

國立清華大學 電機工程學系
實作專題研究成果摘要

Simulating Charge Localization and
Sensing in a FinFET Double Quantum
Dot Device Using TSMC Process
Technologies

基於台積電製程技術的 FinFET 雙
量子點元件之模擬研究

組別：B592

專題領域：電子領域

指導教授：張鑑元教授

組員姓名：黃浚(Huang, Chun)、王永詮(Wang, Yong-Quan)

研究期間：114 年 2 月 17 日至 114 年 11 月 24 日止，共 10 個月

Abstract

This work focuses on electrical simulations of FinFET quantum-dot devices using the quantum TCAD platform (QTCAD)[1]. Owing to their ultra-small footprint, compatibility with existing semiconductor fabrication, and long-lived quantum states, semiconductor qubits are considered promising for efficient, scalable quantum computing[2]. Although we initially aimed to hole devices model consistent with our experimental architecture, the hardware demands of the Luttinger–Kohn model[3] led us to adopt an electron model. We began with a validated SOI FinFET architecture to study quantum-dot spatial distribution, exchange coupling, and charge stability, and then extended the workflow to bulk FinFETs aligned with TSMC process technologies[4], tailoring simulations to process and measurement requirements.

Our results show that both device designs yield stable, convergent solutions for quantum-dot distributions at 10 mK. With suitable gate-voltage configurations, charge-stability diagrams exhibit double-quantum-dot formation, aligning with our initial expectations. For bulk FinFETs, to inform fabrication and measurements, we further confirm that forming a double quantum dot requires a plunger-gate bias exceeding 2.15 V, and we provide temperature-dependent turn-on curves as references for future design adjustments. These findings demonstrate QTCAD’s feasibility for simulating complex devices and its strong correspondence with process and measurement data. Future work will generalize to other quantum-dot designs, enhance QPC and SET sensing[5], and enable tighter co-simulation with conventional TCAD for more comprehensive studies that guide experiments and device design.

摘要

本文著重於量子 TCAD 軟體(QTCAD)[1]對於 FinFET 量子點元件的電性模擬。半導體量子位元因其體積極小、可利用現有半導體製程大規模製造、並能長時間保持穩定的量子態等優點，被視為實現高效量子計算的有力方案[2]。研究初期、我們希望採用與實驗架構相同的電洞元件進行模擬，但礙於難以達到 Luttinger-Kohn Model[3]計算的硬體需求，我們的研究中心轉向以電子模型為主。專題研究先從已有實驗證實的 SOI FinFET 架構進行模擬工作，分別對於量子點分佈、交換耦合、電荷穩定性等量子性質進行研究探討；之後再進一步推廣至採用台積電製程技術的 Bulk FinFET 元件[4]，並依製程、實驗需求進行相關性質的探討。

最終、結果顯示此兩種量子元件設計皆能在 10 mK 下對於量子點分佈的模擬獲得穩定的收斂解；此外、藉由施加特定的閘極電壓配置，在電荷穩定性圖上也能看出形成雙量子點的結果，符合研究最初的預期。在 Bulk FinFET 架構下，為了提供製程與量測的參考，我們額外證實了形成雙量子點的條件為 plunger gate 電壓設置須大於 2.15 V，以及在不同溫度環境下的 turn-on curves，作為未來元件設計修正之依據。我們目前的專題研究成果證實了此軟體在複雜元件的模擬可行性、且與製程和量測實驗有著良好的對照性，未來的研究方向包括推廣至其他量子點元件設計，完善 QPC (Quantum Point Contact) & SET (Single Electron Transistor) sensing[5]功能，並能夠與 TCAD 相互合作、以進行更完善的模擬工作，期望此軟體之模擬成果能作為量子元件量測實驗之對照以及未來元件設計之參考準則。

1 背景與動機 Background / motivation

近年來，國際上 Intel、IBM、Google 等研究團隊都紛紛投入技術人才與經費，甚至許多國家也都制定國家級量子發展計畫，積極研究量子點元件以及量子電腦的研發，希望能在技術有所突破、在未來量子科技產業佔有一席之地。

而台灣在台積電等半導體公司的帶領下，在於晶片製造的技術已經是領先全球並在國際上占有重要地位，目前針對 2 奈米以下的製程持續做研發並量產，隨著製程的尺度日益微縮，精準的模擬元件電性的需求更為重要，而傳統上比較常見的模擬軟體 TCAD 工具主要針對半導體元件進行電性模擬，可以偵測出在接近室溫時微米甚至奈米級元件的載子特性、電流電壓特性等等，對於電路以及製程的開發相當重要。但針對尺度更細微的模擬，例如：量子相關的效應如模擬量子點、能階量子化、量子點分佈等等，要在 TCAD 做到這些事存在一定的困難，因此 QTCAD 應用變得格外重要。

QTCAD 是利用 gmsh 建模出的元件網格圖並在 TCAD 的基礎上結合薛丁格方程和 Poisson 方程自洽解法，來模擬波函數、以及量子相關特性，其中與 TCAD 主要的差異在於 QTCAD 可以作用於低溫的模擬以及細化網格求解，對於我們針對 SOI FinFET 以及 TSMC 7 nm Bulk FinFET 的模擬可以更貼近實際的物理特性，特別適用於探討量子點及 qubit 的物理特性，因此我們這次的研究目標便是想驗證 QTCAD 在先進製程與量子維度元件設計模擬的可行性，期望能利用 QTCAD 在未來的量子元件的開發與模擬有更廣泛的用途。

2 研究目的 Purpose

本專題研究的主要目標為：

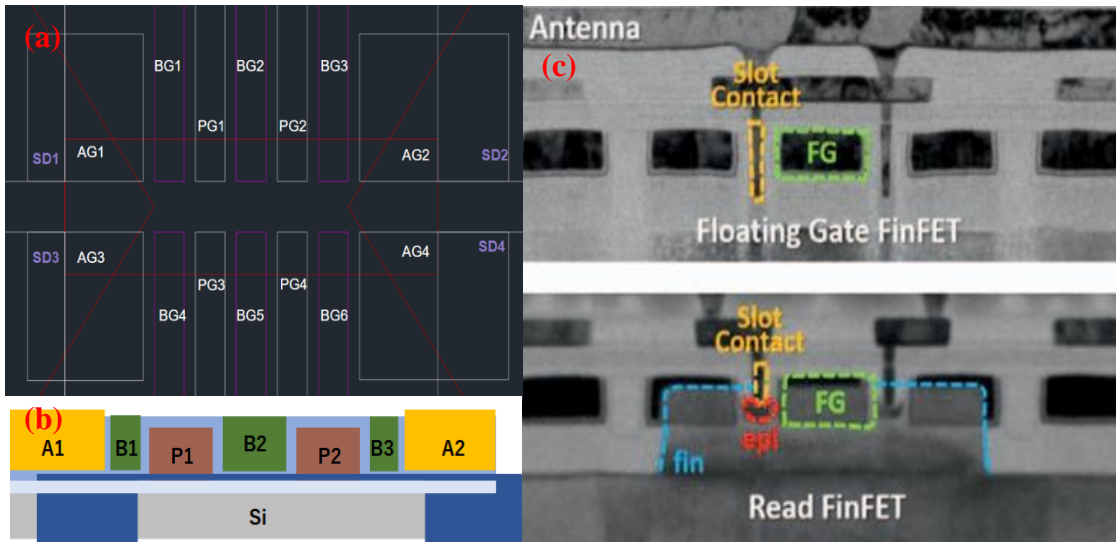
- 詳細了解 QTCAD 軟體[1]的運行邏輯並了解其軟體的物理意義。
- 學習 gmsh 軟體的建模方法和技巧並應用於半導體元件的建模。
- 利用 QTCAD 模擬出 SOI FinFET 以及 TSMC 7 nm Bulk FinFET[4]的量子點分佈、電荷穩定性圖、交換耦合等量子特性。
- 藉由閘極電壓的掃描能帶分析以及不同溫度環境下的 Turn-on curve 模擬為元件製程以及量測實驗提供協助。
- 將 QTCAD 的模擬功能推廣至電洞模型以模擬元件特性並評估未來模擬 QPC & SET 的可行性[5]。

3 研究方法 Methodology

3-1 元件設計與建模

SOI FinFET double quantum dots 元件參考了張鑑元教授的設計架構，如圖(一)的(a)(b)所示。為了在元件中形成雙量子點、並使其交互作用可控，元件設計中使用了七組閘極進行操控(各個閘極之間皆間隔了 15 nm 厚的氧化層): 最外側的為 Accumulate Gate、長為 105 nm，其作用是保證流入 Ohmic Contact 的電子能進入元件內部，因此大多會施加較大的正電壓、以確保能帶抬高形成穿隧；內部交錯排列的則為 Barrier Gate 與 Plunger Gate、長皆為 40 nm，前者作為能壁而施加低電壓，後者則為了形成位能阱而給予高電壓。其餘尺寸部分則如下: 長度為 585 nm、寬為 180 nm、元件兩側以及閘極與通道之間的氧化層厚度皆為 10 nm、閘極寬度為 50 nm、源漏極長 20 nm。而在材料部份、氧化層所使用的材料為氧化鋁(Al_2O_3)，閘極所使用的材料為氮化鈦(TiN)。

Bulk FinFET double quantum dots 元件架構則參考了林崇榮教授先前發表的論文《7 nm FinFET plasma charge recording device》[4]，並與 ChipWiki 中的 FinFET 資訊進行比對(Fin width=6 nm, Fin height=52 nm, Fin pitch=30 nm)，最終確定了元件的設計架構。此元件不同於 SOI、減少了兩組 Barrier Gate 的使用，而只靠 slot contact 結構的 Plunger Gate 來侷限量子點。材料部份、為防止非預期地資訊流失與提高操控性，我們採用了二氧化鈦(HfO₂)作為閘極氧化層材料，其餘氧化層則使用二氧化矽(SiO₂)；此外、為了使能帶對齊能夠最佳化，閘極材料我們選用氮化鈦(TiN)。



圖(一)專題研究中所使用的元件設計圖：(a)為 SOI FinFET 元件的俯視圖；(b)為 SOI FinFET 元件沿中心切片後的側視圖；(c)為 Bulk FinFET 元件的兩方向側視圖[4]

3-2 模擬方式與運行理論

依負責功能與流程進行區分，QTCAD 的運行理論可分成三大區塊：泊松-薛丁格方程(Poisson-Schrodinger Equation)[1]、多體交互作用(Many-Body Interaction)[6]、以及自適應網格(Adaptive Meshing)[1]。

- 泊松-薛丁格方程(Poisson-Schrodinger Equation): 此部分為 QTCAD 量子模擬分析的基礎[1]。量子點可藉由控制少數電子、使 Poisson-Schrodinger Equation 中載子濃度的連續性失效，藉此可分析量子點的位置。具體實現方式是先求解 Poisson Equation 求得空間中的電位分布，並以此與有效質量假設下的 Schrodinger Equation 進行迭代分析、進而推知量子點的電荷定位：

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = \rho$$

$$H(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) = V_{\text{conf}}(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{2} \cdot M_e^{-1} \cdot \mathbf{k}F(\mathbf{r})$$

式(一) Poisson-Schrodinger Equation[1]: 其中 ϵ 是介質的介電常數， ϕ 是電位， $F(\mathbf{r})$ 為電子的波函數、 E 是能量本徵值、而 M_e^{-1} 則是逆有效質量張量

考量到運算成本的消耗，我們在載子的統計模型上採取了一定程度的近似，以 approximate Fermi-Dirac 模型[7]取代更為精細的 Fermi-Dirac 模型，根據研究、可以用約為 0.4% 的相對誤差換取更為高效的運算)：

$$F_{\frac{1}{2}}(x) \approx \left(e^{-x} + \frac{3\sqrt{\pi}}{4} v^{-\frac{3}{8}} \right)^{-1}$$

其中 $v = x^4 + 50 + 33.6x\{1 - 0.68\exp[-0.17(x + 1)^2]\}$

式(二) approximate Fermi-Dirac 模型[7]

- 多體交互作用(Many-Body Interaction): 單一電子在量子點可被定義為單一量子位元，而為了進行雙量子位元的計算邏輯閘，在鄰近量子點中的電子必須產生交互作用。交換相互作用(Exchange Interaction) [6] 為其核心物理機制，當兩個電子被限制在雙量子點結構時，其波函數必須滿足包利不相容原理，這造成了系統的基態與激發態能量差，進而形成二能階系統(two-level system)、以提供量子位元的運行[2]。QTCAD 可利用多體求解器進行精確對角化並求解，進一步求出交換相互作用強度 $J=4(t_c)^2/U$ [1,6]。雙電子系統的哈密頓量則可表示為:

$$H = \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} \left[\sum_{j \in \{L, R\}} \epsilon_j c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t_c (c_{L\sigma}^\dagger c_{R\sigma} + H.c.) \right] + U \sum_{j \in \{L, R\}} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}$$

式(三) 局域化基底下雙電子系統的哈密頓量[6]: t_c 表示量子點間的隧穿耦合強度， U 為單點庫倫相互作用能， ϵ 則為量子點的靜電能級

而當研究到閘極電壓對於量子點系統的影響時，槓桿臂理論(lever arm theory) 在此尤為必須[8]。槓桿臂矩陣可將多體交互作用計算出的能量映射為閘極電壓間距，使模擬中可透過閘極電壓的掃描量化電子間的靜電排斥。槓桿臂 α_G 可定義為量子點電化學電位 μ 對閘極電壓的斜率，在非強穿隧情況下，槓桿臂與系統的關係可由以下式子給出[8]:

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_0 - e\alpha_G V_{\text{bias}}^G \\ E_i &\approx E_{i0} - e \sum_G \alpha_{iG} (V_{\text{bias},G} - V_{\text{bias},G}^0) \\ \alpha_{iG} &= -\frac{1}{e} \frac{\partial E_i}{\partial V_{\text{bias},G}} \end{aligned}$$

式(四)槓桿臂定義與多量子點系統中槓桿臂與系統參數間的關係[8]，其中電化學電位 μ 定義為量子點在 N 電子基態與 $N-1$ 之間的總能量差，

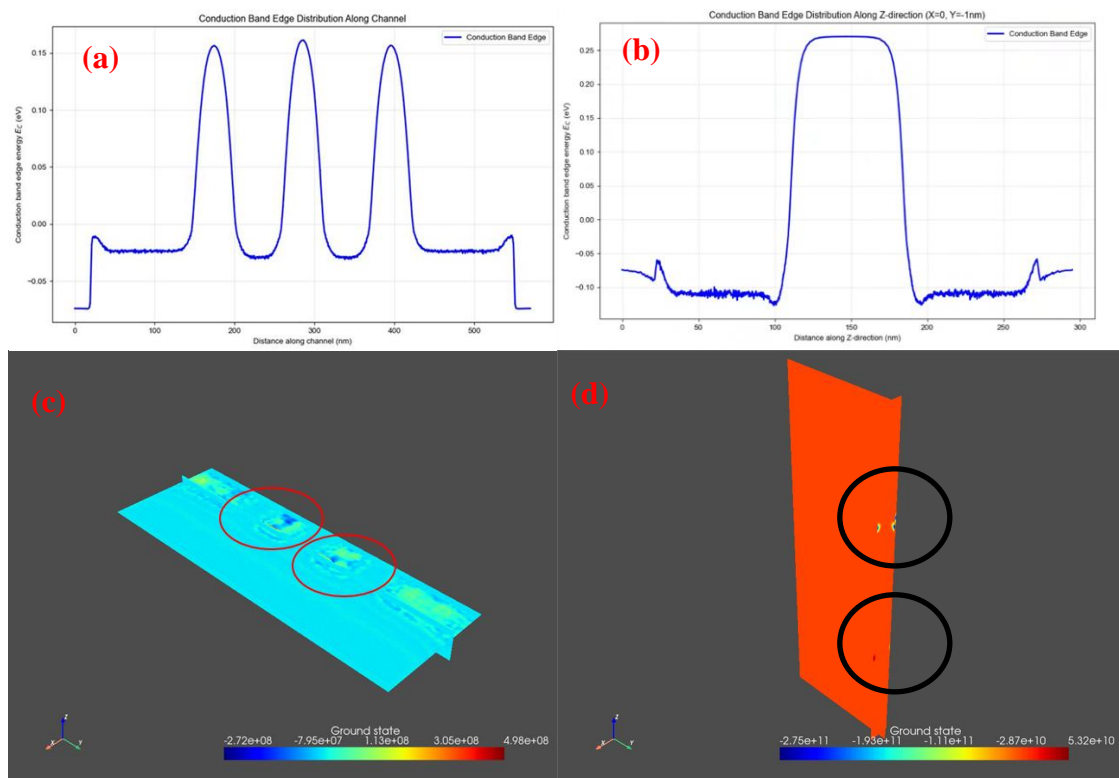
- 自適應網格(Adaptive Meshing): 在極低溫環境下，傳統模擬軟體所使用的均勻網格往往無法有效率的求得收斂解，因此 QTCAD 在求解 Poisson-Schrodinger Equation 時採用了獨特的迭代網格演算法: 當求解器的求解結果無法收斂時，會將原先的網格模型上考量第一次 Poisson-Schrodinger 求解器所算出的電位、載子分布、能帶邊緣等隨空間變化的資訊，在特定區域再度細化、並重複此操作直至收斂，此方法在低溫模擬下尤其有用[1]。根據 Beaudoin et al.[1]的研究，對於在 100 mK 溫度下的模擬，從 4953 個節點的初始網格開始，迭代細化網格，最終網格包含 953,141 個節點。這顯著改善了原先採用均勻網格的效率，其在 1.4 K 下需要 250 萬個節點才可收斂。

4 研究結果 Result

4-1 量子點分佈

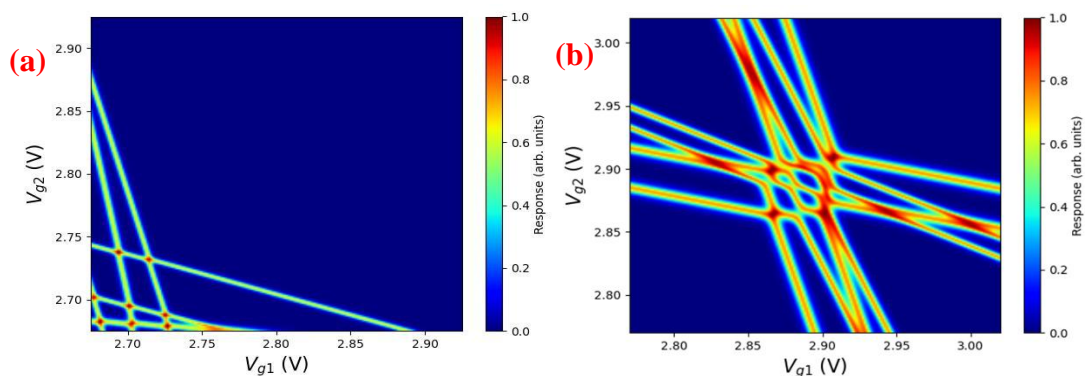
對兩元件分別採取 $V_{AG} = 2.15 \text{ V}$, $V_{BG1,3} = 0.2 \text{ V}$ (Bulk 結構中無 BG1,3), $V_{PG1,2} = 2.849 \text{ V}$, $V_{BG2} = 0.18 \text{ V}$ 配置，並沿著元件中心、通道頂部往下 1 nm 處進行切片，可得出以下導帶邊緣圖與基態下的波函數分佈。

考慮前三個能態下、模擬結果顯示兩者的靜電能級分別為: SOI=[-0.13461732, -0.13460687, -0.12939983]、Bulk=[-0.01625699 -0.01618945 -0.01502825]。兩實驗組的能階差分別為 5.2 meV、1.2 meV、與理想值(~3 meV)相近，其證明了此配置下可形成量子點並能作為 two-level system 以執行量子計算。



圖(二) Poisson-Schrodinger 模擬分析之結果: (a)為 SOI FinFET 元件的導帶邊緣; (b)為 Bulk FinFET 元件的導帶邊緣; (c)為 SOI FinFET 元件的量子點波函數分佈; (d)為 Bulk FinFET 元件的量子點波函數分佈

4-2 電荷穩定性圖



圖(三) 電荷穩定性圖: (a)為 SOI FinFET 之結果; (b)為 Bulk FinFET 之結果

為瞭解不同電壓配置下所對應的電荷狀態，將 $V_{PG1,2}$ 進行掃描以分析雙量子點系統的電流或微分電導、求得與其的函數關係，這些閘極電位會被用於控制每個量子點的化學勢。以 4-1 的配置為中心、上下掃描 125 mV 後可得圖(三)。

此二者皆為考慮四個量子點狀態的電荷穩定性圖，可以發現隨著 V_{g1} (即 V_{PG1})、 V_{g2} (即 V_{PG2}) 的不同組態，形成了如蜂巢狀的趨勢、以此劃分出了不同情況下的電荷穩定狀態。

4-3 交換耦合

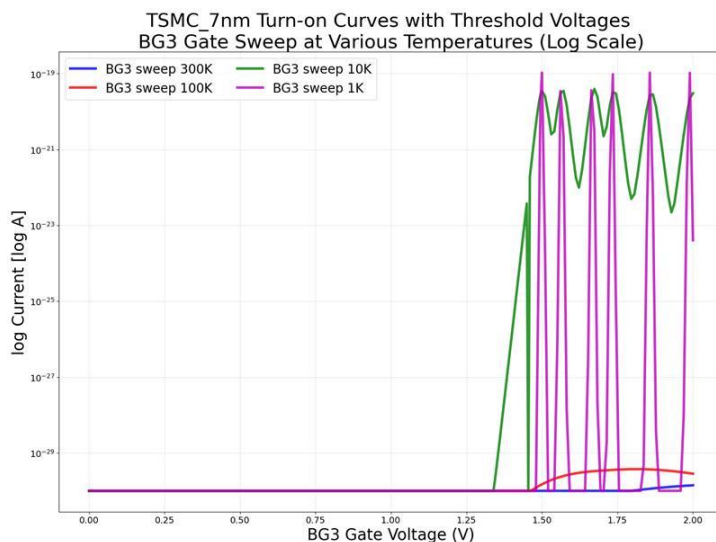
根據 Fermi-Hubbard model[6]、中央能壁的高低會與兩量子點之間的交互作用強度相關，以 4-1 的配置調整 V_{BG2} 的大小，可得如圖(四)之關係圖。此結果呈現指數變化趨勢、符合理論結果，但由於難以收斂且運算成本巨大，目前只在 SOI FinFET 元件中實現少樣本點的關係圖，有待在後續的專題研究中補齊。



圖(四) 交換耦合強度隨 V_{BG2} 的變化

4-4 延伸模擬

由於 Bulk FinFET 元件在實驗測量出現漏電的情形，我們額外引入 transport 模組並利用主方程法[9]進行 Turn-on curve 的模擬，可得如圖之電流變化，並可看出各溫度環境下 BG3 的閾值電壓、以及後續的 Coulomb peak，並以此判斷元件是否有發生非預期的製程錯誤。



圖(五) 不同溫度條件下、Bulk FinFET 元件 BG3 的 Turn-on Curve

5 總結 Conclusion

此專題研究主要有三個主要成果:其一為驗證了新型金屬閘極與氧化層材料的可行性。相較於前人研究中所使用的SiO₂氧化層/Si 閘極[1]架構，此專題使用了貼近實際設計的氧化鋁、二氧化鉛氧化層以及氮化鈦閘極，並成功完成了後續的模擬工作。

其二為將運行溫度下降了一個數量級。相較於軟體教程以及 Beaudoin et al.[1]的相關研究，模擬環境溫度從原先的 100 mK 降至與實驗環境溫度相當的 10 mK。我們藉由增加自適應網格 h.dot 以及增加容許網格數的方式，對於10⁻⁶的容許誤差在經歷數次迭代後可獲得穩定的收斂解。

其三則為證實了複雜元件在量子模擬上的可行性。和軟體教程所使用的 FD-SOI 元件相比，我們所採用的設計添加了兩個用於電荷累積的 accumulate gates 以及可提供更精細操作的兩個 barrier gates；甚至額外證實了 TSMC Bulk FinFET [4] 架構作為量子點元件之可行性。兩元件藉由 QTCAD 進行操作後，可完成諸如:量子點分佈、調節 V_G 以移動量子點位置、計算交換耦合常數、繪製電荷穩定性圖等模擬結果，符合我們原先的預期。

然而、此專題在許多部分仍有需要改進之處，現階段的未來展望如下:

- 量子點元件的電洞模擬: 在執行模擬時，為了減少運算所需的時間與硬體需求，我們採用了以電子以避免 Luttinger-Kohn Model[3]的複雜計算，這導致了模擬結果與實際實驗所測量的元件有所出入，距離模擬與實驗的互相對照、參考依然有些距離。
- Charge sensing 的模擬: 我們打算從 NEGF 方程[10]計算元件內的量子電導，但距離成功實現仍需進一步的研究，目前正積極地與 Felix Beaudoin 博士與 Mohammad Reza Mostaan 先生合作、期望在 QTCAD 中完成此項功能。

6 參考文獻 Reference

- [1] Beaudoin, F., Philippopoulos, P., Zhou, C., Kriekouki, I., Pioro-Ladrière, M., Guo, H., & Galy, P. (2022). Robust technology computer-aided design of gated quantum dots at cryogenic temperature. *Applied physics letters*, 120(26).
- [2] Burkard, G., Ladd, T. D., Pan, A., Nichol, J. M., & Petta, J. R. (2023). Semiconductor spin qubits. *Reviews of Modern Physics*, 95(2), 025003.
- [3] Foreman, B. A. (1993). Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures. *Physical Review B*, 48(7), 4964.
- [4] Tsai, Y. P., Shih, J. R., King, Y. C., & Lin, C. J. (2018, December). 7nm FinFET plasma charge recording device. In 2018 IEEE international electron devices meeting (IEDM) (pp. 17-5). IEEE.
- [5] Prentki, R. J., Fehse, F., Philippopoulos, P., Zhou, C., Guo, H., Korkusinski, M., & Beaudoin, F. (2023, September). Robust Sub-Kelvin Simulations of Quantum Dot Charge Sensing. In 2023 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD) (pp. 349-352). IEEE.
- [6] José C Abadillo-Uriel, Biel Martinez, Michele Filippone, and Yann-Michel Niquet. Two-body wigner molecularization in asymmetric quantum dot spin qubits. *Phys. Rev. B*, 104(19):195305, 2021.
- [7] D Bednarczyk and J Bednarczyk. The approximation of the Fermi-Dirac integral $F_{1/2}(\eta)$. *Physics Letters A*, 64(4):409-410, 1978.
- [8] Andreas Fuhrer. Phase coherence, orbital and spin states in quantum rings. PhD thesis, ETH Zurich, 2003.
- [9] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction. OUP Oxford, 2004.
- [10] Mads Brandbyge, José-Luis Mozos, Pablo Ordejón, Jeremy Taylor, and Kurt Stokbro. Density-functional method for nonequilibrium electron transport. *Phys. Rev. B*, 65(16):165401, 2002.
- [11] Duan, X., Lu, P., Li, W., & Woo, J. C. (2018, March). Parasitic resistance modeling and optimization for 10nm-node FinFET. In 2018 18th International Workshop on Junction Technology (IWJT) (pp. 1-4). IEEE.

7 心得感想 Review and Reflections

在專題研究初期，我們對量子相關的知識相當薄弱，因而在張鑑元老師的引導下，閱讀了好幾篇有關量子模擬與量子基礎介紹的論文，建立起我們對於量子的知識，配合著學校的修課，包含量子物理、固態電子元件導論、固態物理導論等課程，對於量子相關的知識有更深的認識。由於 QTCAD 作為相對新穎的模擬工具，網路上的資料跟參考文獻並不普遍，半導體的模擬還是以傳統的 TCAD 為主流，因此我們從 Nanoacademic QTCAD 官網的教程學習其運行的邏輯以及操作的方式，利用做中學的方式漸漸熟悉此軟體，但過程中也是困難重重，尤其在元件建模上屢屢碰壁，我們嘗試了許多方法，包括教程中的 layout 搭配 devicegen、gmsk 手繪建模、Autocad 3D 建立 3D 結構、到最後採用的 gmsk .geo 編輯的方法，頻繁試錯的歷程不僅培養了我們解決問題的能力，也讓我們學會獨立思考及蒐集資料的能力。

另外，在進行 QTCAD 的模擬時，在閘極電壓的設定、自適應網格的細化、薛丁格-Poisson 方程自洽解的收斂性等問題都使我們花了不少心思去除錯，所幸張鑑元老師在過程中給予我們即時且實用的指導，對於我們實驗的進行助益不少。除此之外，也很感謝 QTCAD 官方免費提供我們許可證的使用權，並在我們有軟體相關不清楚的地方，QTCAD 官方的 Felix Beaudoin 博士都給予我們即時的回應，並協助我們解決手邊棘手的問題，對我們來說是莫大的幫助。

在老師安排每個禮拜的 meeting 中，我們每週注意進度的狀況，並與實驗室的同儕進行報告與分享結果，讓我們養成不拖延的習慣，同時能訓練如何能將自己的成果有條不紊地表達清楚的能力，老師也會給於我們研究方向的指導以及未來發展規劃的建議，讓我們在研究的路上不會迷惘，能循序漸進的將我們的目標達成。過程中雖然跌跌撞撞，而且我們也非同科系的學生，利用自己的專長互助合作，理解對方的難處並建立良好的溝通，便是我們研究路上不可或缺的重要因素及修維。

總體來說，此專題研究涵蓋了量子基礎、元件性質、模擬技術、建模方法等等，算是較新穎且跨領域的主題，從無知到摸索到有些許成果，很感謝一路上幫助我們的師長以及同儕的協助與指導，培養了我們各方面的能力，讓我們能將課本的知識成功實踐，我們也從中獲益良多。