \gamma_2$ , per i quali possiamo assumere una semplice equazione del tipo  $\gamma_1/\hbar = \gamma_2/\hbar = v_R/L$ , dove  $v_R \approx 10^5 m/s$  è un parametro del modello, detto velocità di ricombinazione o di fuga. Pertanto  $G \sim S \cdot L/L = S$ . Ciò suggerisce che la resistenza non dipenda dalla lunghezza del canale. La ragione è che stiamo modellizzando un conduttore *balistico*, dove gli elettroni si propagano liberamente e l'unica resistenza è presente nei contatti. La dipendenza ohmica dalla lunghezza deriva invece dai processi di scattering all'interno del conduttore che non sono ancora inclusi nel nostro modello. Questi possono essere coerenti, ossia avvenire con difetti e impurità del cristallo, considerati rigidi, oppure incoerenti, ossia con i fononi, i quali comportano un trasferimento di energia per mezzo delle vibrazioni. Più precisamente la conduzione è di tipo balistico se  $L < \lambda_{MFP}$ , dove L è la lunghezza del canale e  $\lambda_{MFP}$  è il cammino libero medio degli elettroni nel mezzo. Quest'ultimo può essere stimato tramite la regola di Matthiessen:

$$\frac{1}{\lambda_{\rm MFP}} = \frac{1}{\lambda_{\rm el-el}} + \frac{1}{\lambda_{\rm phon}} + \frac{1}{\lambda_{\rm impurity}} + \frac{1}{\lambda_{\rm defect}} + \frac{1}{\lambda_{\rm boundary}}$$

che tiene in conto dei possibili meccanismi di scattering e dei cammini liberi medi associati ad ognuno di essi. Tale regola assume a priori che tutte le probabilità di scattering siano indipendenti tra loro, approssimazione non universalmente valida.

Il modello a livelli indipendenti resta comunque adatto per i nanoconduttori che operano in regime balistico, mentre per i conduttori macroscopici è richiesto un modello più complesso, che tralasceremo in questa trattazione. Accenniamo solo che, considerando i livelli non più indipendenti, dato un conduttore ad n livelli energetici, tutte le quantità di interesse possono essere rappresentate come matrici  $n \times n$ :

| $\varepsilon \to [H]$   | Hamiltoniana                            |
|---|---|
| $\gamma_{1,2} \to [\Gamma_{1,2}(E)]$  | Matrice di allargamento                 |
| $2\pi D(E) \rightarrow [A(E)]$  | Funzione spettrale                      |
| $2\pi n(E) \rightarrow [G^{\mathbf{n}}(E)]$                                     | Funzione di correlazione                |
| $U \rightarrow [U]$   | Matrice del potenziale auto-consistente |
| $N \rightarrow [\rho] = \int (\mathrm{d}E/2\pi) \left[G^{\mathrm{n}}(E)\right]$ | Matrice densità                         |

con l'aggiunta di un ulteriore contatto, oltre alla source e al drain, indicato con "s", in rappresentanza dei processi di scattering, al quale sarà associata un'altra matrice di allargamento  $[\Gamma_s]$ .

## Capitolo 3

# Formulazione della capacità quantistica

A differenza del capitolo precedente, assumeremo il source e il drain allo stesso potenziale  $(V_D = 0)$  e ci concentreremo sulla dipendenza della densità elettronica nel canale dalla tensione di gate. Per ricavare ciò introdurremo un modello atomico semplificato per il canale ed un metodo iterativo, lo *Schrödinger-Poisson solver*. In seguito la definizione di capacità quantistica emergerà naturalmente dalle grandezze analizzate, portando ad una formula piuttosto essenziale. Di quest'ultima vengono discusse due fondamentali applicazioni a fine capitolo, accennando brevemente alle proprietà elettroniche del grafene.

#### 3.1 Matrice densità

Uno strumento utile per trattare un sistema multielettronico sarà la matrice densità, così definita:

$$\rho(\alpha,\beta) = \sum_{i} p_i \langle u_\alpha \mid \Phi_i \rangle \langle \Phi_i \mid u_\beta \rangle$$

Questa descrive una miscela statistica di stati  $\Phi_i$ , ognuno presente con probabilità  $p_i$ , rappresentata sulla base ortonormale  $\{u_{\alpha}\}$ . In particolare si può dimostrare che  $\text{Tr}(\rho) = 1$ , poiché  $\sum_i p_i = 1$ , e che  $\rho$  ha tutti gli autovalori non negativi. Nel nostro caso i pesi sono dati dalla distribuzione di Fermi-Dirac e nella rappresentazione degli autostati, dove  $\rho$  è diagonale:

$$\rho(\alpha,\beta) = f_\alpha \delta_{\alpha\beta}, \quad f_0\left(\varepsilon_\alpha - \mu\right) \equiv f_\alpha.$$

Con questa espressione, però, la condizione di normalizzazione viene ridefinita. Se rappresentiamo  $\rho$  sullo spazio delle coordinate (parametri continui):

$$\tilde{\rho}\left(\vec{r},\vec{r}'\right) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \rho(\alpha,\beta) \Phi_{\alpha}(\vec{r}) \Phi_{\beta}^{*}\left(\vec{r}'\right)$$

i suoi elementi diagonali formeranno proprio la densità elettronica:

$$n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \rho(\alpha, \beta) \Phi_{\alpha}(\vec{r}) \Phi_{\beta}^{*}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\Phi_{\alpha}(\vec{r})|^{2} = \left[ \rho\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) \right]_{\vec{r}' = \vec{r}}$$

e la nuova condizione di normalizzazione sarà:

$$\operatorname{Tr}(\rho) = \int d\vec{r} \, n(\vec{r}) = N_{tot}$$
 numero totale di elettroni liberi.

Più in generale scriveremo:

$$[\rho] = f_0([H] - \mu[I])$$

ricordando che è sempre possibile definire una funzione di operatori qualora essi possano essere diagonalizzati.

#### 3.2 Modello atomico ed equazione della massa efficace

Nel descrivere il canale, assumeremo  $H = H_0 + U$ , dove  $H_0$  rappresenta la struttura a bande nel semiconduttore isolato e U il potenziale dovuto alla tensione di gate e alla densità elettronica aggiuntiva. Desumiamo il primo termine a partire da un semplice modello di solido perfetto, ossia un reticolo composto da celle unitarie  $[H_{nn}]$  connesse dai legami  $[H_{nm}]$ , dove ogni matrice ha dimensione b, ossia il numero di funzioni di base per cella. Quindi la dimensione di  $H_0$  sarà  $N \cdot b$ , con N numero di celle totali. Il problema agli autovalori per una singola cella è:

$$\sum_{m} \left[ H_{nm} \right] \phi_m = E \phi_n \,,$$

dove  $\phi_m$  è un vettore colonna di lunghezza b, ed è risolto tramite il teorema di Bloch, ossia sfruttando l'invarianza per traslazioni discrete di  $H_0$ , per il quale:

$$\phi_m = \phi_0 \exp^{\mathbf{i}\vec{k}\cdot\vec{d}_m} \,.$$

In tale equazione  $\vec{d_m}$  rappresenta la posizione del *m*-esima cella all'interno del reticolo e  $\vec{k}$  è il vettore d'onda, il quale varia all'interno della prima zona di Brillouin del reticolo reciproco. Ne consegue che:

$$[h(\vec{k})]\phi_0 = E\phi_0 \quad \text{con} \quad [h(\vec{k})] = \sum_m [H_{nm}] e^{i\vec{k}\cdot(\vec{d_m} - \vec{d_n})}$$

Spesso i livelli energetici attorno al minimo della banda di conduzione possono essere espressi tramite una relazione quadratica:

$$h(\vec{k}) = E_{\rm c} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\rm c}}$$

dove  $E_c$  e  $m_c$  sono costanti tipiche del semiconduttore. Tale approssimazione conduce all'equazione della massa efficace se sostituiamo  $\vec{k}$  con  $-i\vec{\nabla}$ :

$$\left[E_{\rm c} - \frac{\hbar^2}{2m_{\rm c}}\nabla^2\right]f(\vec{r}) = Ef(\vec{r}).$$

19

Le soluzioni sono onde piane,  $f(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ , con valori di  $\vec{k}$  dati dalle condizioni al contorno e con autovalori  $E(\vec{k}) = E_c + \hbar^2 k^2 / 2m_c$ . Queste funzioni d'onda sono dette "funzioni inviluppo".

L'equazione della massa efficace si usa spesso per modellizzare eterostrutture costituite da diversi materiali, quindi con  $E_c$  e  $m_c$  dipendenti dalla posizione. In tal caso l'equazione diventa:

$$\left[E_{\rm c}(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m_{\rm c}}\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{m_{\rm c}(\vec{r})}\vec{\nabla}\right)\right]f(\vec{r}) = Ef(\vec{r}).$$

La ridefinizione dell'operatore di derivazione è necessaria affinché questo sia ancora hermitiano. L'equazione in tale forma presuppone la conoscenza della struttura atomica nei pressi dell'interfaccia tra materiali diversi, tuttavia risultati approssimati e sufficientemente validi possono essere ottenuti anche senza tenere in conto di tale dettaglio.

L'equazione della massa efficace è particolarmente adatta a studiare i pozzi quantici, eterostrutture utili per confinare gli elettroni in 2D. Avendo variazioni di  $m_c$  solo lungo l'asse z, il problema diventa 1D:

$$\left[E_{\rm c} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{\rm c}(z)} \frac{\partial}{\partial z}\right) + U(z) + \frac{\hbar^2}{2m_{\rm c}(z)} \left(k_x^2 + k_y^2\right)\right] \phi_\alpha(z) = \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(z),$$

con  $k_x$  e  $k_y$  definiti dalle condizioni al bordo.

L'approssimazione di massa efficace di singola banda funziona bene per bande di conduzione approssimativamente paraboliche e ben separate dalle altre, mentre è necessario un modello multi-banda nel caso di quelle di valenza, che sono fortemente anisotrope e poco spaziate energeticamente.

### 3.3 Schrödinger-Poisson solver

Dedotto un modello per  $H_0$ , ricaveremo ora un metodo per il calcolo di n, la densità elettronica nel canale, e da essa U. Trascurando gli effetti di correlazione tra elettroni, possiamo calcolare U tramite l'equazione di Poisson:

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\varepsilon_{\rm r} \vec{\nabla} U\right) = -\frac{q^2}{\varepsilon_0} \left[n(\vec{r}) - n_0\right]$$

con le condizioni al contorno:  $[U]_{\text{source}} = [U]_{\text{drain}} = 0, [U]_{\text{gate}} = -qV_{\text{G}}$ . Poiché *n* dipende a sua volta da *U*:

$$n(\vec{r}) = 2\sum_{\alpha} f_0(\epsilon_{\alpha} - \mu) |\Phi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \quad \text{con } \epsilon_{\alpha} \text{ autovalore di } H = H_0 + U,$$

il problema necessita di una soluzione auto-consistente. Questa si ricava tramite il metodo iterativo detto *Schrödinger-Poisson solver*, che illustriamo in Fig. 3.1 in una sua versione 1D, utile per descrivere un condensatore metallo-isolante-semiconduttore (MOS) all'interno di un nanotransistor. Appare in figura una nuova funzione,  $f_{2D}$ , al posto della distribuzione



Figura 3.1: 1D Schrödinger-Poisson solver; [1].

di Fermi, definita come:

$$f_{2D}(E) = N_0 \ln \left[1 + \exp\left(-E/k_{\rm B}T\right)\right]$$

 $\operatorname{con} \quad N_0 \equiv \frac{m_{\rm c} k_{\rm B} T}{2\pi\hbar^2}.$ 

Deriviamo tale espressione. Assumendo che la struttura sia omogenea e isotropa nel piano x-y:

$$\phi_{\alpha}(\vec{r}) = \frac{\exp\left[\mathrm{i}k_{x}x\right]}{\sqrt{L_{x}}} \frac{\exp\left[\mathrm{i}k_{y}y\right]}{\sqrt{L_{y}}} \phi_{m}(z).$$

Sommando sui tre indici avremo la densità elettronica:

$$n(z) = \frac{2}{S} \sum_{m} \sum_{k_x, k_y} |\phi_m(z)|^2 f_0 \left(\varepsilon_\alpha - \mu\right),$$

dove

$$\varepsilon_{\alpha} = \varepsilon_m + \frac{\hbar^2}{2m_{\rm c}} \left(k_x^2 + k_y^2\right)$$

sono gli autovalori dell'equazione della massa efficace 1D, con  $m_c$  costante.

Possiamo quindi eseguire la somma su  $k_x \in k_y$ , supponendo delle condizioni al bordo periodiche  $k_x = \frac{2\pi}{L_x}n_x, k_y = \frac{2\pi}{L_y}n_y$  con  $n_x, n_y$  interi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{S} \sum_{k_x,k_y} f_0 \left( E + \frac{\hbar^2}{2m_c} \left( k_x^2 + k_y^2 \right) \right) \\ &= \int_0^\infty \frac{2\pi k \, \mathrm{d}k}{4\pi^2} \frac{1}{1 + A \exp\left( \hbar^2 k^2 / 2m_c k_\mathrm{B} T \right)} \quad \text{dove } A \equiv \exp\left( E/k_\mathrm{B} T \right) \quad E \equiv \epsilon_m - \mu \\ &= \frac{m_c k_\mathrm{B} T}{2\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}y}{1 + A \mathrm{e}^y} \quad \cos y = \hbar^2 k^2 / 2m_c k_\mathrm{B} T \\ &= \frac{m_c k_\mathrm{B} T}{2\pi \hbar^2} \left\{ \ln \left[ A + \mathrm{e}^{-y} \right] \right\}_\infty^0 \\ &= \frac{m_c k_\mathrm{B} T}{2\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp\left( -E/k_\mathrm{B} T \right) \right] \equiv f_{2\mathrm{D}}(E) \end{aligned}$$

da cui:

$$n(z) = 2\sum_{m} |\phi_m(z)|^2 f_{2\mathrm{D}} \left(\varepsilon_m - \mu\right).$$

Alternativamente possiamo utilizzare un metodo semi-classico, detto *Poisson solver*, che consiste nell'esplicitare direttamente U(z) nella formula di n, evitando così la risoluzione dell'equazione di Schrödinger. Ipotizzando inizialmente che la struttura in esame sia omogenea e che U = 0, l'equazione della massa efficace restituisce:

$$\phi_{\alpha}(\vec{r}) = \frac{\exp\left[\mathrm{i}k_{x}x\right]}{\sqrt{L_{x}}} \frac{\exp\left[\mathrm{i}k_{y}y\right]}{\sqrt{L_{y}}} \frac{\exp\left[\mathrm{i}k_{z}z\right]}{\sqrt{L_{z}}}$$

 $\cos$ 

$$\varepsilon_{\alpha} = E_{\rm c} + \frac{\hbar^2}{2m_{\rm c}} \left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right),$$

cosicché la densità elettronica sia uniforme nello spazio:

$$n = 2 \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{k_x, k_y, k_z} f_0 \left( \varepsilon_{\alpha} - \mu \right) \quad \Omega$$
 volume del canale.

Tale somma può essere risolta analiticamente, imponendo condizioni al bordo periodiche, e la soluzione sarà:

$$n = 2f_{\rm 3D} \left( E_{\rm c} - \mu \right),$$

dove

$$f_{3\mathrm{D}}(E_c - \mu) \equiv \left(\frac{m_{\mathrm{c}}k_{\mathrm{B}}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}y\sqrt{y}}{1 + \exp\left(y + \frac{E_c - \mu}{k_B T}\right)}.$$

Quando  $U \neq 0$ , il metodo semi-classico consiste nel ridefinire n come:

$$n = 2f_{3D} \left( E_{c} + U(z) - \mu \right),$$

ossia innalzando punto per punto il fondo della banda di conduzione fino al valore  $E_c + U(z)$ . Quest'equazione, abbinata a quella di Poisson, restituisce una soluzione autoconsistente.

Un'applicazione al MOS di entrambi i metodi è rappresentata di Figura 3.2, dove "d" sta per densità, "cb" sta per il fondo della banda di conduzione e "cl" indica l'uso del metodo semi-classico. Notiamo come la curva "d(cl)" sia più alta ai bordi del canale, come ci aspetteremmo dalle leggi dell'elettrostatica, mentre la curva "d" sia maggiormente piccata al centro, conseguenza della trattazione quantistica. Infatti essendo gli elettroni confinati nel canale (circondato dagli isolanti), i livelli energetici somiglieranno a quelli tipici di una particella in una buca infinita:

$$\varepsilon_m \sim E_c + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_c L_z^2} m^2 \quad \text{con } m \text{ intero positivo} \quad \varepsilon_\alpha = \varepsilon_m + \frac{\hbar^2}{2m_c} \left(k_x^2 + k_y^2\right),$$

pertanto, per  $L_z$  piccolo, dell'ordine dei nm, saranno occupati solo gli stati più bassi, quelli con densità di probabilità piccata al centro della buca. Al crescere di  $L_z$ , i due metodi autoconsistenti restituiranno distribuzioni di densità elettronica sempre più simili.



Figura 3.2: (a) Schema di un MOSFET a doppio gate con le relative misure. (b) Energia e densità di elettroni in funzione dell'altezza,  $V_D = 0.5V$ ,  $V_G = 1.0V$ ; [5].

### 3.4 Capacità quantistica

Analogamente a quanto abbiamo già visto nella sezione 2.1 per la corrente di drain, anche per la densità elettronica nel canale esiste un tensione di gate di soglia  $V_T$ , sotto la quale n è praticamente nulla e il dispositivo è nello stato OFF. Tale stato permane finché il potenziale elettrochimico si trova al di sotto del più basso livello energetico. Aumentando  $V_G$ , la DOS si abbassa e n aumenta appena  $\mu$  (il quale è fisso e in equilibrio con source e drain) si viene a trovare in un intervallo con DOS non nulla. Il calcolo di n può essere effettuato agevolmente tramite lo Schrödinger-Poisson solver, per il quale avremo tuttavia bisogno di U, e in particolare, supposto  $V_D = 0$ , della sua dipendenza da  $V_G$ . Ci sarà utile il modello circuitale in Figura 3.3.



Figura 3.3: Circuito equivalente per un condensatore MOS (metallo-ossido-semiconduttore); [1].

In prima approssimazione  $C_{ins} = \epsilon S/d$ , con la costante dielettrica  $\epsilon$  opportunamente mediata tra quella del canale e dell'isolante e d la distanza tra il centro del canale e un elettrodo.

La capacità  $C_Q$  invece deriva da una trattazione puramente quantistica. Infatti tramite il metodo auto-consistente sviluppato finora, abbiamo visto che:

$$U = U_{\rm L} + \left[ q^2 \left( N - N_0 \right) / C_{\rm E} \right],$$

dove  $U_L$  è il potenziale soluzione dell'equazione di Laplace,  $(N - N_0)$  il numero extra di elettroni rispetto agli  $N_0$  richiesti per mantenere neutro il canale e  $C_E$  la capacità elettrostatica totale. Inoltre:

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}E D(E - U) f_0(E - \mu),$$

dove D(E - U) è la DOS spostata di U. Se definiamo un potenziale neutro  $U = U_N$  tale che  $N = N_0$ :

$$N_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}ED \left(E - U_{\mathrm{N}}\right) f_0(E - \mu).$$

Qualsiasi incremento di U alzerà i livelli energetici e ridurrà N, mentre una diminuzione di U abbasserà i livelli e aumenterà N. Quindi, per piccole deviazioni dalla condizione neutra, potremmo utilizzare la seguente relazione linearizzata:

$$N - N_0 \approx C_Q \left[ U_{\rm N} - U \right] / q^2,$$

in cui

$$C_{\rm Q} \equiv -q^2 \left[\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}U}\right]_{U=U_{\rm N}}$$

è chiamata capacità quantistica e dipende dalla DOS. Se sostituiamo nell'espressione di U:

$$U = U_{\rm L} + \frac{C_{\rm Q}}{C_{\rm E}} (U_{\rm N} - U) \quad \rightarrow U = \frac{C_{\rm E} U_{\rm L} + C_{\rm Q} U_{\rm N}}{C_{\rm E} + C_{\rm Q}},$$

il valore del potenziale risulta dipendente dal rapporto tra le due capacità. Possiamo infine ricavare l'espressione di  $C_Q$ :

$$\begin{split} C_{\rm Q} &= -q^2 \left. \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}U} \right|_{U=U_{\rm N}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}ED(E-U) f_0(E-\mu) = -q^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}E \left. \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}U} \right|_{U=U_{\rm N}} D(E-U) f_0(E-\mu) \\ &= -q^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}E \left[ -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E} \right] D(E-U_N) f_0(E-\mu) = q^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}ED(E-U_N) \left[ -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E} \right] f_0(E-\mu) \\ C_Q &\equiv q^2 D_0 \\ D_0 &\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dED \left( E-U_N \right) F_{\rm T}(E-\mu), \end{split}$$

dove  $F_{\rm T}(E)$  è la thermal broadening function (Fig.3.4):

$$F_{\rm T}(E) \equiv -\frac{{\rm d}f_0}{{\rm d}E} = \frac{1}{4k_{\rm B}T}{\rm sech}^2\left(\frac{E}{2k_{\rm B}T}\right)$$

e la secante iperbolica è definita come  $\operatorname{sech}(x) = 2/(e^x + e^{-x})$ . Il valore massimo di  $F_T$  è  $1/4k_BT$  e la sua larghezza dipende da  $k_BT$ . Inoltre il suo integrale è 1 per qualsiasi T. Da ciò



Figura 3.4: Thermal broadening function normalizzata; grafico da Mathematica.

possiamo dedurre che per basse temperature  $F_T(E) \rightarrow \delta(E)$  e l'espressione di  $C_Q$  si semplifica in:

$$C_{\mathrm{Q}}pprox q^2 D\left(E=\mu-U_{\mathrm{N}}
ight)$$
 .

Possiamo ora definire il potenziale nel canale in funzione di  $V_G$  a partire dal circuito in Fig. 3.3:

 $V_{\rm C} = V_{\rm G} \frac{C_{\rm E}}{C_{\rm E} + C_Q}$ , dove  $C_{\rm E} = 2C_{\rm ins}$ . Nello stato OFF  $C_Q = 0$   $(D_0 \simeq 0)$ , quindi  $V_C = V_G \rightarrow U = -qV_G$ . Di conseguenza:

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0 (E - \mu) D(E + qV_G)$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0 (E - \mu - qV_G) D(E)$$
$$\approx \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left(-\frac{E - \mu - qV_G}{k_BT}\right) D(E)$$

in cui l'ultima approssimazione è valida proprio perché nello stato OFF  $E - \mu - qV_{\rm G} \gg k_{\rm B}T$  nell'intervallo in cui D(E) è non nulla. Pertanto mettiamo in evidenza la dipendenza esponenziale da  $V_G$ :

$$N \sim N_0 \exp\left(\frac{qV_{\rm G}}{k_{\rm B}T}\right).$$

Nello stato ON, invece,  $C_Q$  è non nulla e  $V_C < V_G$ . La capacità misurata C è la serie delle capacità elettrostatica e quantistica:

$$C = \frac{C_{\rm E}C_Q}{C_{\rm E} + C_Q}$$

Entrambi i regimi possono essere osservati nel grafico  $N_s$  vs.  $V_G$  (Fig.3.5), in cui notiamo una fase di salita esponenziale (stato OFF) seguita da una crescita lineare (stato ON) con pendenza C/S (capacità per unità di area), per la quale possiamo stimare valori attorno ad 1  $\mu F/cm^2$ .



Figura 3.5: Densità di elettroni per unità di area in funzione della tensione di gate, ottenuto tramite lo Schrödinger-Poisson solver con e senza effetti non-parabolici nella legge di dispersione. Il canale è costituito da due strati, InGaAs e InP, entrambi spessi 2.5nm; [7].

### 3.5 Applicazioni: gas di elettroni 2D

Se approssimiamo il canale nel nostro dispositivo con un gas di elettroni liberi 2D caratterizzato da una legge di dispersione parabolica, allora la densità di stati nello stato ON sarà costante  $(D(E) = Sm_c/\pi\hbar^2)$  e la capacità quantistica sarà:

$$C_Q = \frac{q^2 m_{\rm c} S}{\pi \hbar^2} = \frac{\varepsilon S}{a_0^*/4}$$

dove  $a_0^\ast$ ha un'espressione simile a quella del raggio di Bohr, ma è più grande:

$$a_0^* \equiv \frac{4\pi\varepsilon\hbar^2}{m_{\rm c}q^2} = (0.053 \text{ nm})\frac{m}{m_{\rm c}}\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}.$$

La capacità quantistica è quindi uguale a quella di un condensatore a piastre parallele le cui armature sono a distanza  $a_0^*/4$ . Poiché questo è di solito un numero molto piccolo, la capacità quantistica nello stato ON è tipicamente maggiore della capacità elettrostatica  $C_E$  e la capacità misurata è dominata da quest'ultima, essendo la serie delle due. In materiali con una piccola massa effettiva, tuttavia, la capacità quantistica può essere abbastanza piccola, specialmente se l'isolante è molto sottile rendendo  $C_E$  grande.

### 3.6 Applicazioni: grafene

È possibile ricavare la capacità quantistica anche per il grafene, ossia uno strato monoatomico di atomi di carbonio costituito da celle esagonali. Prima del calcolo di  $C_Q$  ne delineiamo le caratteristiche principali.

Nel grafene, l'orbitale 2s interagisce con gli orbitali  $2p_x$  e  $2p_y$  per formare tre orbitali ibridi  $sp^2$  disposti a formare un triangolo equilatero. Le interazioni tra orbitali  $sp^2$  risultano in tre legami covalenti di tipo  $\sigma$ . Gli elettroni in  $2p_z$  formano legami covalenti di tipo  $\pi$ , pertanto sono debolmente legati e sono delocalizzati sull'intero strato; questi ultimi sono i responsabili delle proprietà elettroniche del grafene.

La struttura ad alveare può essere caratterizzata come un reticolo di Bravais con una base di due atomi, indicati con A e B in Fig.3.6.



Figura 3.6: A sinistra: struttura reticolare del grafene ( $a_1 e a_2$  sono i vettori primitivi e  $\delta_i$ i=1,2,3 sono i vettori dei primi vicini). A destra: zona di Brillouin corrispondente. I coni di Dirac si trovano nei punti K e K'; [6].

I vettori primitivi sono:

$$a_1 = \frac{a}{2}(3,\sqrt{3}), \quad a_2 = \frac{a}{2}(3,-\sqrt{3}),$$

dove $a\approx 1.42 {\rm \AA}$  è la distanza interatomica. I vettori del reticolo reciproco sono invece:

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1,\sqrt{3}), \quad b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1,-\sqrt{3})$$

Di particolare importanza sono poi i due punti di Dirac  $K \in K'$ , agli angoli della Brillouin zone, la cui posizione rispetto al centro  $\Gamma$  è data da:

$$\boldsymbol{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad \boldsymbol{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right);$$

a partire da questi possiamo definire per simmetria gli altri 4 punti.

Nel nostro calcolo siamo interessati in particolare alla struttura a bande del grafene e tramite il metodo del *tight binding* (interazioni ristrette ai primi vicini), è semplice ottenere la banda  $\pi$ , ossia costruita a partire dagli orbitali atomici  $2p_z$ . La relazione di dispersione che ne deriva è:

$$E(\mathbf{k})_{\pm} = \pm \gamma \sqrt{1 + 4\cos\frac{3a}{2}k_x \cos\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y + 4\cos^2\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y},$$

dove abbiamo posto  $E_{2p_z} = 0$  e definito  $\gamma$  (energia di salto) come l'integrale dell'Hamiltoniana del reticolo sulle funzioni d'onda di due atomi primi vicini. I due segni opposti corrispondono alla banda di valenza (-) e alla banda di conduzione (+), considerato che per convenzione poniamo  $E_F = \mu(T = 0 K) = 0 eV$ . La determinazione dell' $E_F$  implica infatti popolare gli stati k nella zona di Brillouin con tutti gli elettroni  $\pi$  del solido secondo il principio di esclusione di Pauli. Ci sono N (numero di celle unitarie in tutto il reticolo) stati nella banda di valenza come conseguenza delle condizioni al bordo periodiche, i quali possono contenere 2N elettroni, inclusa la degenerazione di spin. Ogni atomo di carbonio fornisce un elettrone  $2p_z$ , risultando in due elettroni/cella unitaria. Poiché ci sono N celle, abbiamo un totale di 2N elettroni che riempiranno la banda di valenza. Ne consegue che il più alto stato occupato si trova nei punti K, come identificato in precedenza, e l'energia corrispondente è formalmente definita come l'energia di Fermi ( $E_F = 0 eV$ ).

Poiché il gap di banda è nullo nei punti di Dirac, il grafene assume un comportamento semimetallico. Proprio attorno a questi punti possiamo sviluppare in serie la legge di dispersione per ottenere una relazione lineare in  $\mathbf{k}$ :

$$E(\mathbf{k})_{\pm\text{linear}} = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k} = \mathbf{K})_{\pm} \cdot \mathbf{k} = \pm \hbar v_{\text{F}} |\mathbf{k}| = \pm \hbar v_{\text{F}} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \pm \hbar v_{\text{F}} k,$$

dove  $v_F = 1/\hbar \partial E/\partial k$  ( $\mathbf{k} = \mathbf{K}$ ) è la velocità di Fermi, definita come la velocità di gruppo dell'elettrone. In particolare dal coefficiente dello sviluppo si ricava che  $v_F = \frac{3}{2} \frac{\gamma a}{\hbar} \approx 10^6 m/s$ se stimiamo  $\gamma \approx 3.1 \, eV$ . Per il calcolo della capacità quantistica necessitiamo infine della DOS (per unità d'area):

$$dN(k) = 2g_z \frac{S}{4\pi^2} 2\pi k \, dk, \quad D(k) = \frac{\partial N(k)}{\partial k} = 2g_z \frac{1}{2\pi} k,$$
$$D(E) = D(k(E)) \frac{\partial k}{\partial E} = \frac{2}{\pi \left(\hbar v_{\rm F}\right)^2} |E| = \beta_{\rm g} |E|,$$

nella quale abbiamo tenuto in conto anche della degenerazione di spin (2) e della degenerazione di zona ( $g_z = 2$ ), dovuta al numero di punti di Dirac indipendenti per esagono.  $\beta_{\rm g}$  è una costante del materiale ( $\beta_{\rm g} \sim 1.5 \times 10^6 \mu {\rm m}^{-2} {\rm eV}^{-2}$ ). Sostituendo la DOS nell'espressione di  $C_Q$ :

$$C_{\rm Q} = \frac{\beta_{\rm g} q^2}{4k_{\rm B}T} \left[ \int_{-\infty}^0 -E \operatorname{sech}^2 \left( \frac{E-\mu}{2k_{\rm B}T} \right) \mathrm{d}E + \int_0^\infty E \operatorname{sech}^2 \left( \frac{E-\mu}{2k_{\rm B}T} \right) \mathrm{d}E \right].$$

Quando  $\mu = 0$ , definiamo la capacità quantistica intrinseca o di equilibrio  $C_{Qi}$ :

$$C_{\rm Qi} = 2\frac{\beta_{\rm g}e^2}{4k_{\rm B}T} \int_0^\infty E \operatorname{sech}^2\left(\frac{E}{2k_{\rm B}T}\right) dE$$
  
$$= 2\beta_{\rm g}e^2k_{\rm B}T \int_0^\infty \frac{x}{\cosh^2(x)} dx \quad \operatorname{con} \quad x = E/2k_BT$$
  
$$= 2\beta_{\rm g}e^2k_{\rm B}T \left[x \tanh(x) - \ln(\cosh(x))\right]_0^\infty$$
  
$$= \beta_{\rm g}e^2k_{\rm B}T \ln(4),$$



Figura 3.7: Bande  $\pi$  di conduzione e di valenza del grafene ottenute con il metodo del tight binding; [2].

che a temperatura ambiente (300 K) è  $C_{\text{Qi}} \sim 0.8 \,\mu\text{Fcm}^{-2} = 8 \,\text{fF}\mu\text{m}^{-2}$ . Possiamo poi calcolare anche la dipendenza della capacità dal potenziale elettrochimico, infatti la soluzione analitica dell'integrale per  $T \neq 0$  è:

$$C_{\rm Q} = \beta_{\rm g} e^2 \left[ 2k_{\rm B}T \ln \left( 1 + e^{\mu/k_BT} \right) - \mu \right],$$

che riflette la forma a V della DOS (Fig. 3.8).



Figura 3.8: Capacità quantistica del grafene in funzione del potenziale elettrochimico; [2].

Una più semplice relazione lineare per  $C_Q$  è ottenuta a partire dalla derivata:

$$\frac{\partial C_{\rm Q}}{\partial \mu} = \beta_{\rm g} e^2 \tanh\left(\frac{\mu}{2k_BT}\right),$$

che si riduce a  $\frac{\partial C_Q}{\partial \mu} \approx \beta_g e^2$  per  $\mu \gg k_B T$ . Ne segue che la relazione lineare per la capacità quantistica è:

$$C_{\rm Q} = \beta_{\rm g} e^2 |\mu| \approx 1.5 \times 10^6 |\mu| (\text{fF} \mu \text{m}^{-2}) \quad \mu \gg k_{\rm B} T(\text{eV}) \,.$$

Per valori arbitrari di $\mu$ possiamo migliorare l'approssimazione tramite la formula:

$$C_{\rm Q} \approx \sqrt{C_{Qi}^2 + (\beta_{\rm g} e^2 \mu)^2} \,.$$

Deviazioni dalla dipendenza lineare si verificheranno ad alti potenziali elettrochimici, quando la legge di dispersione del grafene comincia ad allontanarsi dal cono di Dirac. Inoltre, deviazioni dal profilo a V sono state osservate sperimentalmente a causa di imperfezioni nel foglio di grafene, dove disordine o difetti sono frequentemente presenti.

## Capitolo 4

## Conclusioni

Riassumiamo al termine di questo lavoro di tesi i principali risultati raggiunti ed i metodi utilizzati. In primo luogo, nel Capitolo 2, la risoluzione delle equazioni che legano I, U ed N in un nanotransistor, tramite lo Schrödinger-Poisson solver, ci ha permesso di graficare le caratteristiche  $I - V_D$  ed  $I - V_G$  e di poterne descrivere gli aspetti salienti, quali la presenza di una tensione di soglia  $V_T$  per l'accensione del transistor. In secondo luogo abbiamo studiato i limiti di tale approccio, infatti, introducendo il concetto di *blocco coulombiano*, abbiamo visto che una soluzione autoconsistente è possibile solo per polarizzazioni sufficientemente grandi, ossia per  $V_D > U_0/q = q/C_E$ . Il metodo iterativo utilizzato è stato analizzato più nel dettaglio nel Capitolo 3, dove una delle sue applicazioni è stata ricavare il profilo della carica elettrica nel canale di un MOSFET. Un risultato interessante si manifesta per device particolarmente piccoli, in cui la distribuzione di elettroni assume un comportamento marcatamente quantistico, distaccandosi da quello dell'elettrostatica classica.

Questa differenza tra scala microscopica e macroscopica appare evidente anche dopo aver ricavato la formula per la capacità quantistica:

$$C_Q \equiv q^2 D_0$$
,  $D_0 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dED (E - U_N) F_{\rm T}(E - \mu).$ 

Infatti quest'ultima diventa eccessivamente grande al crescere della DOS e nei conduttori 3D, a causa del gran numero di elettroni mobili ( $\sim 10^{22} - 10^{23} \, cm^{-3}$ ), il contributo di  $C_Q$  viene totalmente trascurato nella serie con la capacità elettrostatica.

Solo nelle strutture a dimensioni ridotte la capacità quantistica è "accessibile", come ad esempio nei sistemi descritti al termine del Cap. 3, ossia il canale semiconduttore 2D ed il grafene. Per entrambi abbiamo ricavato valori di  $C_Q$  dell'ordine di 1  $\mu F/cm^2$ , tuttavia per il grafene questa cresce circa linearmente con  $|\mu|$ , mentre è costante per il nanotransistor.

Ulteriori sviluppi della teoria sono possibili. Infatti lo *Schrödinger-Poisson solver* corrisponde formalmente ad un'*approssimazione di Hartree*, la quale può essere superata con metodi più avanzati, come l'*Hartree-Fock*, che tiene in conto del termine energetico di scambio, oppure l'introduzione di un *potenziale di correlazione di scambio*, ottenuto a partire dalla minimizzazione di un funzionale energetico dipendente da  $n(\vec{r})$ . Questi effetti aggiuntivi si riflettono nel calcolo della capacità, sommando ulteriori termini alla serie finora analizzata. Ad esempio in un conduttore:

$$1/C = 1/C_{\rm ES} + 1/C_{\rm Q} + 1/C_x + 1/C_c + 1/C_{\rm el-ncc},$$

dove, in serie alla capacità elettrostatica  $C_{ES}$  e a quella quantistica  $C_Q$ , troviamo una capacità di scambio  $C_x$ , una capacità di correlazione  $C_c$  ed un ulteriore termine  $C_{\rm el-ncc}$  che tiene in conto delle interazioni con i portatori non carichi (es. fononi). Poichè in genere  $C_x$  e  $C_c$  sono minori di 0, tali correzioni sono fondamentali per descrivere alcuni dispositivi a semiconduttore con capacità negativa. Una trattazione più ampia di tali effetti è presente in [10], dove è applicato il modello *jellium* (la carica positiva dei nuclei è uniformemente distribuita nello spazio) ad un gas di elettroni 2D per il calcolo di  $C_x$  e  $C_c$ , funzioni della densità n.

## Appendice A

# DOS 2D

Abbiamo citato in più occasioni la DOS di un gas di elettroni 2D, utile ad esempio per caratterizzare un semiconduttore con una dimensione trascurabile rispetto alle altre due. In genere è possibile descrivere, in maniera più o meno accurata, il fondo della banda di conduzione tramite una relazione di dispersione quadratica:

$$E(\vec{k}) = E_{\rm c} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\rm c}}$$

Ponendo le condizioni al bordo periodiche  $k_x = \frac{2\pi}{L_x}v_x$ ,  $k_y = \frac{2\pi}{L_y}v_y$  con  $v_x \in v_y$  interi:

$$dN(\mathbf{k}) = 2\frac{S}{4\pi^2} dk_x dk_y, \quad dN(k) = 2\frac{S}{4\pi^2} 2\pi k dk, \quad D(k) = \frac{\partial N(k)}{\partial k} = 2\frac{S}{2\pi}k,$$
$$D(E) = D(k(E))\frac{\partial k}{\partial E} = 2\frac{Sm_c}{2\pi\hbar^2}.$$

Più precisamente, poiché la relazione di dispersione è valida solo per  $E > E_c$ , la DOS avrà la forma di una funzione a gradino:

$$D(E) = \frac{Sm_c}{\pi\hbar^2} \,\theta(E - E_c).$$



Figura A.1: DOS di un gas di elettroni 2D; grafico da Mathematica.

# Elenco delle figure

| 2.1  | Sketch di un nanotransistor ad effetto di campo; [1]   | 6  |
|------|--|----|
| 2.2  | Caratteristica $I - V_G$ di un FinFET, la tensione di soglia $V_T$ è ricavata tramite estrapolazione in regione lineare; [8] | 6  |
| 2.3  | Livelli energetici consentiti che possono essere occupati da elettroni nella re-   |    |
|      | gione attiva di un dispositivo, come il canale di un nanotransistor; [1]. $\ldots$   | 7  |
| 2.4  | Distribuzione di Fermi-Dirac; [9]  | 7  |
| 2.5  | Flusso di corrente attraverso il canale; [1]   | 9  |
| 2.6  | Allargamento della DOS dovuto all'accoppiamento con i contatti, $\epsilon = 0, \gamma = 0.05$ eV; grafico da MATLAB.         | 11 |
| 2.7  | Modello capacitivo per il potenziale interno al canale; [1]  | 12 |
| 2.8  | Grafici ottenuti tramite il metodo SCF con i seguenti parametri:   |    |
|      | $U_0 = 0.025 eV, \ \mu = 0, \ \epsilon = 0.2 eV, \ V_G = 0, \ k_B T = 0.025 eV, \ C_D/C_E = 0.5,$                            |    |
|      | $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.005 eV; \ grafici \ da \ MATLAB. \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$           | 14 |
| 2.9  | Splitting delle densità di stati up-spin e down-spin, $\gamma = 0.05 \text{eV}, U_0 = 0.25 \text{eV};$                       |    |
|      | [1]  | 15 |
| 2.10 | Caratteristica I-V con i seguenti parametri: $m_c = 0.25 m_e, C_G = \epsilon_0 \epsilon_r S/L_z,$                            |    |
|      | $\epsilon_r = 4, L_x = 10 nm, L_y = 1 \mu m, S = L_x \cdot L_y, L_z = 1.5 nm, C_S = C_D =$                                   |    |
|      | $0.05 C_G, V_G = 0.5 V, \gamma_1 = \gamma_2 = 0.007  eV; \ grafico \ da \ MATLAB.$   | 16 |
| 3.1  | 1D Schrödinger-Poisson solver; [1]   | 21 |
| 3.2  | (a) Schema di un MOSFET a doppio gate con le relative misure.  |    |
|      | (b) Energia e densità di elettroni in funzione dell'altezza, $V_D$ = 0.5V, $V_G$ =   |    |
|      | 1.0V; [5].   | 23 |
| 3.3  | $Circuito\ equivalente\ per\ un\ condensatore\ MOS\ (metallo-ossido-semiconduttore);$  |    |
|      | [1]  | 23 |
| 3.4  | Thermal broadening function normalizzata; grafico da Mathematica   | 25 |

| 3.5 | Densità di elettroni per unità di area in funzione della tensione di gate, ottenuto                 |    |
|-----|---|----|
|     | tramite lo Schrödinger-Poisson solver con e senza effetti non-parabolici nella                      |    |
|     | legge di dispersione. Il canale è costituito da due strati, InGaAs e InP, entrambi                  |    |
|     | spessi 2.5nm; [7]. $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ | 26 |
| 3.6 | A sinistra: struttura reticolare del grafene ( $a_1$ e $a_2$ sono i vettori primiti-                |    |
|     | vi e $\delta_i$ i=1,2,3 sono i vettori dei primi vicini). A destra: zona di Brillouin               |    |
|     | corrispondente. I coni di Dirac si trovano nei punti K e K'; [6]. $\ldots$                          | 27 |
| 3.7 | Bande $\pi$ di conduzione e di valenza del grafene ottenute con il metodo del tight                 |    |
|     | binding; [2]  | 29 |
| 3.8 | Capacità quantistica del grafene in funzione del potenziale elettrochimico; [2].                    | 29 |
| A.1 | DOS di un gas di elettroni 2D; grafico da Mathematica.  | 33 |

## Bibliografia

- S. Datta. «Quantum Transport Atom to Transistor», Cambridge University Press, 2005. Parte dei codici MATLAB presenti nel libro di testo sono stati adattati ed utilizzati in questo lavoro di tesi.
- [2] H.-S. Philip Wong, D. Akinwande. «Carbon Nanotube and Graphene Device Physics», Cambridge University Press, 2010.
- [3] S. Datta. «Electronic Transport in Mesoscopic Systems», Cambridge University Press, 1995.
- [4] S. Luryi. «Quantum capacitance devices», Appl. Phys. Lett. 52, 501, 1988.
- [5] S. Birner, S. Hackenbuchner, M. Sabathil, G. Zandler, J.A. Majewski, T. Andlauer, T. Zibold, R. Morschl, A. Trellakis e P. Vogl. «Modeling of Semiconductor Nanostructures with nextnano3», Acta Physica Polonica Series A, 2006.
- [6] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim. "The electronic properties of graphene", Rev. Mod. Phys. 81, 109, 2009.
- [7] M.V. Fischetti, L. Wangt, B. Yut, C. Sachs, P. M. Asbeckt, Y. Taurt, e M. Rodwell. «Simulation of Electron Transport in High-Mobility MOSFETs: Density of States Bottleneck and Source Starvation», 2007 IEEE International Electron Devices Meeting, 2007.
- [8] S. Rajendran, M. Lourde. «FinFETs and their application as load switches in Micromechatronics», 2015 IEEE International Symposium on Nanoelectronic and Information Systems, 2015.
- [9] https://it.m.wikipedia.org/wiki/File:Fermi\_dirac\_distr.svg.
- [10] T. Kopp, J. Mannhart. «Calculation of the capacitances of conductors: Perspectives for the optimization of electronic devices», J. Appl. Phys. 106, 064504, 2009.