



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

Fakultät für Naturwissenschaften
Institut für Physik



Fraunhofer-Institut für Elektronische Nanosysteme
Abteilung Back-End of Line

MASTERARBEIT

Simulation von Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen?

B.Sc. Florian Fuchs

Chemnitz, den 29. Juni 2014

Gutachter: Prof. Dr. Stefan E. Schulz

Technologien der Nanoelektronik

Prof. Dr. Angela Thränhardt

Theoretische Physik - Simulation neuer Materialien

Fuchs, Florian

Simulation von Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen?

Masterarbeit

Technische Universität Chemnitz, Juni 2014

Stichworte: Kohlenstoffnanoröhrchen (CNT), Feldeffekttransistor (FET), Multiskalenmodellierung, Dichtefunktionaltheorie (DFT), Erweiterte Hückel-Methode (EHT), Elektronischer Transport, Nichtgleichgewichts-Green-Funktion (NEGF), Effektive-Massen-Schrödinger-Gleichung

Zusammenfassung

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	iv
Tabellenverzeichnis	v
Abkürzungsverzeichnis	vi
Symbolverzeichnis	vii
1. Einleitung	1
2. Grundlagen	2
2.1. Kohlenstoffnanoröhrchen	2
2.1.1. Geometrische Struktur	2
2.1.2. Elektronische Eigenschaften	2
2.2. Allgemeiner Überblick über Transistoren	3
2.2.1. Bipolartransistor	3
2.2.2. Feldeffekttransistor	3
2.2.3. Weitere Transistortypen	3
2.3. FET auf CNT-Basis	4
2.3.1. CNTFET mit Schottkybarrieren	4
2.3.2. MOSFET-ähnlicher CNTFET	4
2.3.3. Weitere Transistortypen auf CNT-Basis	4
3. Simulationsmethoden	5
3.1. Multiskalenmodellierung	5
3.2. Atomistische Elektronenstrukturechnung	6
3.2.1. Erweiterte Hückelmethode	6
3.2.2. Dichtefunktionaltheorie	7
3.3. Transportrechnung	8
3.3.1. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus	8
3.3.2. Landauer-Formalismus	8
3.3.3. Atomistix ToolKit	9
3.4. Kontinuumsbeschreibung	10
3.4.1. Numerische Gerätesimulation	10
3.4.2. Boltzmann-Transport-Gleichungs-Löser	11
4. Berechnungen und Ergebnisse	12

5. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick	13
A. Danksagung	15
B. Selbstständigkeitserklärung	17

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis

Symbolverzeichnis

1. Einleitung

2. Grundlagen

Erfindung

2.1. Kohlenstoffnanoröhrchen

2.1.1. Geometrische Struktur

2.1.2. Elektronische Eigenschaften

2.2. Allgemeiner Überblick über Transistoren

2.2.1. Bipolartransistor

2.2.2. Feldeffekttransistor

2.2.3. Weitere Transistortypen

2. GRUNDLAGEN

2.3. FET auf CNT-Basis

2.3.1. CNTFET mit Schottkybarrieren

2.3.2. MOSFET-ähnlicher CNTFET

2.3.3. Weitere Transistortypen auf CNT-Basis

3. Simulationsmethoden

3.1. Multiskalenmodellierung

3. SIMULATIONSMETHODEN

3.2. Atomistische Elektronenstrukturrechnung

3.2.1. Erweiterte Hückelmethode

3.2.2. Dichtefunktionaltheorie

3. SIMULATIONSMETHODEN

3.3. Transportrechnung

3.3.1. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus

3.3.2. Landauer-Formalismus

3.3.3. Atomistix ToolKit

3. SIMULATIONSMETHODEN

3.4. Kontinuumsbeschreibung

3.4.1. Numerische Gerätesimulation

3.4.2. Boltzmann-Transport-Gleichungs-Löser

4. Berechnungen und Ergebnisse

5. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

Anhang A.

Danksagung

ANHANG A. DANKSAGUNG

Anhang B.

Selbstständigkeitserklärung



Zentrales Prüfungsamt

(Anschrift: TU Chemnitz, 09107 Chemnitz)

Selbstständigkeitserklärung^{*}

Name: Fuchs Vorname: Florian geb. am: 24.10.1989 Matr.-Nr.: 230560	<u>Bitte Ausfüllhinweise beachten:</u> 1. Nur Block- oder Maschinenschrift verwenden.
---	---

Ich erkläre gegenüber der Technischen Universität Chemnitz, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe.

Die vorliegende Arbeit ist frei von Plagiaten. Alle Ausführungen, die wörtlich oder inhaltlich aus anderen Schriften entnommen sind, habe ich als solche kenntlich gemacht.

Diese Arbeit wurde in gleicher oder ähnlicher Form noch bei keinem anderen Prüfer als Prüfungsleistung eingereicht und ist auch noch nicht veröffentlicht.

Datum:

Unterschrift:
Florian Fuchs

^{*} Diese Erklärung ist der eigenständig erstellten Arbeit als Anhang beizufügen.