



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

Fakultät für Naturwissenschaften
Institut für Physik



Fraunhofer

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
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. Über die Notwendigkeit 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
4. Berechnungen und Ergebnisse	13

5. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick	14
A. Danksagung	15
B. Selbstständigkeitserklärung	17

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. Über die Notwendigkeit 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 der potenziellen 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 der 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. 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 kommen hier effektive Modelle zur Beschreibung der Systeme

3. SIMULATIONSMETHODEN

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

Atomistische Simulation	Numerische Gerätesimulation	Kompaktmodell	Schaltkreissimulation
Zitat	Zitat	Zitat	Zitat

meigenschaften 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 sogenannte *Kompaktmodelle*. Diese können auf physikalischen Überlegungen und Gesetzen oder aber auch nur auf Fit-Prozeduren basieren.

Schließlich ermöglichen *Schaltkreissimulation* die Beschreibung ganzer Schaltkreise mit bis zu Transistoren. Dabei können wie beispielsweise bei den Ergebnissen der Kompaktmodelle direkt als Eingabe verwendet werden.

In Tabelle 3.1 sind einige Implementierungen der vorgestellten Methoden aufgeführt.

Warum?

??? Literatur?

Lit.

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^{*}

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.