



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 30. 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
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Grundlagen</b>	<b>2</b>
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
<b>3. Simulationsmethoden</b>	<b>5</b>
3.1. Anwendungen von Simulationen . . . . .	5
3.2. Multiskalenmodellierung . . . . .	5
3.3. Atomistische Elektronenstrukturechnung . . . . .	7
3.3.1. Erweiterte Hückelmethode . . . . .	7
3.3.2. Dichtefunktionaltheorie . . . . .	8
3.4. Transportrechnung . . . . .	9
3.4.1. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus . . . . .	9
3.4.2. Landauer-Formalismus . . . . .	9
3.4.3. Atomistix ToolKit . . . . .	10
3.5. Kontinuumsbeschreibung . . . . .	11
3.5.1. Numerische Gerätesimulation . . . . .	11
3.5.2. Boltzmann-Transport-Gleichungs-Löser . . . . .	12
<b>4. Berechnungen und Ergebnisse</b>	<b>13</b>

<b>5. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick</b>	<b>14</b>
<b>A. Danksagung</b>	<b>15</b>
<b>B. Selbstständigkeitserklärung</b>	<b>17</b>

## Abbildungsverzeichnis

# Tabellenverzeichnis

3.1. Einige Implementationen der unterschiedlichen Simulationsmodelle, welche im Text vorgestellt wurden. . . . .	6
---	---

## 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. Anwendungen von Simulationen

Wie bereits in Kapitel 1 angerissen wurde, existieren zahlreiche Anwendungsszenarien für Simulationen im Zusammenhang mit CNTFETs.

Zum einen sind sie unerlässlich bei der *Einschätzung neuer Technologien*. Insbesondere aufgrund hoher Kosten, die beim Wechsel der aktuell genutzten Technologie stets anfallen, sind vorangehende Simulationen von größter Bedeutung. Nicht nur die Abschätzung der Leistung ist hier wichtig, sondern auch die Frage nach Zuverlässigkeit, Lebensdauer als auch der anfallenden Kosten. Nur wenn die neue Technologie diesen und einigen weiteren Ansprüchen genügt, ist ein Wechsel ohne Risiken möglich.

Auch die *Optimierung der Transistoren* stellt ein wichtiges Anwendungsfeld für Simulationen dar. Hier gilt es die optimale Kombination zahlreicher möglicher Parameter zu finden. Neben der Wahl der verwendeten Materialien gehören hierzu auch geometrische Eigenschaften. Die Ergebnisse können schließlich als Basis für experimentelle Arbeit sowie Industrieanwendungen dienen.

Schließlich ist dank Simulationen auch ein *tieferer Einblick in die physikalischen Vorgänge* innerhalb des Transistors möglich. Dadurch können experimentelle Ergebnisse begründet und genauer verstanden werden. Insbesondere da durch die zunehmende Miniaturisierung sich die Größe der Transistoren an die atomare Skala annähert, müssen auch quantenmechanische Effekte berücksichtigt werden. (Gibt es hier ein gutes Beispiel?)

← Hier fehlt etwas!

### 3.2. Multiskalenmodellierung

Für die theoretische Beschreibung und Simulation von Transistoren sind zahlreiche Ansätze denkbar.

Aufgrund der sehr kleinen Abmessungen der heutigen und insbesondere zukünftiger Transistoren bieten sich *atomistische Simulationen* an. Hierbei stellt die Position der einzelnen Atome den Ausgangspunkt der Rechnungen dar. In Abhängigkeit von der verwendeten Methode sind dabei keine – wie im Falle von ab initio Methoden – oder nur eine geringe Anzahl externer Parametern notwendig. Damit verbunden ist jedoch auch ein relativ hoher Rechenaufwand, was diese Methoden meist nur für die Untersuchung kleinerer Systeme praktikabel macht.

Eine Alternative stellen sogenannte *numerische Gerätesimulationen* dar. Anstelle der exakten Atompositionen treten hier effektive Modelle zur Beschreibung der Systemeigenschaften. Für eine korrekte Beschreibung sind dabei jedoch externe Parameter notwendig, welche beispielsweise von atomistischen Rechnungen oder experimentellen Un-

### 3. SIMULATIONSMETHODEN

Tabelle 3.1.: Einige Implementationen der unterschiedlichen Simulationsmodelle, welche im Text vorgestellt wurden.

Atomistisch Simulation    Numerische Gerätesimulation    Kompaktmodell    Schaltkreissimulation

tersuchen extrahiert werden müssen. Unbekannte Parameter ermöglichen im Gegenzug jedoch auch die Anpassung der Resultate an experimentelle Ergebnisse. Schließlich erleichtern numerische Gerätesimulationen die Ableitung von Formeln und Gesetzen für sogenannte *Kompaktmodelle*.

Bei Kompaktmodellen erfolgt die Beschreibung des Transistors auf Basis von Formeln. Schließlich ermöglichen *Schaltkreissimulation* die Beschreibung ganzer Schaltkreise mit bis zu (?? Literatur?) Transistoren. (...)

In Tabelle 3.1 sind einige Implementierungen der vorgestellten Methoden aufgeführt.

—→ Hier  
fehlt  
was!  
—→ Hier  
fehlt  
was!



### **3.3. Atomistische Elektronenstrukturrechnung**

#### **3.3.1. Erweiterte Hückelmethode**

### 3. SIMULATIONSMETHODEN

#### **3.3.2. Dichtefunktionaltheorie**

### **3.4. Transportrechnung**

#### **3.4.1. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus**

#### **3.4.2. Landauer-Formalismus**

### 3. SIMULATIONSMETHODEN

#### **3.4.3. Atomistix ToolKit**

## **3.5. Kontinuumsbeschreibung**

### **3.5.1. Numerische Gerätesimulation**

### 3. SIMULATIONSMETHODEN

#### **3.5.2. 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<sup>\*</sup>

Name: Fuchs Vorname: Florian geb. am: 24.10.1989 Matr.-Nr.: 230560	<b><u>Bitte Ausfüllhinweise beachten:</u></b> 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

<sup>\*</sup> Diese Erklärung ist der eigenständig erstellten Arbeit als Anhang beizufügen.