

Fakultät für Naturwissenschaften
Theoretische Physik - Simulation neuer Materialien
Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
Technologien der Nanoelektronik



Fraunhofer Institut für Elektronische Nanosysteme Abteilung Back-End of Line

Masterarbeit

Simulation von Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen?

B.Sc. Florian Fuchs

Chemnitz, den 30. März 2014

Fuchs, Florian

Simulation von Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen? Masterarbeit

Technische Universität Chemnitz, März 2014

Stichworte: Kohlenstoffnanoröhrchen (CNT), Feldeffekttransistor (FET), Multiskalenmodellierung, Dichtefunktionaltheorie (DFT), Erweiterte Hückel-Methode (EHT), Elektronischer Transport, Nichtgleichgewichts-Green-Funktion (NEGF), Semiklassisches Modell



Inhaltsverzeichnis

Al	obild	ungsve	erzeichnis	iv					
Ta	belle	enverze	eichnis	v					
Al	okür	zungsv	verzeichnis	vi					
$\mathbf{S}\mathbf{y}$	mbo	lverzei	ichnis	vii					
1.	Ein	leitung	5	1					
2.	Gru	Grundlagen							
		_	nstoffnanoröhrchen	2					
		2.1.1.	Geometrische Struktur	2					
		2.1.2.	Elektronische Eigenschaften	2					
	2.2.	Allgen	neiner Überblick über Transistoren	3					
		2.2.1.	Bipolartransistor	3					
		2.2.2.	Feldeffekttransistor	3					
		2.2.3.	Weitere Transistortypen	3					
	2.3.	FET a	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								
	3.1.		skalenmodellierung	5					
	3.2.		stische Elektronenstrukturrechnung	6					
			Dichtefunktionaltheorie	6					
		3.2.2.	Erweiterte Hückelmethode	7					
	3.3.	Transp	portrechnung	8					
		3.3.1.	Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus	8					
		3.3.2.	Landauer-Formalismus	8					
		3.3.3.		9					
	3.4.	Kontir	nuumsbeschreibung	10					
		3.4.1.		10					
		3.4.2.	Boltzmann-Transport-Gleichungs-Löser	11					
1	Rer	Berechnungen und Ergebnisse							

Abbildungsverzeichnis

5.	Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick	13
Α.	Danksagung	15
в.	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

- ${\bf 2.2.1.}\ {\bf Bipolar transistor}$
- 2.2.2. Feldeffekttransistor
- 2.2.3. Weitere Transistortypen

- 2. Grundlagen
- 2.3. FET auf CNT-Basis
- ${\bf 2.3.1.} \ \ {\bf CNTFET} \ \ {\bf mit} \ \ {\bf Schottkybarrieren}$
- 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. Dichtefunktionaltheorie

3.2.2. Erweiterte Hückelmethode

- 3. Simulationsmethoden
- 3.3. Transportrechnung
- ${\bf 3.3.1.}\ \ Nichtgleichgewichts\text{-}Green\text{-}Funktionen\text{-}Formalismus}$
- 3.3.2. Landauer-Formalismus

3.3.3. Atomistix ToolKit

- 3. Simulationsmethoden
- 3.4. Kontinuumsbeschreibung
- 3.4.1. Numerische Gerätesimulation

${\bf 3.4.2.}\ \ {\bf Boltzmann\text{-}Transport\text{-}Gleichungs\text{-}L\"{o}ser}$

4. Berechnungen und Ergebnisse

5. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

Anhang A.

Danksagung

Anhang A. Danksagung

Anhang B.

Selbstständigkeitserklärung

Bitte Ausfüllhinweise beachten:

Zentrales Prüfungsamt

(Anschrift: TU Chemnitz, 09107 Chemnitz)

Selbstständigkeitserklärung*

ivallie.	i uciis						
Vorname:	Florian	Nur Block- oder Maschinenschrift verwenden.					
geb. am:	24.10.1989						
MatrNr.:	230560						
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:	Untersc	hrift:					
		Florian Fuchs					