



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 9. Juli 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, Juli 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

## Tabellenverzeichnis

# Abkürzungsverzeichnis

CNT	Carbon Nanotube	Kohlenstoffnanoröhrchen
MOSFET	Metal-Oxid-Semiconductor Field-Effect Transistor	Metall-Oxid-Halbleiter- Feldeffekttransistor
DFT	Density Functional Theory	Dichtefunktionaltheorie
EHT	Extended Hückel Theory	Erweiterte Hückelmethode
NEGF	Non-equilibrium Green's function formalism	Nichtgleichgewichts- Green-Funktions- Formalismus

## Symbolverzeichnis



# 1 Einleitung

## **2 Grundlagen**

### **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**

## **2.3 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 Über die Notwendigkeit von Simulationen

Wie bereits in Kapitel ?? 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 der potenziell zukünftigen Technologie 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 aus wirtschaftlichen Gründen sinnvoll.

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 Ausgangspunkt für experimentelle Arbeiten als auch industrielle Umsetzungen dienen.

Schließlich ist dank Simulationen auch ein *tieferer Einblick in die Physik* der Transistoren möglich, was für das Verstehen experimenteller Ergebnisse notwendig ist. Dies ist insbesondere aufgrund der zunehmenden Miniaturisierung heutiger Transistoren von Bedeutung, da aufgrund der kleinen Abmessungen atomare sowie quantenmechanische Effekte berücksichtigt werden müssen. Nur dank eines fundierten theoretischen Verständnisses ist eine korrekte Beschreibung der Transistoreigenschaften sowie des Transistorverhaltens möglich.

### 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 Parameter notwendig. Zahlreiche Effekte, die bei anderen Methoden zusätzlich berücksichtigt werden müssen, werden bei atomistischen Rechnungen automatisch mit berücksichtigt, wodurch beispielsweise die Beschreibung von Tunnelströmen erleichtert wird. Damit verbunden ist jedoch auch ein relativ hoher Rechenaufwand, was diese Methoden meist nur für die Untersuchung kleinerer Systeme praktikabel

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

Atomistische Simulation	Numerische Gerätesimulation	Kompaktmodellierung	Schaltkreissimulation
Zitat	Zitat	Zitat	SPICE [?]

macht.

Eine Alternative zu atomistischen Methoden stellen sogenannte *numerische Gerätesimulationen* dar. Anstelle der exakten Atompositionen kommen hier effektive Modelle zur Beschreibung der Systemeigenschaften zum Einsatz. Hierfür sind jedoch externe Parameter notwendig, welche beispielsweise von atomistischen Rechnungen oder experimentellen Untersuchungen extrahiert werden müssen. Gleichzeitig können unbekannte Parameter jedoch auch als Fit-Parameter genutzt werden, um so Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten zu erreichen. Aussagen für das Experiment können so schnell erzielt werden, eine physikalisch korrekte Beschreibung des Systems ist so jedoch nur begrenzt möglich. Numerische Gerätesimulationen erlauben jedoch auch eine weitaus schnellere Berechnung der Systeme. Auch können sie genutzt werden, um Gesetzmäßigkeiten abzuleiten. Bei atomistischen Verfahren ist dies vergleichsweise schwierig, da .

Eine Beschreibung basierend auf Gesetzmäßigkeiten und Formeln bildet die Grundlage für die sogenannte *Kompaktmodellierung*. Derartige Kompaktmodelle basieren entweder auf physikalischen Überlegungen und Gesetzen oder aber auch nur auf Fit-Prozeduren. Schließlich ermöglichen *Schaltkreissimulation* die Beschreibung ganzer Schaltkreise mit bis zu Transistoren. Dabei können wie beispielsweise bei die Ergebnisse der Kompaktmodelle direkt als Eingabe verwendet werden. Hierzu gehören insbesondere das Programm SPICE (engl. simulation program with integrated circuit emphasis) [?].

In Tabelle ?? sind einige Implementierungen der vorgestellten Methoden aufgeführt.

### **3.3 Atomistische Elektronenstrukturechnung**

#### **3.3.1 Erweiterte Hückelmethode**

### 3.3.2 Dichtefunktionaltheorie



## **3.4 Transportrechnung**

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

### **3.4.2 Landauer-Formalismus**

### **3.4.3 Atomistix ToolKit**

## **3.5 Kontinuumsbeschreibung**

### **3.5.1 Numerische Gerätesimulation**

### **3.5.2 Boltzmann-Transport-Gleichungs-Löser**

## 4 Berechnungen und Ergebnisse

## **5 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick**

## Literaturverzeichnis

- [1] LAURENCE WILLIAM NAGEL und DONALD PEDERSON: *SPICE: Simulation program with integrated circuit emphasis*. Memorandum (University of California, Berkeley, Electronics Research Laboratory). University of California, Berkeley, 1 Auflage, 1973.

## 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.