Mathematik und Nanotechnologie: Warum werden Computer immer kleiner?

Ansgar Jüngel
Institut für Analysis und Scientific Computing
www.juengel.at.vu

(einige Bilder sind aus urheberrechtlichen Gründen entfernt)

- Einleitung
- Drift-Diffusionsgleichungen
- Numerische Beispiele

Einsatz von Computern

Kommunikation

Haushalt

Medizin

Transport

Wirtschaft

Audio/Video

Vom Computer zum Halbleiter

① Computer

③ Computerschaltung

④ Transistor

② Prozessorplatine

Geschichte der Intel-Prozessoren

1971
4004
108 KHz, 2250 Transistoren,
Kanallänge: 10μm (1μm$= 10^{-6}$m)

1982
80286
12 MHz, 134.000 Transistoren,
Kanallänge: 1,5μm

1993
Pentium 1
66 MHz, 7.500.000 Transistoren,
Kanallänge: 0,35μm

2007
Core Duo
3 GHz, 410.000.000 Transistoren,
Kanallänge: 45nm

Entwicklung der Transistorzahl 1970–2008

Entwicklung der Kanallänge 2000–2016

Herausforderungen im Schaltkreisdesign

Zukünftiger Prozessor (2010):

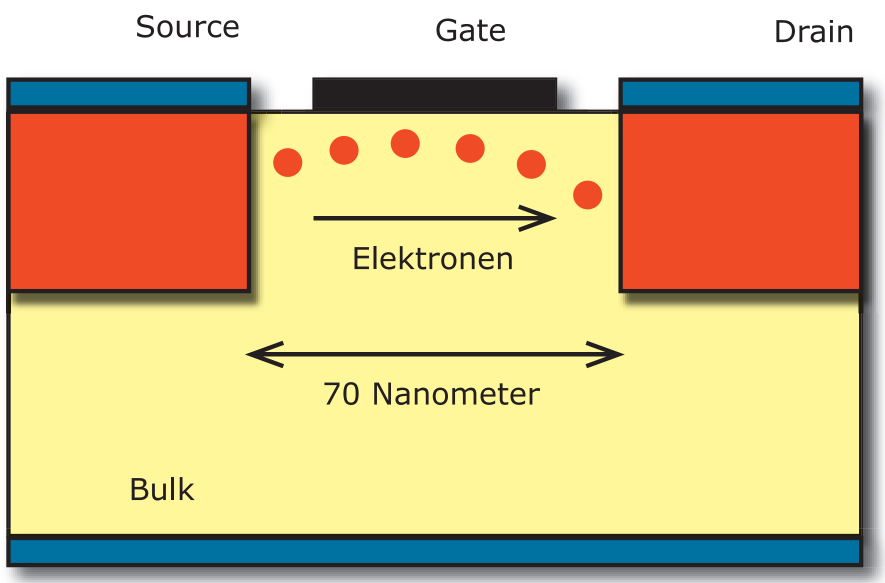
- Transistorzahl $> 1\,000\,000\,000$
- Kanallänge $< 45\,\text{nm}$
- hochintegrierte Schaltkreise:
  Leistungsdichte $> 100\,\text{W}/\text{cm}^2$

Hauptprobleme:

- sinkende Spannung $\longrightarrow$ Rauschen
- steigende Frequenzen $\longrightarrow$ Mehrskalenproblem
- steigende Designvielfalt $\longrightarrow$ schnelle und akkurate Simulationen notwendig
- steigende Leistungsdichte $\longrightarrow$ parasitäre Effekte (Wärme, "hot spots")

Funktionsweise eines MOSFET-Transistors

(MOSFET = Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor)



- Kanallänge: 70 Nanometer
- Elektronenfluß von Source zu Drain
- Stromfluß gesteuert vom elektrischen Potential am Gate
- Elektronen fließen von $-$ nach $+$

Mathematische Modellierung

Variablen:

- Ortsvariable x
- Anzahl der Elektronen: Elektronendichte $n(x) \geq 0$
- Stromfluß: Teilchenstromdichte $J(x)$
- elektrisches Potential $V(x)$: gegebene Funktion

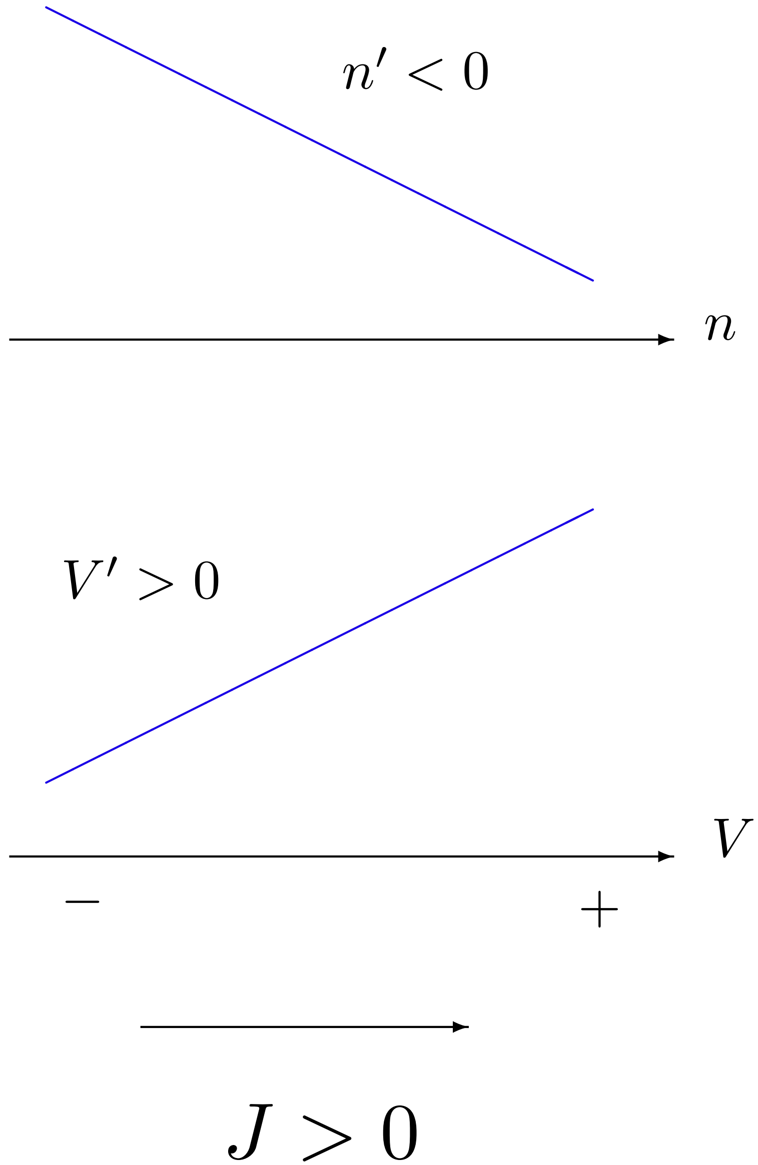
Eindimensionale Gleichungen:

- stationäre Stromdichte konstant: $J' = 0$
- Stromdichte $=$ Diffusionsstrom $+$ Driftstrom:

  $J = J_{\text{diff}} + J_{\text{drift}}$

Frage: Wie lauten Diffusions- und Driftstrom?

Herleitung von Diffusions- und Driftstrom



$$\Rightarrow \quad J_{\text{diff}} = -n'$$

$$\Rightarrow \quad J_{\text{drift}} = nV'$$

$$\Rightarrow \quad \begin{aligned} J &= J_{\text{diff}} + J_{\text{drift}} \\ &= -n' + nV' \end{aligned}$$

Differentialgleichungen:

$$J' = 0, \quad J = -n' + nV' \quad \Rightarrow \quad -n'' + (nV')' = 0, \quad x \in (0,1)$$

Randbedingungen: $n(0) = 1$, $n(1) = 1$

- lineares Randwertproblem zweiter Ordnung (V gegeben)
- kann explizit gelöst werden ($\rightarrow$ VL Diff.gleichungen)

Lösung des Randwertproblems:

$$n(x) = e^{V(x)-V(0)} - J \int_0^x e^{V(x)-V(y)} dy, \quad x \in [0,1]$$

Bestimmung des Stromes J: setze $x = 1$ in obige Formel ein

$$\Rightarrow \quad 1 = e^{V(1)-V(0)} - J \int_0^1 e^{V(1)-V(y)} dy$$

$$\Rightarrow \quad J = (e^{V(1)-V(0)} - 1) \left(\int_0^1 e^{V(1)-V(y)} dy \right)^{-1}$$

Lösung des Randwertproblems:

$$n(x) = e^{V(x)-V(0)} - J \int_0^x e^{V(x)-V(y)} dy, \quad x \in [0,1]$$

$$J = (e^{V(1)-V(0)} - 1) \left(\int_0^1 e^{V(1)-V(y)} dy \right)^{-1}$$

Probe (Randbedingungen):

$$n(0) = e^{V(0)-V(0)} = 1$$

$$n(1) = e^{V(1)-V(0)} - J \int_0^1 e^{V(1)-V(y)} dy = 1$$

$\longrightarrow$ Randbedingungen sind erfüllt

Lösung des Randwertproblems:

$$n(x) = e^{V(x)-V(0)} - J\int_0^x e^{V(x)-V(y)}dy,$$

Rechenregel:

$$\frac{d}{dx}\int_0^x f(x)g(y)dy = \int_0^x f'(x)g(y)dy + f(x)g(x)$$

Probe (Differentialgleichung):

$$\begin{aligned} n'(x) &= e^{V(x)-V(0)}V'(x) - J\int_0^x e^{V(x)-V(y)}V'(x)dy \\ &\quad - Je^{V(x)-V(x)} \\ &= \left(e^{V(x)-V(0)} - J\int_0^x e^{V(x)-V(y)}dy\right)V'(x) - J \\ &= n(x)V'(x) - J \quad \Rightarrow \quad -n' + nV' = J \end{aligned}$$

$\longrightarrow$ Differentialgleichung erfüllt

Drift-Diffusionsgleichungen

Strom:

$$J = \left(e^{V(1)-V(0)} - 1\right) \left(\int_0^1 e^{V(1)-V(y)} dy \right)^{-1}$$

Von Interesse ist die Relation

angelegte Spannung $U := V(1) - V(0)$ zum Strom J

Beispiel: $V(x) = x$ (linear anwachsende Spannung)

$$J = (e^U - 1) \left(\int_0^1 e^{U(1-y)} dy \right)^{-1} = (e^U - 1) \left(\left[-\frac{1}{U} e^{U(1-y)} \right]_0^1 \right)^{-1}$$

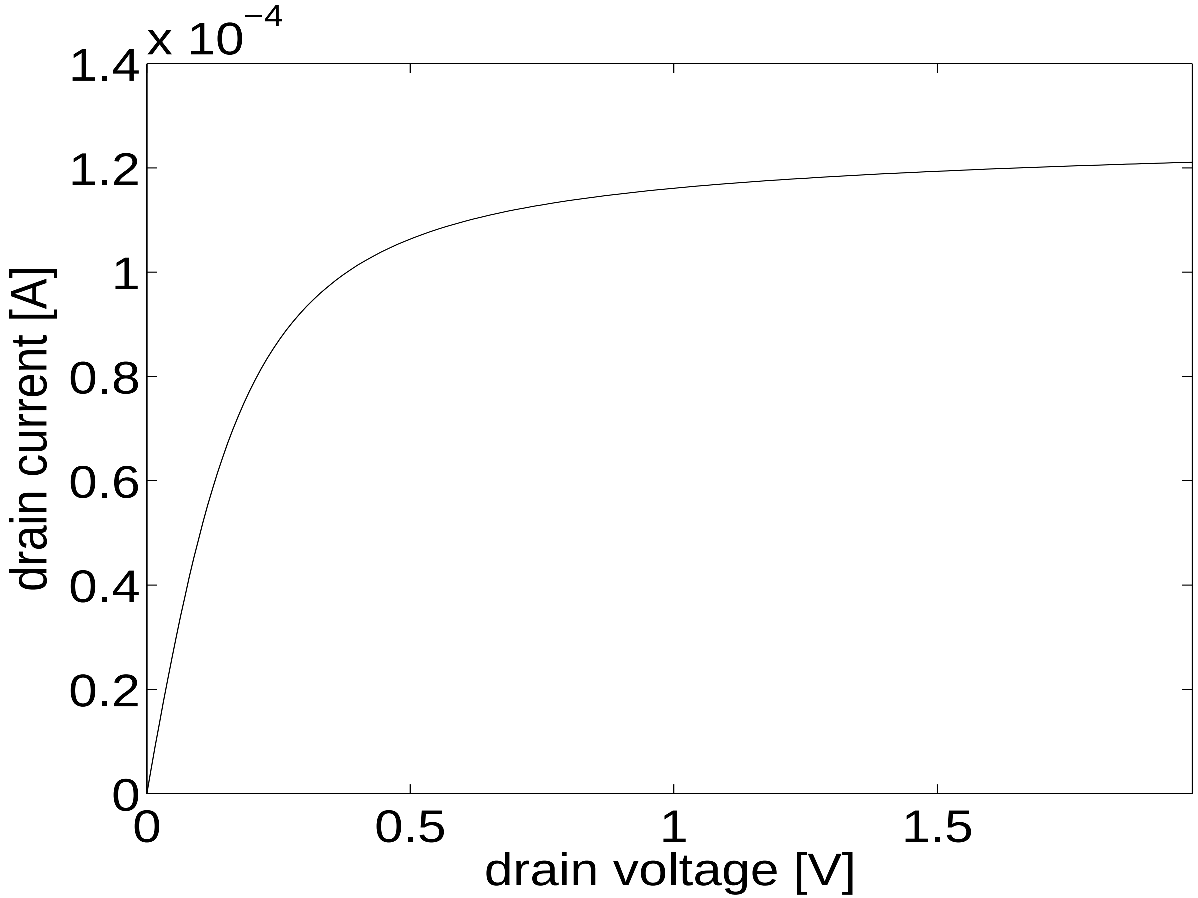
$$= (e^U - 1) \left(-\frac{1}{U}(1 - e^U) \right)^{-1} = U$$

$\longrightarrow$ Strom wächst linear mit angelegter Spannung

$\longrightarrow$ Widerstand $R = \frac{U}{I} = \frac{U}{|J|} = 1$ konstant

Drift-Diffusionsgleichungen

- Spannungsverlauf $V(x) = x$ ergibt $J = U$ (linear)
- Realistischerer Zusammenhang:



- Spannung $0.1 \ldots 0.3\,$V: (fast) lineare Verstärkung
- Spannung $> 0.6\,$V: Sättigung

Verfeinerung der Modellierung

- elektrisches Potential ist nicht gegeben, sondern hängt von Elektronendichte ab (Elektronen erzeugen Potential)
- Modellierung mit Poisson-Gleichung:

$$V'' = n, \quad x \in (0,1), \quad V(0) = 0, \quad V(1) = U$$

Poisson-Drift-Diffusions-Gleichungen:

$$J' = 0, \quad J = -n' + nV', \quad V'' = n, \quad x \in (0,1)$$
$$n(0) = 1, \quad n(1) = 1, \quad V(0) = 0, \quad V(1) = U$$

- nichtlineares Randwertproblem wegen Produkt nV'
- keine explizite Lösung $\Rightarrow$ numerische Lösung

Numerische Methode: Finite Differenzen

- Idee: ersetze Differentialquotient durch Differenzenquotient

$$y'(x) \approx \frac{y(x+\triangle x) - y(x)}{\triangle x}$$

$$y''(x) \approx \frac{y'(x+\triangle x) - y'(x)}{\triangle x}$$

$$\approx \frac{y(x+\triangle x) - y(x)}{(\triangle x)^2} - \frac{y(x) - y(x-\triangle x)}{(\triangle x)^2}$$

$$= \frac{y(x+\triangle x) - 2y(x) + y(x-\triangle x)}{(\triangle x)^2}$$

- Bequemere Schreibweise: $x_i = x$, $x_{i\pm1} = x \pm \triangle x$

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{\triangle x}, \quad y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{(\triangle x)^2}$$

Numerische Methode: Finite Differenzen

- Kontinuierliche Gleichungen:

$$J' = 0, \quad J = -n' + nV', \quad V'' = n$$

- Approximierte Gleichungen:

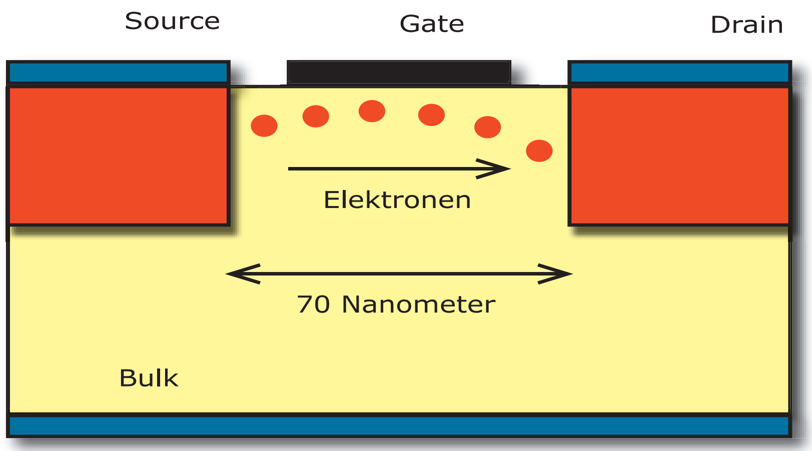
$$0 = \frac{J_i - J_{i-1}}{\triangle x}$$

$$J_i = -\frac{n_{i+1} - n_i}{\triangle x} + \frac{n_{i+1} + n_i}{2} \frac{V_{i+1} - V_i}{\triangle x}$$

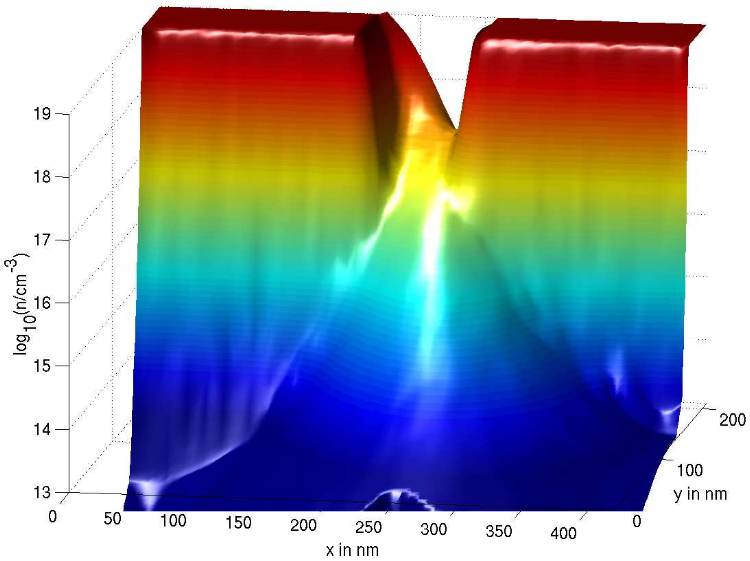
$$n_i = \frac{V_{i+1} - 2V_i + V_{i-1}}{(\triangle x)^2}$$

- Löse diskretes Problem ($\longrightarrow$ VL Numerische Mathematik) und erhalte Approximationen n_i, V_i von $n(x_i)$ und $V(x_i)$

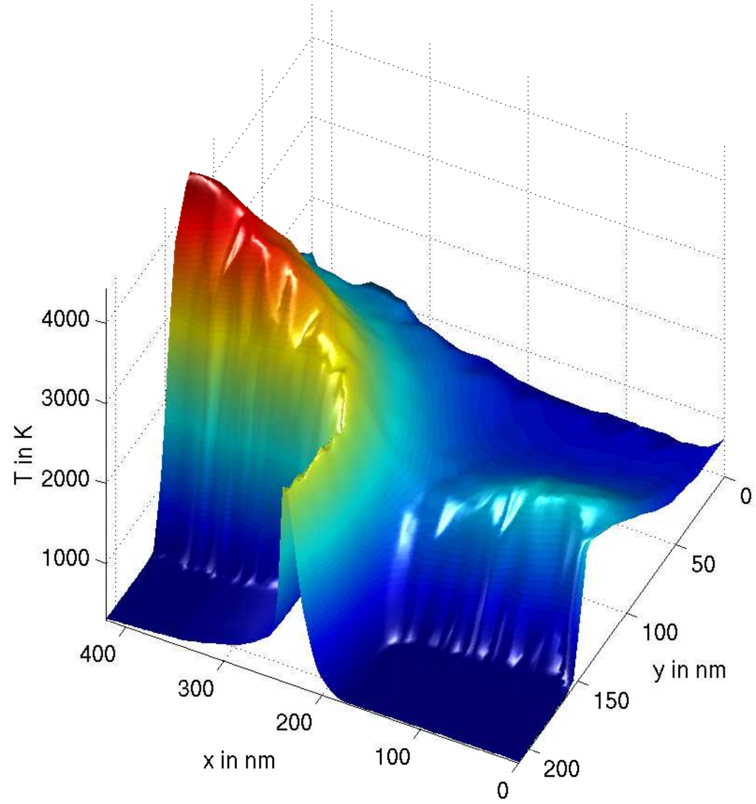
MOS-Transistor in 2D



Elektronendichte

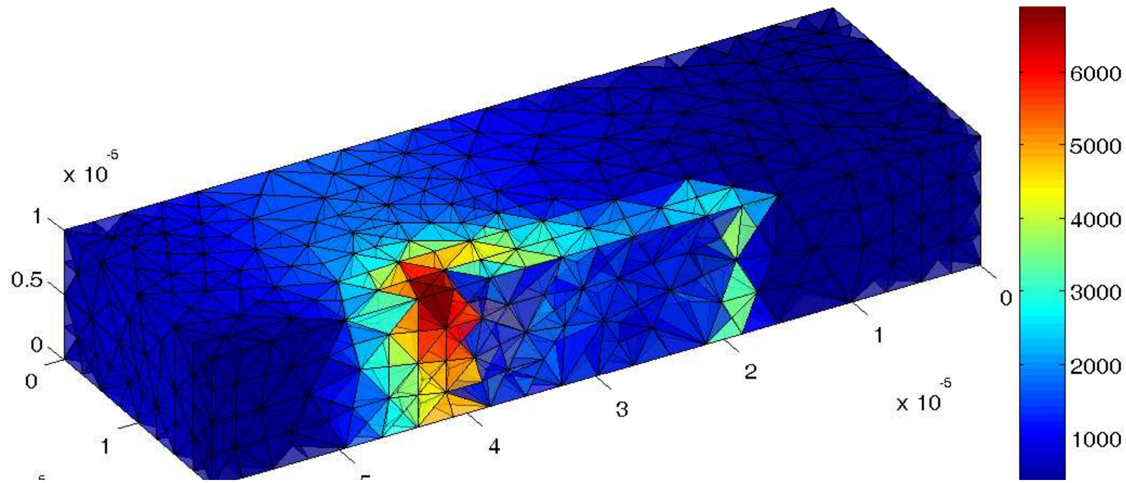


Elektronentemperatur

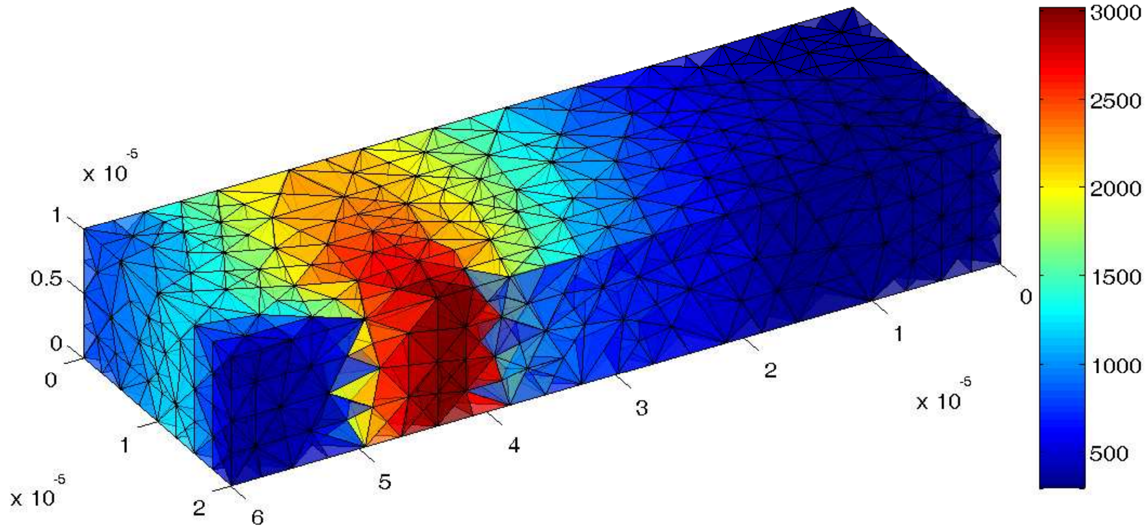


MES-Transistor in 3D (MES = metal-semiconductor)

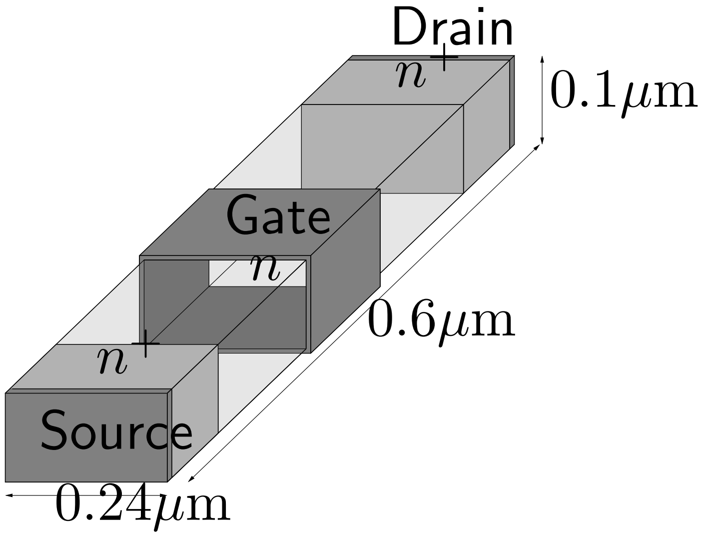
Geschlossener Zustand



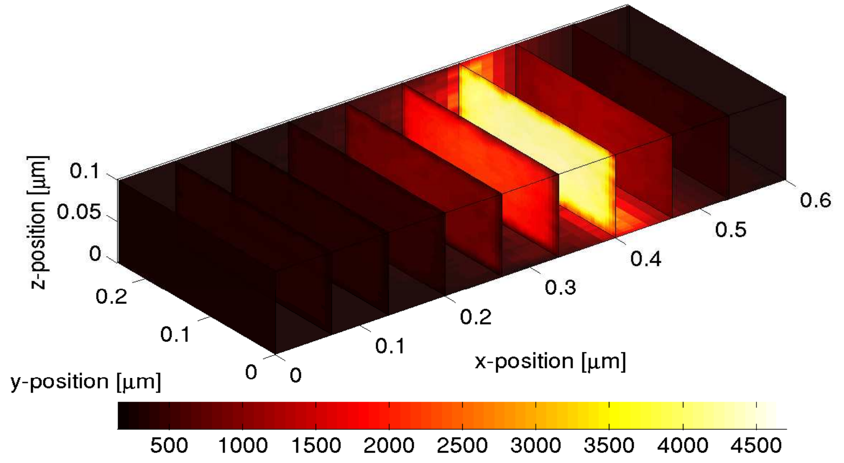
Offener Zustand



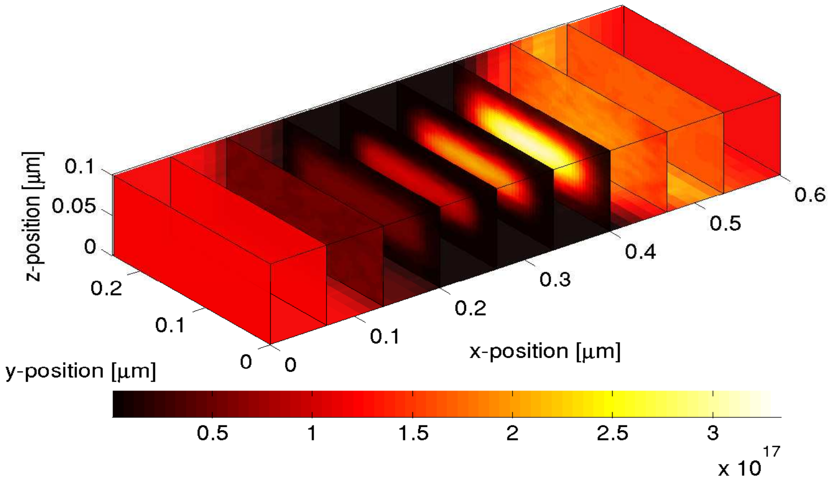
Gate-all-around MES-Transistor in 3D



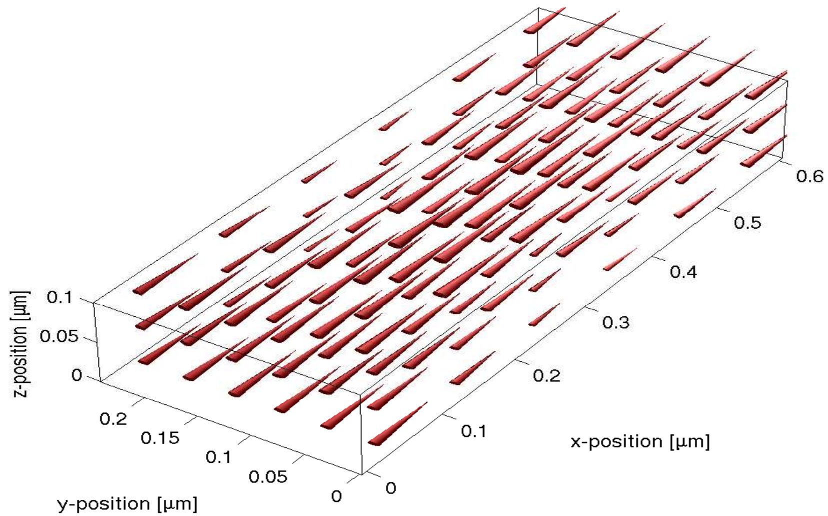
Geometrie



Temperatur



Thermische Energie



Stromdichte

Numerische Beispiele

Quanteneffekte in der Physik

- charakteristische Längen < 100 nm $\Rightarrow$ Quanteneffekte
- Quantenmechanik: Elektronen interpretiert als “Wellen”
- Elektronen können durch “Wände tunneln”
- Beispiel: hochpräzise Mikroskopaufnahmen von Molekülen

Numerische Beispiele

Quanteneffekte in Halbleiterbauteilen

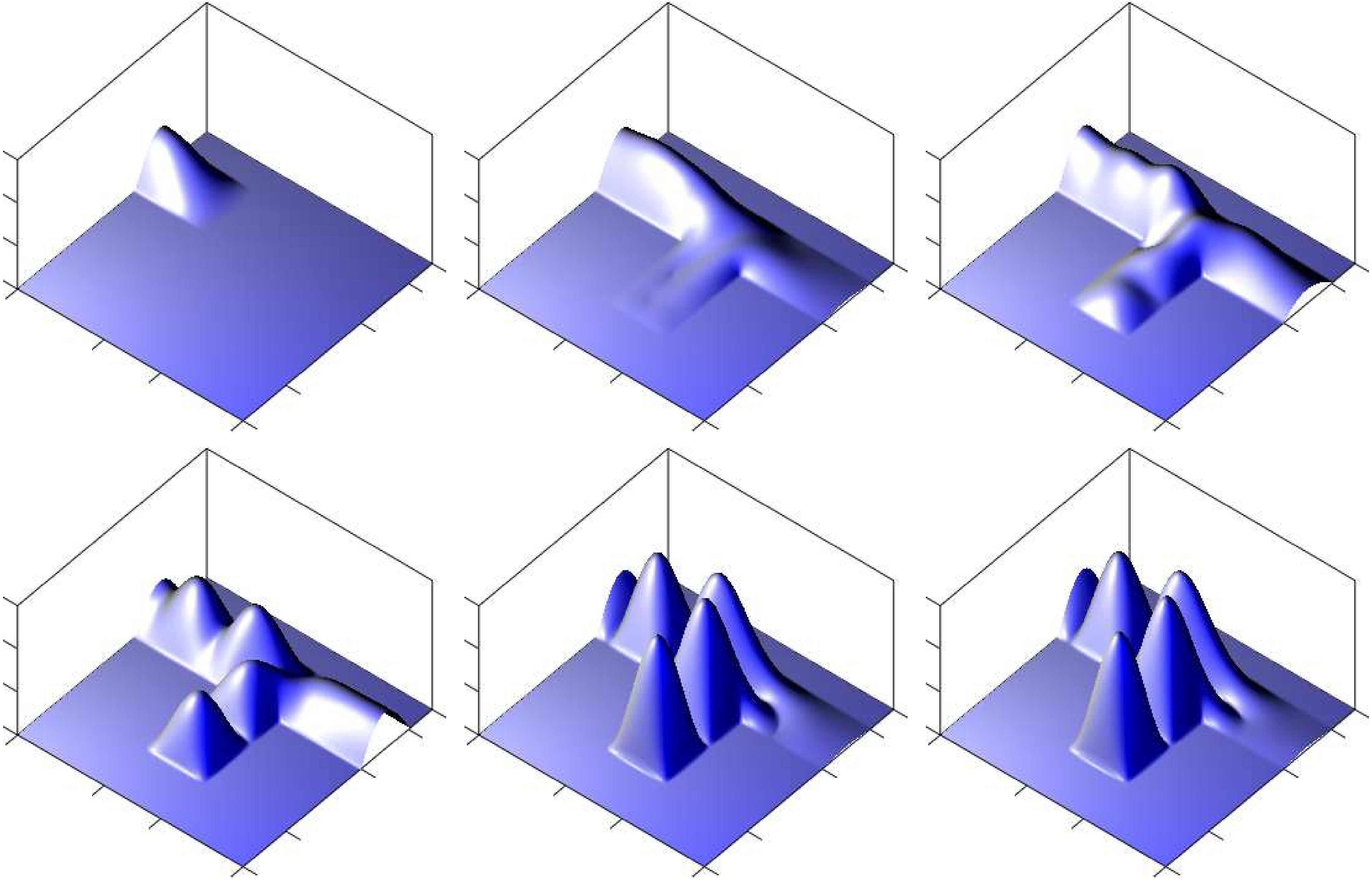
Ziele:

- Speicherung von einzelnen Elektronen (quantum dots)
- ultraschnelle Bauteile und Quantencomputer

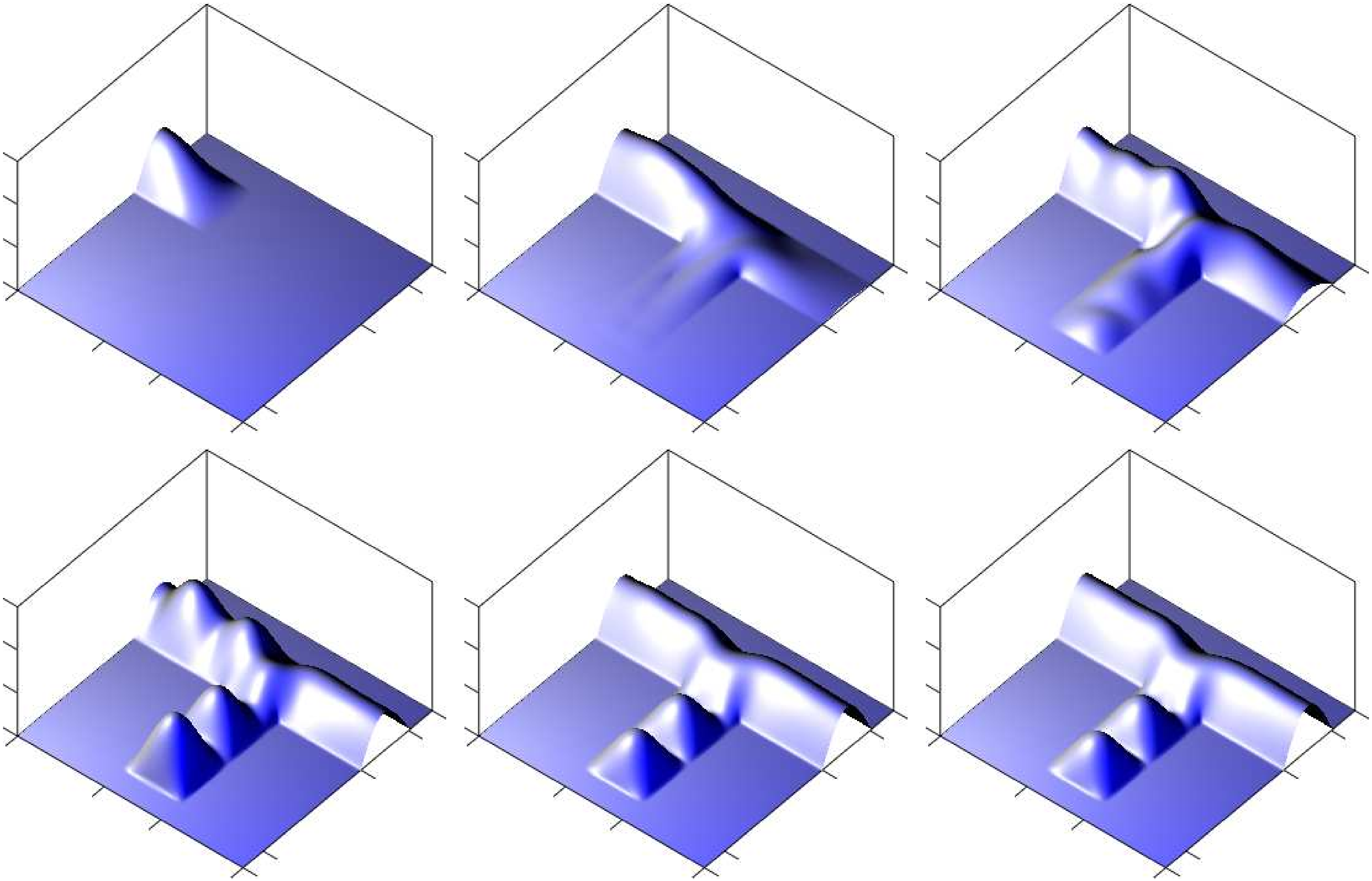
Quantentransistor

- Prinzip: Steuere Elektronenstrom durch Veränderung des Potentials in T-Stück
- Transistor ist entweder offen oder geschlossen

Quantentransistor in 2D: geschlossener Zustand

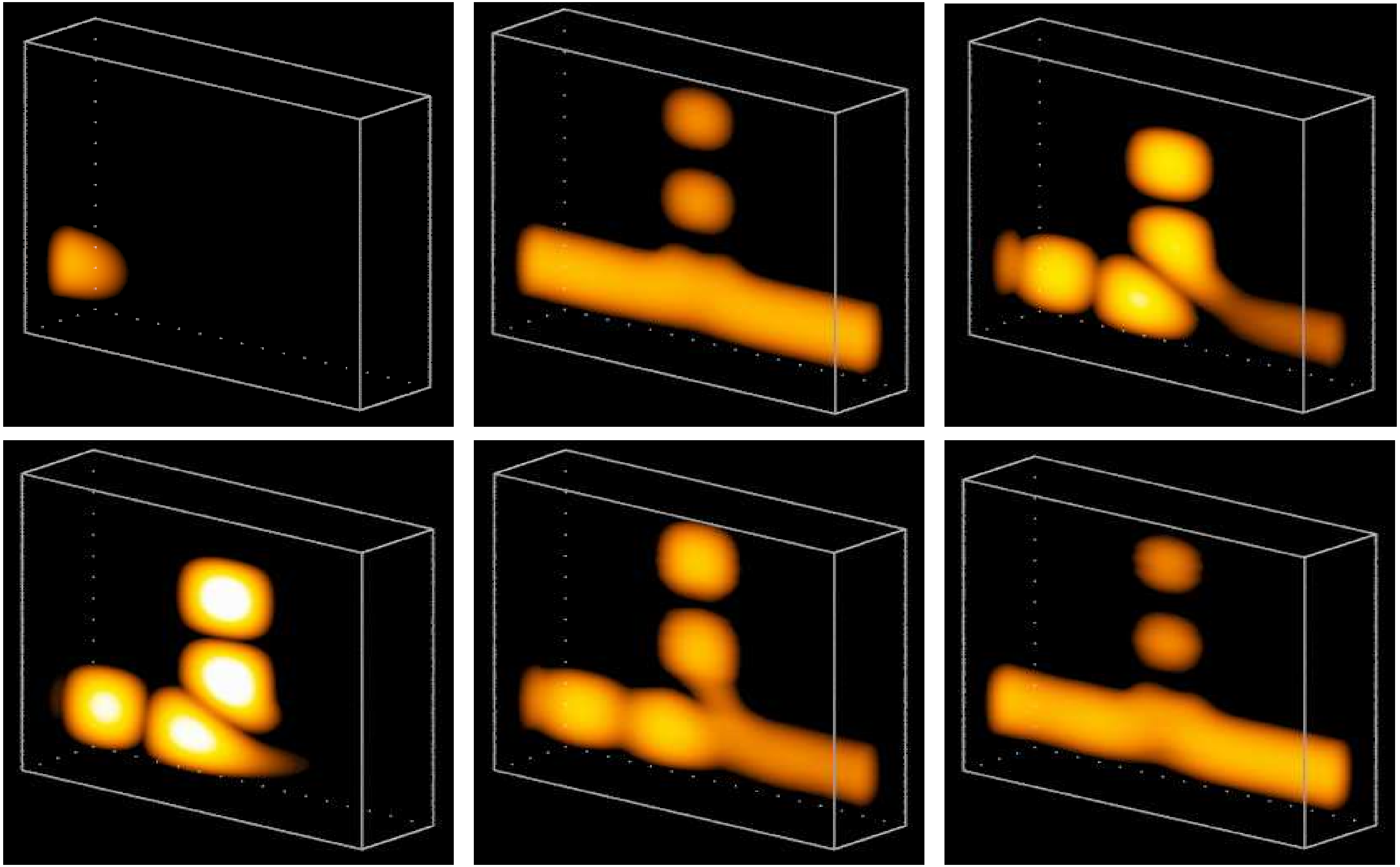


Quantentransistor in 2D: offener Zustand



Numerische Beispiele

Quantentransistor in 3D



Zusammenfassung:

- Modellierung von Halbleiterbauteilen mit Diff.gleichungen
- Analyse der Differentialgleichungen
- Numerische Lösung der Differentialgleichungen

Ziele in der Mathematik:

- Herleitung der Modelle
- Beweis der Existenz und Eindeutigkeit der Lösungen
- Bestimmung einer präzisen Approximation der Gleichungen
- Effiziente numerische Lösung der Gleichungen

Benötigte Mathematik:

- (Gewöhnliche und Partielle) Differentialgleichungen
- Numerische Mathematik
- Funktionalanalysis