

Diplomarbeit

**MULTISKALENSIMULATION  
DES LADUNGSTRANSPORTS  
IN SILIZIUM-NANODRAHT-TRANSISTOREN**

**EVALUATION DER GRENZEN DES SIMULATIONSMODELLS:  
IST DIE BESTIMMUNG VON PHYSIKALISCHEN PARAMETERN  
AUS GEMESSENEN STROM-SPANNUNGS-KENNLINIEN MÖGLICH?**

Hagen Eckert  
Mat.-Nr.: 3381653

Betreut durch:  
Dr. Jens Kunstmann

Gutachter:  
Prof. Gianaurelio Cuniberti  
Prof. Thomas Mikolajick

Eingereicht am 31.08.2012

## Aufgabenstellung für die Diplomarbeit

im Studiengang                      Werkstoffwissenschaft  
in der Studienrichtung              Funktionswerkstoffe  
Name des Diplomanden:              Hagen Eckert  
Thema:                                      Multiskalensimulation des Ladungstransports in  
    Silizium-Nanodraht-Transistoren -  
    Evaluation der Grenzen des Simulationsmodells:  
    Ist die Bestimmung von physikalischen Parametern  
    aus gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien  
    möglich?

### Zielsetzung:

In der Nanotechnologie stellen Silizium-Nanodrähte einen wichtigen Baustein für die Entwicklung von Schaltkreisen oder Sensoren dar. Bevor diese zur Anwendung kommen können, müssen die physikalischen Vorgänge bei der Stromleitung durch die Nanodrähte verstanden werden.

Diese Arbeit basiert auf einem bereits bekannten Multiskalenmodell zur Simulation des Ladungstransports in Silizium-Nanodraht-Feldeffekttransistoren. Ziel ist es, die Abhängigkeit der berechneten Strom-Spannungs-Kennlinien von den numerischen und physikalischen Parametern des Modells und den geometrischen Parametern des Transistors zu bestimmen.

Dadurch sollen:

- Die Bedingungen an die Genauigkeit der verwendeten Eingangsparameter und damit die Grenzen der Anwendbarkeit des Modells bestimmt werden.
- Vorhersagen über optimale Material- und Geräteparameter getroffen werden.
- Die Möglichkeit der Bestimmung von physikalischen Parametern (wie etwa die Schottky-Barriere) durch Anpassung von simulierten an gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien evaluiert werden.

Betreuer:                                  Dr. rer. nat. Jens Kunstmann  
Ausgehändigt am:                      02.07.2012

Einzureichen am:                      02.11.2012

Die von der Studienrichtung erlassenen Richtlinien zur Anfertigung der Diplomarbeit sowie die Diplomprüfungsordnung sind zu beachten.

## **DANKSAGUNG**

Ich möchte Prof. Cuniberti dafür danken, dass er mir die Möglichkeit gab, an seinem Lehrstuhl als Studentische Hilfskraft tätig zu sein und so den Weg zu dieser Diplomarbeit ebnete.

Auch Prof. Mikolajick möchte ich für das Interesse an meiner Arbeit danken, für die er sich freundlicherweise als Gutachter zur Verfügung gestellt hat.

Insbesondere danke ich Dr. Kunstmann für die interessante und herausfordernde Aufgabe, die er mir für meine Diplomarbeit anvertraute. Insbesondere natürlich für seinen unglaublichen Einsatz, mit dem er die Entstehung dieser Arbeit unterstützt hat.

I would like to thank Dr. Nozaki for the great introduction to the topic and the helpful discussions about it. ありがとう

Meiner Familie, meinen Kommilitonen und Freunden danke ich aufs herzlichste für ihre hilfreichen Beiträge zu dieser Arbeit und ihrer großartigen Unterstützung während meines gesamten Studiums.

EST AD ASTRA MOLLIS E TERRIS VIA - SENECA

## **ERKLÄRUNG**

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig, unter Angabe aller Zitate und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Hagen Eckert

Dresden, 31.08.2012

**Kurzfassung:** Durch Multiskalensimulationen wird der Ladungstransport in nanodrahtbasierten Schottky - Barrieren - Feldeffekt - Transistoren im Materialsystem  $\text{Ni}_2\text{Si}/\text{Si}$  untersucht. Die Bedingungen an die Genauigkeit der verwendeten Eingangsparameter werden bestimmt und Vorhersagen über optimale Material- und Geräteparameter werden getroffen. Es wird die Frage beantwortet, ob die Bestimmung von physikalischen Parametern aus einzelnen gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinie möglich ist. Der Feldeffekt wird durch Berechnungen auf Basis der Finiten-Elemente-Methode und die resultierenden Stromflüsse durch ein quantenmechanisches Transportmodell ermittelt. In der Untersuchung der geometrischen Eingangsparameter wird gezeigt, dass bis auf den Radius des Nanodrahtes die in einem Experiment zu erwartenden Messfehler keinen drastischen Einfluss auf die Strom-Spannungs-Kennlinie haben. Signifikant ist hingegen der Einfluss der Temperatur, der effektiven Ladungsträgermassen und der Höhe der Schottky-Barriere. Da diese drei Eingangsparameter des betrachteten Systems mit relativ großen Ungenauigkeiten behaftet sind, ist die Bestimmung von physikalischen Parametern aus einzelnen gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien auf die erhoffte Weise nicht möglich. Die Arbeit zeigt auch, dass bereits moderate Veränderungen der Arbeitstemperatur einen bedeutenden Einfluss auf die Strom-Spannungs-Kennlinie haben. Für die Konstruktion von Transistoren mit hoher Stromdichte kann anhand der ermittelten Daten die Verkleinerung der aktiven Region durch Oxidation vorgeschlagen werden.

**Abstract:** Charge transport in nanowire-based Schottky-barrier field-effect transistors in the material system  $\text{Ni}_2\text{Si} / \text{Si}$  is examined by multi-scale simulations. The requirements for the accuracy of the input parameters are determined and predictions about optimum material and device parameters are made. The question is answered, whether the determination of physical parameters from individual measured current-voltage curves is possible? The field effect is described by calculations based on the finite element method and the resulting currents are calculated with a quantum mechanical transport model. In the study of the geometric input parameters it is shown that experimental uncertainties do not drastically affect the current-voltage characteristic, except from the nanowire radius. However, significant is the influence of the temperature, the effective charge carrier mass and the height of the Schottky-barrier. Since these three input parameters are known only with low experimental accuracy for the considered system, the determination of physical parameters from individual measured current-voltage curves is not possible in the expected way. The results also show that moderate changes of the working temperature have a significant influence on the current-voltage characteristic. For the construction of transistors with high current density the reduction of the active region by oxidation is proposed.

# INHALTSVERZEICHNIS

Kurzfassung / Abstract . . . . .	II
Verwendete Symbole . . . . .	IV
Verwendete Parameter . . . . .	VI
Verwendete Abkürzungen . . . . .	VII
<b>1 Motivation</b>	<b>8</b>
<b>2 Grundlagen</b>	<b>9</b>
2.1 Modellbildung und Simulation . . . . .	9
2.2 Schottky-Diode . . . . .	10
2.3 Feldeffekt-Transistor . . . . .	12
2.4 Feldeffekt-Transistor auf der Basis von Silizium-Nanodrähten . . . . .	13
<b>3 Methoden</b>	<b>17</b>
3.1 Simulationsmodell . . . . .	17
3.2 Finite-Elemente-Methode . . . . .	20
3.3 Landauer-Büttiker-Formalismus . . . . .	21
3.4 Hamiltonoperator . . . . .	22
3.5 Transmissionsfunktion . . . . .	23
3.6 Büttiker Sonde . . . . .	24
<b>4 Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>26</b>
4.1 Implementierung des Simulationsprogrammes . . . . .	26
4.2 Berechnung der Basis-Strom-Spannungs-Kennlinie . . . . .	31
4.3 Wahl der Simulationsparameter . . . . .	35
4.4 Abhängigkeit von geometrischen Parametern . . . . .	41
4.5 Abhängigkeit von physikalischen Parametern . . . . .	49
<b>5 Zusammenfassung, Schlussfolgerungen und Ausblick</b>	<b>55</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>59</b>
<b>Literatur</b>	<b>62</b>

## VERWENDETE SYMBOLE

Symbol	Beschreibung	Definition
$\mathbf{e}$	elektrisches Feld	
$V$	elektrisches Potential	3.1
$V_d$	Drain-Spannung	
$V_s$	Source-Spannung	
$V_G$	Gate-Spannung	
$V_{\text{bias}}$	Differenz zwischen Source- und Drain-Spannung	3.13
$\rho$	Ladungsdichte	
$\epsilon_r$	relative Permittivität	
$\epsilon_0$	Permittivität des Vakuums	konst.
$\mathbf{r}$	Position	
$I$	Stromstärke	3.3
$I_{\text{on}}$	maximale Stromstärke	
$q$	Ladung	
$h$	Plancksches Wirkungsquantum	konst.
$\hbar$	reduziertes Plancksches Wirkungsquantum	konst.
$\bar{T}$	Transmissionsfunktion	3.14
$\bar{T}_{1/B}$	Transmissionsfunktion zwischen ersten Kontakt und Büttiker Sonde	
$\bar{T}_{2/B}$	Transmissionsfunktion zwischen zweiten Kontakt und Büttiker Sonde	
$E$	Energie	3.11
$E_0$	Vakuumenergie	
$W_{A_h}$	Austrittsarbeit des Halbleiters	
$W_{A_m}$	Austrittsarbeit des Metalls	
$f$	Fermi-Dirac-Verteilung	3.3
$f_{1/2}$	abgewandelte Fermi-Dirac-Verteilung	3.4
$\mu$	chemisches Potential	
$E_f$	Fermie-Energie	
$k_B$	Boltzmann-Konstante	konst.
$T$	Temperatur	
$\hat{H}$	Hamiltonoperator	3.7
$H$	Hamiltonmatrix	3.10
$\Psi$	Wellenfunktion	
$U$	Potential	
$k$	Wellenvektor	
$a$	Gitterabstand	

$S$	Kontaktfläche des Nanodrahtes	
$\Gamma$	Erweiterungsmatrix	3.15
$A$	Spektralfunktion	
$G^-$	retardierte Greensche Funktion	3.17
$G^+$	avancierte Greensche Funktion	3.17
$\Sigma$	Selbstenergie	3.16
$\mathcal{E}$	Einheitsmatrix	
$N_s$	Anzahl der Gitterpunkte in der Sourceregion	
$N_d$	Anzahl der Gitterpunkte in der Drainregion	
$N_c$	Anzahl der Gitterpunkte in der Leiterregion	
$N_E$	Anzahl der Punkte des Energiegitters	
$E_{\max}$	obere Summationsgrenze der Energie	
$E_{\min}$	untere Summationsgrenze der Energie	
$\Phi_{\text{SBe}}$	Schottky-Barriere für Elektronen	
$\Phi_{\text{SBh}}$	Schottky-Barriere für Löcher	
$\Phi_L$	Grundpotential der linken Seite	
$\Phi_R$	Grundpotential der rechten Seite	
$m_{\text{eff e}}$	effektive Elektronenmasse	
$m_{\text{eff h}}$	effektive Löchermasse	
$L$	Länge der Leiterregion	
$L_K$	Länge der Kontakte	
$r$	Radius des Nanodrahtes	
$r_a$	Länge der Halbachse a bei elliptischen Nanodraht	
$r_b$	Länge der Halbachse b bei elliptischen Nanodraht	
$t_G$	Höhe des Gates	
$t_{\text{oxG}}$	Höhe der Gateoxidschicht	
$t_{\text{oxw}}$	Dicke der Oxidschicht auf dem Nanodraht	
$t_{\text{Air}}$	Höhe der Luftsäule über dem Transistor	
$w$	Breite des Transistors	

## VERWENDETE PARAMETER

Die aufgeführten Konstanten sind der CODATA Empfehlung 2006 [14] entnommen.

Symbol	Wert
$\varepsilon_0$	$8,854187 \cdot 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$
$h$	$6,626068 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
$\hbar$	$1,054571 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
$e$	$1,602176 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
$m_e$	$9,109382 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
$k_B$	$8,617332 \cdot 10^{-05} \text{ eVK}^{-1}$

Hier sind die verwendeten Ausgangswerte der Simulationsparameter aufgeführt.

Symbol	Wert	Symbol	Wert
$N_s$	15	$V_d$	0,5 V
$N_d$	15	$V_s$	0,0 V
$N_c$	200	$L$	1000 nm
$N_E$	201	$L_K$	100 nm
$E_{\max}$	1 eV	$r$	10 nm
$E_{\min}$	-1 eV	$t_G$	20 nm
$E_F$	0 eV	$t_{\text{oxG}}$	300 nm
$a$	0,1 nm	$t_{\text{oxw}}$	0 nm
$T$	300 K	$t_{\text{Air}}$	200 nm
$\Phi_{\text{SB e}}$	0,68 eV	$w$	500 nm
$\Phi_{\text{SB h}}$	0,44 eV		
$\Phi_L$	0,5 eV		
$\Phi_R$	1,0 eV		
$m_{\text{eff e}}$	$m_e$		
$m_{\text{eff h}}$	$m_e$		

## VERWENDETE ABKÜRZUNGEN

Abkürzung	Beschreibung
FEM	Finite-Elemente-Methode
SB	Schottky-Barriere
FET	Feldeffekt-Transistor
PVD	Physical Vapour Deposition
VLS	Vapour-Liquid-Solid
LB	Leiterband
VB	Valenzband
$e^-$	Elektron
$h^+$	Loch

# 1 MOTIVATION

Sensoren sind heutzutage allgegenwärtig. Vom Außenthermometer bis zum Lagesensor in Smartphones begegnen uns im Alltag Sensoren unterschiedlichster Art und Größe. Von herausragender Bedeutung sind sie natürlich im Zusammenhang von Automatisierung und Prozessüberwachung. Immer wichtiger werden Sensoren auch in der Medizin. Durch ihren Einsatz können zum Beispiel die Ermittlung von Blutwerten beschleunigt werden oder eine detailliertere Überwachung des Patientenzustandes erfolgen. In Zukunft sollen auch spezielle biologische Komponenten, wie Viren oder Tumormarker einfach nachgewiesen werden können. Bei dieser Entwicklung spielen nanodrahtbasierte Feldeffekt-Transistoren eine wichtige Rolle.

Bevor jedoch ein Biosensor auf dieser Basis entwickelt werden kann, ist ein detailliertes Verständnis der elektrischen Eigenschaften des Ausgangssystems nötig. Eine Variante dieses zu erreichen ist eine möglichst realistische Simulation des Systems, um experimentelle Ergebnisse einfacher in einen theoretischen Zusammenhang stellen zu können.

Durch eine systematische Untersuchung des von Nozaki et al. [15] vorgestellten Multiskalenmodells sollen Aussagen über die Anforderungen an die Genauigkeit der Eingangsparameter und damit der Grenzen der Anwendbarkeit dieses Modells getroffen werden. Auch das Auffinden optimaler Material- und Geräteparameter stellt ein Ziel dieser Untersuchung dar. Die Verknüpfung von experimentell gemessenen und berechneten Strom-Spannungs-Kennlinien kann möglicherweise zur Bestimmung von ansonsten nur schwer zugänglichen physikalischen Parametern dienen. Ob dies möglich ist, soll anhand der erzeugten Daten evaluiert werden.

## 2 GRUNDLAGEN

### 2.1 MODELLBILDUNG UND SIMULATION

Ziel der Simulation in der Werkstoffwissenschaft ist es, Eigenschaften realer Werkstoffe zu bestimmen, zu verstehen und vorherzusagen. In der Anfangsphase der Computernutzung waren nur einfache Modelle möglich, die häufig nur auf reine kristalline Werkstoffe anwendbar waren. Mittlerweile ist eine Vielzahl von Modellen erarbeitet worden, die in einem weiten Bereich der Werkstoffwissenschaft eine Unterstützung der Forschung mit Hilfe der Simulation ermöglichen.

Die Bildung von Modellen ist in der Wissenschaft auch unabhängig von der Computersimulation nötig, da es auch in einem klar umrissenen System nur schwer möglich ist, direkte Erkenntnisse zu gewinnen. Dies beruht darauf, dass die beobachteten Systeme und deren Wechselwirkungen nur unzureichend oder gar nicht direkt zu untersuchen sind. Aus diesem Grund wird ein Abstraktionsschritt nötig.

Die vereinfachte Imitation realer Zusammenhänge zum Erkenntnisgewinn kann als Ursprung der Modellierung gesehen werden. Dabei werden die Strukturen des realen Systems in gleicher, aber vereinfachter Weise in einem Modell reproduziert. So sind zum Beispiel Experimente als eine besondere Form der Modellbildung zu verstehen. In einem Experiment liegt die Herausforderung in der Übersetzung der Experimente in Modelle und wieder zurück. In der theoretischen Modellbildung liegt das Hauptaugenmerk zum großen Teil auf der Veränderung des Abstraktionsgrades. So sind stetige Bemühungen zu erkennen, einfache Modelle zu erweitern und dem abgebildeten System ähnlicher zu machen.

Mit der Entwicklung der Computertechnik ist die immer komplexere Modellierung von Systemen möglich geworden. Auch wenn das Ziel immer ein möglichst perfektes Modell ist, so muss hier natürlich angemerkt werden, dass jemand, der in der Lage wäre ein perfektes Modell eines System zu schaffen, dieses nicht benötigen würde, da er das Original in seiner Komplexität direkt verstehen könnte.

Besonders in der Werkstoffwissenschaft, in der viele Mechanismen in unterschiedlichen Größenordnungen und Zeitskalen eine entscheidende Rolle spielen,

müssen oft einzelne Modelle verknüpft werden, um anwendungsrelevante Aussagen zu erhalten. Auch in dieser Arbeit wird das Gesamtbild des Systems durch die Verknüpfung verschiedener Methoden in einem Multiskalenmodell erzeugt. [9, 18]

## 2.2 SCHOTTKY-DIODE

Die ideale Diode stellt ein elektrisches Bauelement dar, das nur in eine Richtung Strom passieren lässt. Dieses Verhalten basiert auf der starken Abhängigkeit des Widerstands von der Polarität der angelegten Spannung. Eine verbreitete Art stellt die Schottky-Diode dar. Hierbei wird ein Metall mit einem Halbleiter in Kontakt gebracht.

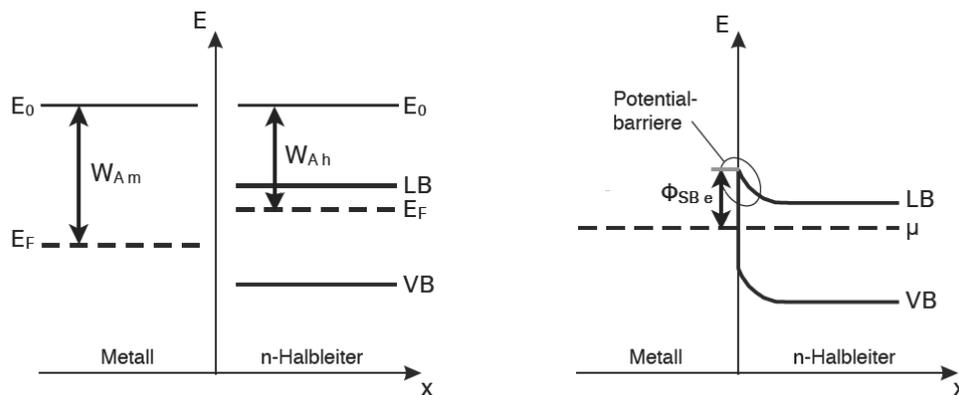


Abbildung 2.1: Bänderdiagramm eines Schottky-Kontakts mit einem n-Halbleiter vor (links) und nach dem Kontaktieren (rechts) (Symbole siehe Seite IV) [7]

In Abbildung 2.1 ist links das Bänderdiagramm eines Metalls und eines n-Halbleiters, der hier als Beispiel dienen soll, dargestellt. Dabei ist ersichtlich, dass sich die Fermi-Energien  $E_F$  von beiden unterscheiden. Die Fermi-Energie ist in diesem Fall definiert als die Differenz des Vakuum-Energielevels  $E_V$  und der Austrittsarbeit  $W_A$  ( $E_F = E_0 - W_A$ ). Wenn nun ein Kontakt hergestellt wird, muss sich die Fermi-Energie auf beiden Seiten auf einen gemeinsamen Wert angleichen. Die unterschiedliche Höhe der Austrittsarbeit sorgt dafür, dass sich Elektronen aus dem Halbleiter im Metall ansammeln. Dadurch verarmt der Halbleiter in der Nähe des Kontaktes an Elektronen und es bildet sich eine Raumladungszone. Mit der abnehmenden Elektronendichte hin zum Kontakt, entfernt sich auch das Leitungsband weiter von der Fermi-Energie. Es kommt zur Ausprägung einer Schottky-Barriere  $\Phi_{SB}$ .

Wird das Bänderdiagramm nun bei einer angelegten Spannung betrachtet, wie in Abbildung 2.2, lässt sich das Verhalten der Schottky-Diode erklären. Wenn in dem Halbleiter durch eine negative Spannung Elektronen eingebracht werden, wirken diese der Elektronenverarmung in der Raumladungszone entgegen. Es bleibt je nach Stärke der angelegten Spannung nur eine kleine Potential-Barriere übrig, die von Elektronen leicht überwunden werden kann. Somit können Elektronen vom Halbleiter in das Metall fließen.

Sobald die Polarität vertauscht wird, ist dieser Ladungstransport nicht mehr möglich. Die Raumladungszone in der Kontaktregion verstärkt sich, da dem Halbleiter zusätzlich Elektronen entzogen werden. Dies führt zur Ausbildung einer hohen Schottky-Barriere, die die Elektronen nicht mehr passieren können. Die Diode sperrt den Stromfluss. [7, 21]

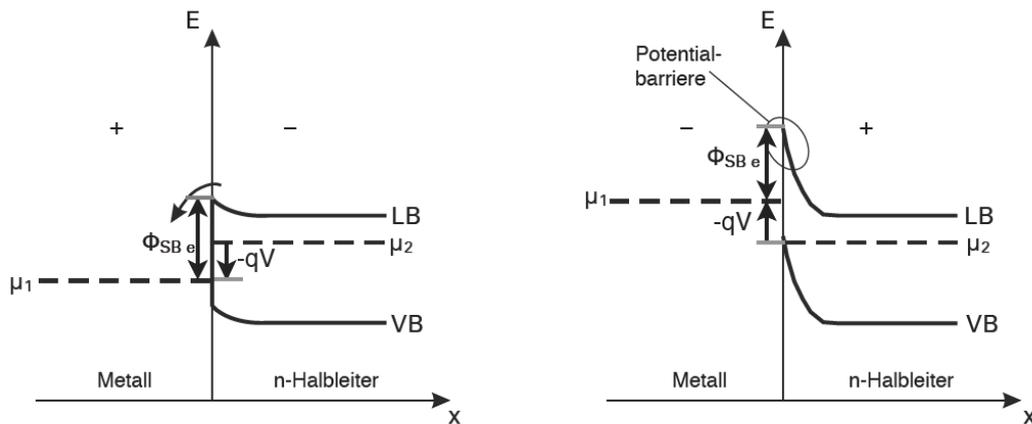


Abbildung 2.2: Bänderdiagramm eines Schottky-Kontakts in Durchlassrichtung (links) und in Sperrrichtung (rechts) geschaltet (Symbole siehe Seite IV) [7]

## 2.3 FELDEFFEKT-TRANSISTOR

Ein Transistor ist ein elektronisches Bauteil, das meistens zum Schalten oder Verstärken elektrischer Signale verwendet wird. Der Feldeffekt-Transistor (FET) verfügt über drei Anschlüsse:

- Source (Quelle)
- Gate (Tor)
- Drain (Senke)

Über eine am Gate angelegte Spannung kann in einem FET der Stromfluss zwischen dem Source- und dem Drain-Kontakt beeinflusst werden.

In dieser Arbeit wird ein Schottky-Barrieren-Feldeffekt-Transistor (SB-FET) untersucht. Dieser besteht aus zwei Metallkontakten, die durch einen Halbleiter verbunden sind. Durch eine Oxidschicht als Isolator vom Halbleiter getrennt, befindet sich die Gatelektrode. Zwischen den Metallkontakten und einem gedopten Halbleiter würde sich eine typische Schottky-Barriere wie bei einer Schottky-Diode ausbilden. Im betrachteten System ist der Halbleiter jedoch ungedoptes Silizium. Solange keine Gatespannung anliegt, werden weder das Leitungs- noch das Valenzband im Halbleiter verbogen. In diesem Zustand verhindert der Potentialunterschied zwischen den beiden Werkstoffen einen Stromfluss fast vollständig.

Wird nun eine Spannung an das Gate angelegt, durchdringt das elektrische Feld den Halbleiter. Dadurch wird das Potential in ihm verändert und die Bänder werden verbogen. Es bildet sich so eine Potential-Barriere für Elektronen oder Löcher aus. Bei einer positiven Gatespannung wird der Transport von Elektronen erleichtert und der von Löchern unterdrückt. Da bei einer negativen Gatespannung sich dieser Effekt umkehrt, fließt auch hier ein steigender Strom getragen durch die Löcher. Die Strom-Spannungs-Kennlinie besitzt somit eine V-Form mit einem Minimum in der Nähe von  $V_G = 0$  (Abbildung 4.8). Eine detailliertere Erklärung über die Grundlagen der Strom-Spannungs-Kennlinie erfolgt im Abschnitt 4.2. [2]

## 2.4 FELDEFFEKT-TRANSISTOR AUF DER BASIS VON SILIZIUM-NANODRÄHTEN

Das zu untersuchende System ist der von Weber et al. [23] vorgestellte nanodrahtbasierten SB-FET. Dieser stellt die Grundlagen von in Entwicklung befindlichen Sensoren dar. Um die Forschung an den Sensoren zu unterstützen, wird das System in dieser Arbeit durch Simulationen untersucht. In diesem Abschnitt sollen deren Herstellung und Eigenschaften beschrieben werden.

### Herstellung der Transistoren

Für die Herstellung der Silizium-Nanodrähte werden Gold-Nano-Cluster benötigt. Dafür wird ein Siliziumwafer mit einer sehr dünnen Goldschicht zwischen 0,3 und 2 nm mittels PVD (Physical Vapour Deposition) beschichtet. Beim Erhitzen der Schicht auf 450°C unter Wasserstoffatmosphäre bilden sich nach fünf Minuten kleine Gold-Cluster in einem schmalen Größenbereich von 10-30 Nanometern. Danach wird bei gleicher Temperatur Monosilan ( $\text{SiH}_4$ ) als Siliziumträger eingebracht. Als Prozessgase kommen im PVD Prozess noch Wasserstoff ( $\text{H}_2$ ), Argon (Ar) und Stickstoff ( $\text{N}_2$ ) zum Einsatz. Durch das Trägergas diffundiert Silizium in die Goldpartikel. Aufgrund der hohen Temperatur bildet sich ein Flüssigkeitstropfen mit der Zusammensetzung des Eutektikums von Gold und Silizium. Durch das weitere Eindiffundieren von Silizium in die flüssige Phase entsteht dort eine Übersättigung. Als Konsequenz bildet sich eine feste Siliziumphase. Der Übergang zwischen dem Flüssigkeitstropfen und dem ausgeschiedenen Silizium ist der Wachstumsbereich. Da die drei Aggregatzustände gasförmig, flüssig und fest an der Reaktion beteiligt sind, wird der Wachstumsprozess als CVD-VLS (Vapour-Liquid-Solid) bezeichnet. Während des Wachstums wird der Goldpartikel durch den wachsenden Nanodraht von der Oberfläche gelöst und in die Höhe gehoben. [13, 23]

Als Basis für den Transistor dient ein stark n-gedoppter Siliziumwafer. Diese Schicht bildet das Backgate. Darüber wird eine 300 nm dicke Schicht aus Siliziumoxid  $\text{SiO}_x$  aufgebracht, die als Gatedielektrikum dient. Auf der Oxidschicht werden die metallischen Kontakte mit Hilfe von Elektronenstrahlabscheidung erzeugt. Ihre Form erhalten diese per Fotolithografie. Die Metallkontakte bestehen aus einer Schicht Titan und einer Schicht Kobalt. Im nächsten Schritt werden die erzeugten Silizium-Nanodrähte aus einer Isopropanol-Lösung auf der Oberfläche abgeschieden. Nachdem die Oxidschicht der Nanodrähte durch eine Ätzung entfernt wurde, kann auf den Kobaltoberflächen eine circa 100 nm dicke Nickelschicht

abgeschieden werden.

In einem letzten Schritt wird der Transistorrohling wieder auf 470°C erhitzt. Durch die erhöhte Temperatur kann nun das Nickel, welches die Nanodrähte umschließt, in diese eindiffundieren. Dies führt zur Bildung von Nickelsilizid im Nanodraht. Mit steigender Haltezeit wandert die Grenzschicht zwischen Nickel und Nickelsilizid entlang des Nanodrahtes. Somit kann durch die Haltezeit bestimmt werden, wie groß der halbleitende Bereich ist. Bemerkenswert ist der scharfe Übergang zum Silizium, wie er in Abbildung 2.3 a) zu sehen ist. Ebenfalls ist auf die einkristalline Ausbildung des Nickelsilizid (Abbildung 2.3 b) hinzuweisen. Abbildung 2.4 zeigt den fertigen Transistor. [24, 25]

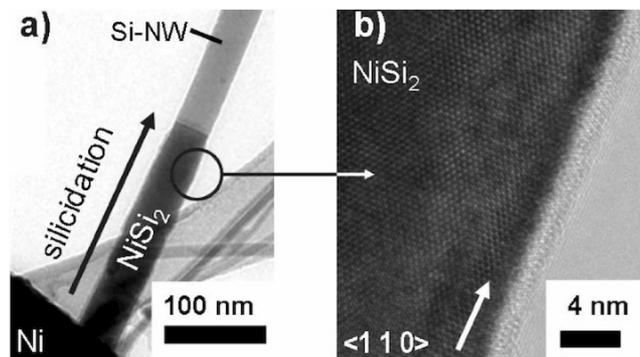


Abbildung 2.3: Silizium-Nanodraht mit axial ausgeprägten Nickelsilizid Kontakten [25]

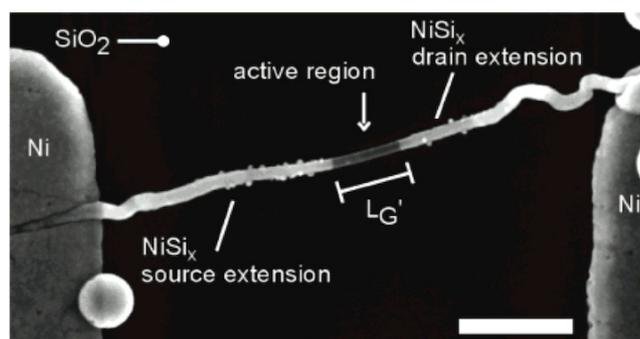


Abbildung 2.4: Schottky-Barrieren-Feldeffekt-Transistor basierend auf einem Siliziumnanodraht mit axial eingewachsenen Nickelsilizid-Kontakten. An den Bildrändern sind die Nickelreservoirs zu erkennen. [24]

## Eigenschaften

Für die Anwendung in der Sensorik zeigt der vorgestellte Transistor gute Eigenschaften wie:

- ein großer Unterschied zwischen maximalen und minimalen Stromfluss im Bereich von  $10^7$  (on/off ratio)
- hohe maximale Stöme
- ballistischer Transport bei einer Leiterregion mit einer Länge unter  $1 \mu\text{m}$
- ein Wechsel von unipolarem zu ambipolarem Verhalten durch eine passivierende Wärmebehandlung

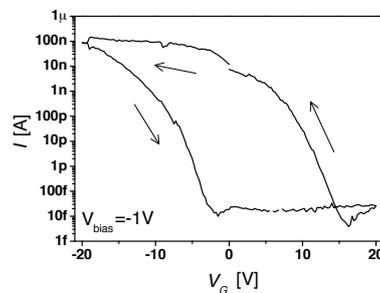


Abbildung 2.5: Strom-Spannungs-Kennlinie eines siliziumnanodrahtbasierten unpassivierten SB-FETs ( $r = 10 \text{ nm}$ ,  $L = 2,5 \mu\text{m}$ ) [23]

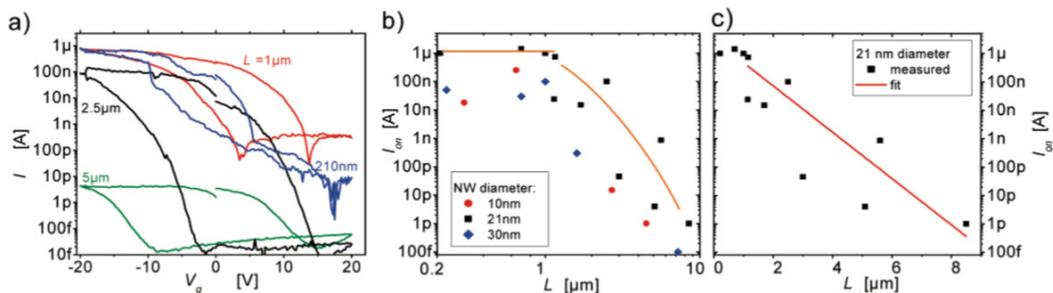


Abbildung 2.6: Leiterlängenabhängiges Verhalten von siliziumnanodrahtbasierten SB-FETs. a) Vergleich von Strom-Spannungs-Kennlinien von unpassivierten Transistoren bei unterschiedlicher Länge der Leiterregion (Radius  $r = 10,5 \pm 0,5 \text{ nm}$ ) b) Abhängigkeit der maximalen Stromstärke  $I_{\text{on}}$  von der Länge der Leiterregion bei unterschiedlichen Nanodrahtradien. Die orangenen Linien stellen Orientierungshilfen dar. c) Semilogarithmischer Plot zur Darstellung der exponentiellen Abhängigkeit von  $I_{\text{on}}$  bei  $L > 1 \mu\text{m}$  bei  $r = 10,5 \pm 0,5 \text{ nm}$ . [24]

In Abbildung 2.5 zeigt sich der große Unterschied zwischen dem maximalen und minimalen Stromfluss sehr deutlich. Auch der hohe maximale Strom von  $100 \text{ nA}$  ist hier ersichtlich. Die starke Hysterese und das Verhalten wie ein p-Transistor

sind auf die fehlende Passivierung zurückzuführen. In der noch porösen Oberflächenschicht des Nanodrahtes können sich noch leicht Ladungen akkumulieren.

Das es in den Transistoren bei Längen der Leiterregion  $L$  unter 1000 nm zum Phänomen des ballistischen Transportes kommt, zeigt Abbildung 2.6. Im Teilbild a) wird gezeigt, dass sich die Strom-Spannungskurvens-Kennlinien bei kleinem  $L$  und im Bereich großer negativer Gatespannungen gleich verhalten. Die Abhängigkeit der maximalen Stromstärke  $I_{on}$  von Längen der Leiterregion ist im Teilbild b) dargestellt. Im Bereich bis 1000 nm ändert sich  $I_{on}$  für die unterschiedlich großen Nanodrähte kaum. Bei  $L > 1000$  nm ist ein exponentieller Abfall zu erkennen. Dieser wird im Teilbild c) mit Hilfe der roten Linie verdeutlicht.

## 3 METHODEN

In diesem Kapitel soll ein Überblick über die Modellierung des zu untersuchenden Systems gegeben werden. Dazu werden die Problemstellungen allgemein eingeführt und anschließend die verwendeten theoretischen Grundlagen kurz vorgestellt. Eine vollständige Darstellung des verwendeten Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Deshalb werden von diesem hier nur die für diese Arbeit relevanten Elemente vorgestellt.

### 3.1 SIMULATIONSMODELL

Zur Beschreibung des Ladungstransports durch einen Schottky-Barrieren-Feldeffekt-Transistor ist ein Multiskalenansatz nach Nozaki et al. [15] gewählt worden. Dieser erlaubt die Simulation mit realen Geometrien in der Größenordnung von einigen Mikrometern. Auch kann der Feldeffekt vollständig dargestellt werden. Um den Ladungstransport möglichst genau beschreiben zu können, werden die Prozesse in den Kontakten mit Hilfe eines quantenmechanischen Transportmodells beschrieben.

Die Simulation wird in 6 Schritten durchgeführt:

- Modellieren der Transistorgeometrie
- Berechnen des elektrischen Potentials durch Lösen der Poisson-Gleichung in 3-D mittels FEM
- Extrahieren eines 1-D-Potentials entlang der Mittelachse des Nanodrahtes
- Konstruieren der Potential-Barriere für das quantenmechanische Tunnelproblem
- Beschreiben der Wahrscheinlichkeit, dass ein Ladungsträger mit einer bestimmten Energie tunnelt durch die Transmissionsfunktion
- Ermitteln des Stromflusses durch den Landauer-Büttiker-Formalismus

Als Ausgangspunkt dient ein reales dreidimensionales Modell des Transistors. Dadurch ist es möglich, zum Beispiel lokale Veränderungen auf der Oberfläche

des Nanodrahtes bei der Berechnung des elektrischen Potentials zu berücksichtigen. Dies ist besonders wichtig, da ein Einsatz als Sensor angestrebt wird. Insgesamt ist das Modell dadurch sehr flexibel in seiner Anwendung. Für die Berechnung des Stromflusses wird jedoch nur ein eindimensionales Profil des elektrischen Feldes verwendet. Dieses wird entlang der Mittellinie des Nanodrahtes extrahiert.

Im Bereich des quantenmechanischen Transportmodells wird ermittelt, in welchem Maße die Ladungsträger durch die Schottky-Barriere am Übergang zwischen Metall und Halbleiter tunneln. In Abbildung 3.1 wird gezeigt, welchen Einfluss unterschiedliche Gatespannungen auf die Form der Potential-Barriere haben. Der genaue Aufbau der gezeigten Barrieren wird im Abschnitt 4.1 (Seite 26) behandelt.

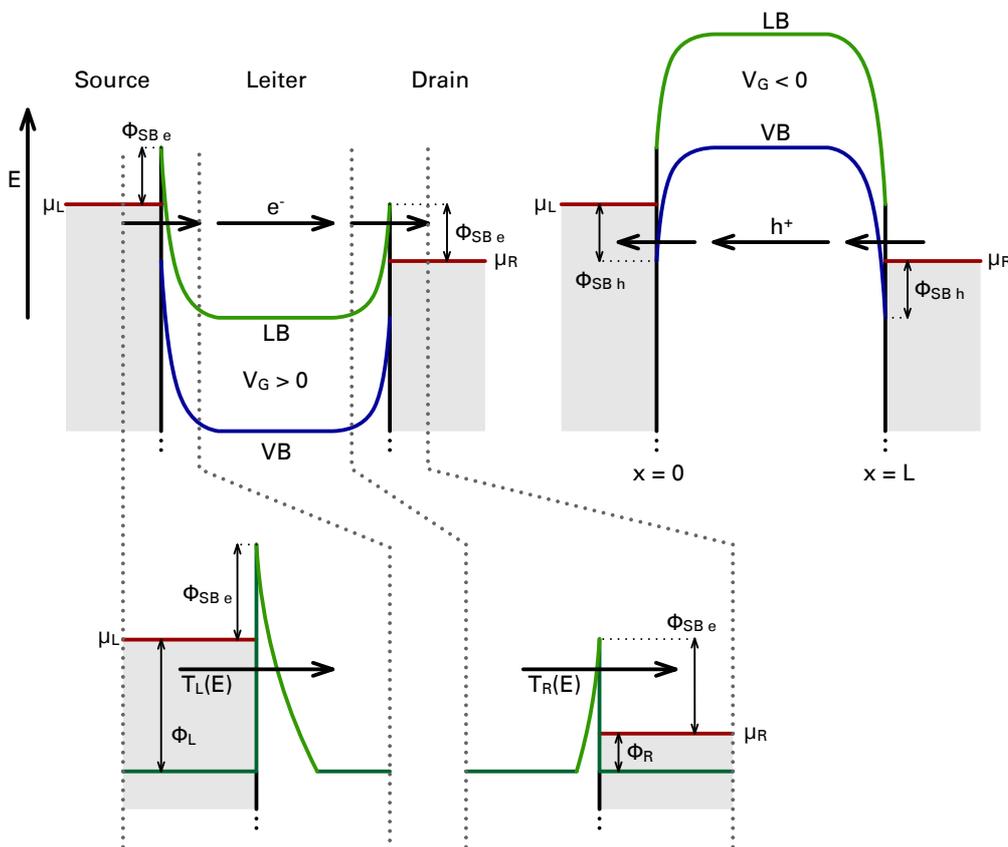


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Potential-Barriere und Transportwege der Elektronen  $e^-$  und Löcher  $h^+$  bei unterschiedlichen Gatespannungen  $V_G$  mit genauer Betrachtung der Potential-Barriere bei positiver Gatespannung (Symbole siehe Seite IV)

Im oberen Teil der Abbildung wird auf der linken Seite die Verformung der Bänder bei einer positiven Gatespannung gezeigt. Wenn die angelegte Spannung

hoch genug ist, können die Elektronen  $e^-$  mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit tunneln. Die Form der Potential-Barriere für die Elektronen hängt von der Gatespannung  $V_G$ , der Höhe der Schottky-Barriere  $\Phi_{SB_e}$  und der Höhe der chemischen Potentiale  $\mu$  ab.

Wenn nun eine negative Gatespannung anliegt, werden die Bänder ebenfalls verbogen, aber in diesem Fall zu höheren Energien (Abbildung 3.1 rechts). Somit ergibt sich für die Löcher  $h^+$  die Möglichkeit die Potential-Barriere zu durchdringen. Die Form die Barriere wird bei den Löchern nicht wie bei den Elektronen durch das Leitungsband (LB) sondern durch das Valenzband (VB) bestimmt. Außerdem ist die Höhe der Schottky-Barriere verschieden. Der Transport der Löcher erfolgt in die umgekehrte Richtung des Elektronentransportes. Durch das entgegengesetzte Vorzeichen der Ladung fließt der Strom technisch gesehen jedoch immer in die gleiche Richtung.

Im unteren Teil der Abbildung wird ein wichtiges Konzept der Simulation dargestellt. Für die Betrachtung des Ladungstransportes auf quantenmechanischer Ebene stellt die Länge der Leiterregion  $L$  ein großes Hindernis dar. Um die Berechnungen in einer sinnvollen Zeitspanne bewältigen zu können, wird der Transistor in drei Teile zerlegt. Alle Teile werden nun zuerst separat betrachtet und zum Schluss wieder zusammengeführt. Die Bereiche um die Kontakte sind hier vergrößert dargestellt. Mit Hilfe der Grundpotentiale  $\Phi_{L/R}$  werden in beiden Kontaktbereichen die unteren Grenzen der Barriere festgelegt. In diesen beiden Systemen kann nun das Tunneln der Ladungsträger mit der sogenannten Transmissionsfunktion  $\bar{T}(E)$  quantifiziert werden. Diese beschreibt die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Teilchen einer bestimmten Energie eine Barriere durchdringen kann. Wenn man die Grenze zwischen den beiden Ladungsträgerreservoirs als halbdurchlässige Membran interpretiert, repräsentiert die Transmission ihre Durchlässigkeit. Sie kann mit Hilfe der Fisher-Lee-Relation und der Greenschen Funktion ermittelt werden.

Im Bereich der Leiterregion wird hingegen von einem ballistischen Transport ausgegangen. [24] Aus diesem Grund wird die Transmission in diesem Bereich als  $\bar{T} = 1$  festgelegt, da keine Behinderung der Ladungsträger erwartet wird.

Der Stromfluss wird durch den Landauer-Büttiker-Formalismus berechnet. Dabei wird die Besetzung der Bänder bei einer bestimmten Temperatur mit Hilfe der Fermi-Dirac-Verteilung mit der Transmissionsfunktion verknüpft.

Eine Kopie des für die Simulation erstellten Programms befindet sich auf der beigelegten CD.

## 3.2 FINITE-ELEMENTE-METHODE

Die Finite-Elemente-Methode (FEM) ist ein Verfahren, um partielle Differentialgleichungen näherungsweise lösen zu können. Das Grundprinzip stellt die Aufteilung des zu betrachteten Bereiches in kleine Teilbereiche dar. Diese „finiten Elemente“ sind namensgebend für diese Methode. An diesen Elementen werden Knotenpunkte gewählt, die in der Regel auf den Ecken oder Kanten der Elemente liegen, um die Stetigkeit zwischen den Elementen zu gewährleisten. In den einzelnen Elementen beschreibt ein Näherungsansatz die gesuchte Feldfunktion.

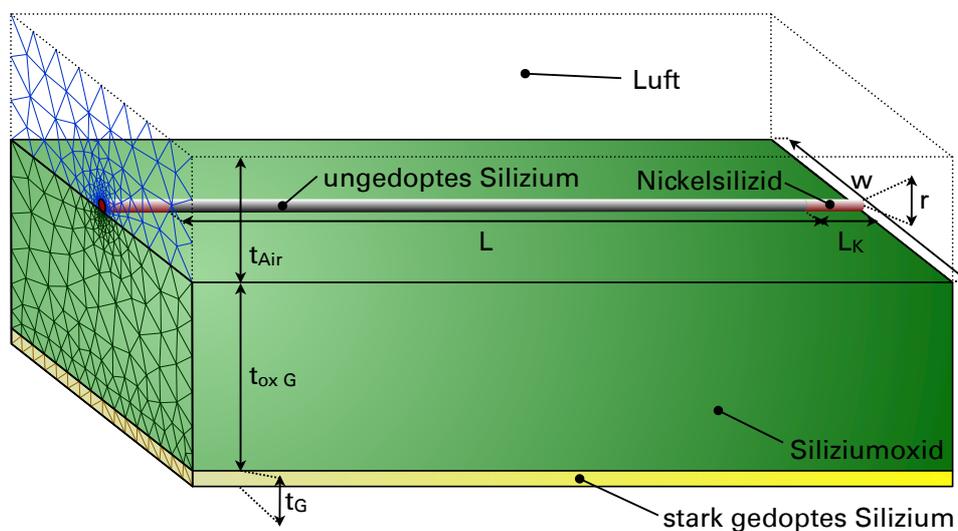


Abbildung 3.2: 3-D-Modell eines SB-FETs mit unten liegender Gate-Elektrode. Links sind die Seitenflächen der generierte Tetraeder gezeigt, in die das Modell für die FEM-Berechnung zerlegt wird (Symbole siehe Seite IV)

FEM wird in diesem Fall verwendet, um das elektrische Potential  $V$  zu berechnen. Dadurch können unterschiedliche elektrische Spannungen, Formen und Materialeigenschaften berücksichtigt werden. Es muss die Poisson-Gleichung der Elektrostatik (3.1) gelöst werden.

$$\Delta V(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\varepsilon_0 \varepsilon_r(\mathbf{r})} \quad (3.1)$$

Dabei wird das elektrische Potential in Zusammenhang mit der Ladungsdichte  $\rho$  und der Permittivität  $\varepsilon_0 \varepsilon_r$  gesetzt. Über die Gleichung  $\mathfrak{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$  ist das elektrische Potential dabei mit dem elektrischen Feld  $\mathfrak{E}$  verknüpft. In der Abbildung 3.2 wird eine systematische Darstellung des Modells für die FEM-Berechnungen gezeigt.

Durch diese Methode können die geometrischen und elektrostatischen Parameter des Modells sehr flexibel geändert werden. Zur Berechnung des elektrostatischen Problems wird das Programm Comsol in der Version 4.2a verwendet.

### 3.3 LANDAUER-BÜTTIKER-FORMALISMUS

Der Landauer-Büttiker-Formalismus [3, 12] stellt einen häufig genutzten Ausgangspunkt für das Verständnis des Ladungstransports in mesoskopischen Systemen dar.

$$I = \frac{q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (3.2)$$

Der Ausdruck  $f$  stellt die Fermi-Dirac-Verteilung dar. Diese beschreibt die Besetzungswahrscheinlichkeit des Leitungsbandes bei unterschiedlichen Energien. Ebenfalls ist die Verteilung abhängig von dem chemischen Potentialen  $\mu$  der Kontakte.

$$f(E - \mu) \equiv \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right)} \quad (3.3)$$

Diese stellen die Energien dar, bei der am absoluten Nullpunkt die Grenze zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen verläuft. Wenn sich das betrachtete System ebenfalls im isolierten Gleichgewicht befindet, entspricht das chemische Potential  $\mu$  der Fermi-Energie  $E_f$ . In der Simulation gilt für die Fermi-Energie  $E_f = 0$  eV. Das Verhältnis der beiden chemischen Potentiale ist durch die an den Transistor angelegte Spannung definiert  $qV_{\text{bias}} = \mu_1 - \mu_2$ . Da die Berechnung des Stroms nur in einer Dimension erfolgt, muss die Fermi-Dirac-Verteilung umgeformt werden. In ihr werden nun die transversalen Moden in der y-z-Ebene über alle k-Punkte aufsummiert. In diesen abgewandelten Fermi-Dirac-Verteilungen  $f_{1/2}$  gehen das chemische Potential  $\mu$  der Kontakte, die Temperatur  $T$ , die Kontaktfläche  $S$  und die effektive Masse der Ladungsträger ein. [4]

$$f_{1/2}(E) = \sum_{k_x, k_y} f_0(E - \mu_{1/2} + \epsilon_{k_x, k_y}) \quad (3.4)$$

$$\epsilon_{k_x, k_y} = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} (k_x^2 + k_y^2) \quad (3.5)$$

$$f_{1/2}(E) = \frac{S \cdot m_{\text{eff}} \cdot k_B T}{\pi \hbar^2 \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{\mu_{1/2} - E}{k_B T} \right) \right]} \quad (3.6)$$

Der Landauer-Büttiker-Formalismus ermöglicht es, einen Zusammenhang zwischen dem fließenden Strom und den chemischen Potentialen, und damit der Spannung zwischen den metallischen Kontakten herzustellen. Es wird also die Berechnung von Strom-Spannungs-Kennlinien ermöglicht. Wie bereits erwähnt, ist der Stromfluss natürlich stark von der Gatespannung abhängig. Deren Einfluss ist durch die Transmission  $\bar{T}$  in der Gleichung repräsentiert, deren Berechnung noch ausführlich betrachtet wird.

### 3.4 HAMILTONOPERATOR

Das Transportsystem kann durch eine Hamiltonoperator beschrieben werden. In Gleichung 3.7 wird der Hamiltonoperator definiert.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (3.7)$$

Um die zur Ermittlung des Stromflusses nötige Transmission  $\bar{T}$  zu berechnen, ist eine numerische Beschreibung des Systems nötig. Dafür wird der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  mit Hilfe der Finiten-Differenzen-Methode in eine Matrixdarstellung umgeformt. Als ersten Schritt muss dazu das zu untersuchende Gebiet mit Hilfe von Gitterpunkten diskretisiert werden. Diese Punkte werden äquidistant mit dem Abstand  $a$  verteilt. Nun kann der Hamiltonoperator durch den zentralen Differenzenquotient der zweiten Ableitung approximiert werden. Es ergibt sich die Matrixdarstellung des Operators, welche in Gleichung 3.10 dargestellt ist.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\Big|_{x=x_n} - t_0[\Psi(x_{n-1}) - 2\Psi(x_n) + \Psi(x_{n+1})] \quad (3.8)$$

$$t_0 = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}a^2} \quad (3.9)$$

$$H_{n,m} = -t_0\delta_{n,m-1} + (U_n + 2t_0)\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} \quad (3.10)$$

In Bereichen mit konstantem Potential  $U$  kann eine Lösung der Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  durch die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators in Gleichung 3.10 gefunden werden. Die Eigenwerte folgen einer Kosinus-Funktion.

$$E(ka) = U + 2t_0(1 - \cos(ka)) \quad (3.11)$$

Das in den vorangegangenen Gleichungen verwendete Potential ist dabei in Gleichung 3.12 definiert. Dieses beschreibt die Schottky-Barriere und wird in Abschnitt 4.1 (Seite 26) detailliert betrachtet. Die Position  $x = 0$  stellt hier den linken Übergang zwischen Metall und Halbleiter dar.

$$U(x) = \begin{cases} \mu_1 - \phi_1 & \text{für } x < 0 \\ \mu_1 + \Phi_{\text{SB}} + U & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \mu_1 + eV_{\text{bias}} - \phi_2 & \text{für } L < x \end{cases} \quad (3.12)$$

$$V_{\text{bias}} = V_s - V_d \quad (3.13)$$

### 3.5 TRANSMISSIONSFUNKTION

Die Transmissionsfunktion stellt in den Betrachtungen des Ladungstransportes einen wichtigen Bestandteil dar. Zur Beschreibung werden zwei wichtige Beziehungen genutzt. Dies ist die Fisher-Lee-Relation [6] und die Greensche Funktion [4, 5].

Die Fisher-Lee-Relation ermöglicht es, die Transmissionsfunktion  $\bar{T}(E)$  in Abhängigkeit von der Erweiterungsmatrix  $\Gamma$  und der Greenschen Funktion auszudrücken. In der Gleichung 3.14 ist  $G^-$  die sogenannte retardierte und  $G^+$  die avancierte Greensche Funktion.

$$\bar{T}(E) \equiv \text{Trace}[\Gamma_1 G^- \Gamma_2 G^+] = \text{Trace}[\Gamma_2 G^- \Gamma_1 G^+] \quad (3.14)$$

Dabei ist die Erweiterungsmatrix  $\Gamma$  über die Selbstenergie  $\Sigma$  definiert. Diese diagonale Matrix ist nur an den Positionen der Kontakte besetzt. Als Zusammenhang zwischen der Energie und  $ka$  wird Gleichung 3.11 verwendet, da das Potential  $U$  an den Kontakten konstant ist.

$$\Gamma_{1/2} = i \left[ \Sigma_{1/2}(E) - \Sigma_{1/2}^\dagger(E) \right] \quad (3.15)$$

$$\Sigma_{1/2}(E) = -t_0 \exp(ika) \quad (3.16)$$

Nun werden die Greenschen Funktionen  $G^\mp$  benötigt. In der Gleichung 3.17 ist  $E$  die Energie,  $\eta i$  eine sehr kleine imaginäre Zahl,  $\mathcal{E}$  die Einheitsmatrix,  $H$  die Hamiltonmatrix und  $\Sigma$  steht für die Selbstenergie.

$$G^\mp(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{(E \pm i\eta)\mathcal{E} - H - \Sigma_1 - \Sigma_2} \quad (3.17)$$

Um die Gesamttransmission durch einen Übergang zu ermitteln, werden die Transmission  $T_{1,2}$  an den beiden Übergängen zwischen Metall und Halbleiter mit folgender Formel zusammengefasst.

$$\bar{T}(E) = \frac{\bar{T}_1 \bar{T}_2}{\bar{T}_1 + \bar{T}_2 - \bar{T}_1 \bar{T}_2} \quad (3.18)$$

### 3.6 BÜTTIKER SONDE

Da das Transmissionsprofil sehr ungleichmäßig sein kann, kommt eine Büttiker Sonde [22] zum Einsatz. Diese Sonde ist ein fiktiver dritter Anschluss in der Mitte des Nanodrahtes. Dieser Anschluss simuliert das Streuen der Wellen innerhalb des Drahtes. Durch die Sonde wird die Transmissionsfunktion gleichmäßiger. Dies ist wichtig, um trotz eines beschränkten Energiegitters nur einen kleinen Fehler beim Auswerten der Transmission zu erzeugen.

Durch den dritten Anschluss ändert sich zum einem die Zusammenfassung der Einzeltransmissionen zur Gleichung 3.19 und zum anderen die Greenschen Funktionen. Diese wird um die Selbstenergie der Büttiker Sonde  $\Sigma_B$  ergänzt (Gleichung 3.20).

$$\bar{T}_B = \bar{T} + \frac{\bar{T}_{1/B} \cdot \bar{T}_{2/B}}{\bar{T} + \bar{T}_{2/B}} \quad (3.19)$$

$$G^\mp(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{(E \pm i\eta)\mathcal{E} - H - \Sigma_1 - \Sigma_2 - \Sigma_B} \quad (3.20)$$

$$\Sigma_B = 0,00025i \text{ eV} \quad (3.21)$$

## 4 ERGEBNISSE UND DISKUSSION

In diesem Abschnitt soll zunächst die Arbeitsweise des Simulationsprogrammes näher beschrieben werden. Als nächstes wird gezeigt, dass die zur Untersuchung verwendeten Parameter des Modells keinen schädlichen Einfluss auf die Ergebnisse haben. Nach diesem Schritt werden geometrische Größen untersucht, deren Einflüsse hauptsächlich durch die FEM modelliert werden. Danach werden weitere physikalische Größen untersucht, die keinen Einfluss auf das elektrische Feld haben.

### 4.1 IMPLEMENTIERUNG DES SIMULATIONSPROGRAMMES

Ein wichtiges Ziel der Implementierung ist die Skalierbarkeit und Flexibilität der Anwendung. Diese soll sowohl auf Hochleistungsrechnersystemen als auch auf den einzelnen Arbeitsplatz-Rechnern lauffähig sein. Um dieses Ziel zu erreichen, wird als Programmiersprache Python ausgewählt. Als Erweiterung für wissenschaftliches Rechnen kommt SciPy zum Einsatz. Diese Wahl erlaubte es, eine portable Anwendung zu erstellen, die auf unterschiedlichen Betriebssystemen ausführbar ist. Zugleich ermöglicht die offene Lizenz dieser Werkzeuge die Nutzung beliebiger Computer.

Die Umsetzung erfolgt als Server-Client-System. Die Abbildung 4.1 zeigt vereinfacht den Programmablauf. Der zentrale Steuerungsserver (A) stellt die Nutzeroberfläche zur Verfügung. Hier wird festgelegt, welcher Simulationsparameter in welchen Schritten geändert, welches Potential genutzt wird und welche Werte gemeinsame Parameter haben. Sobald nun ein Rechenknoten (B) auf dem selben oder einem entfernten Rechner gestartet wird, nimmt dieser über eine TCP-Verbindung Kontakt mit dem Steuerungsserver auf und meldet seinen Status (2) als bereit. Daraufhin erhält er einen Wert für den zu untersuchenden Simulationsparameter und den Basisdatensatz (1).

Jeder der beliebig vielen Rechenknoten initialisiert (3) zuerst seinen Parameter und Konstantensatz (C)/(D). Dies ist wichtig, damit alle später parallel laufenden Instanzen des Unterprogrammes (E) immer auf die gleichen Daten zugreifen. Außerdem wird innerhalb der für die Initialisierung zuständigen Programmteile

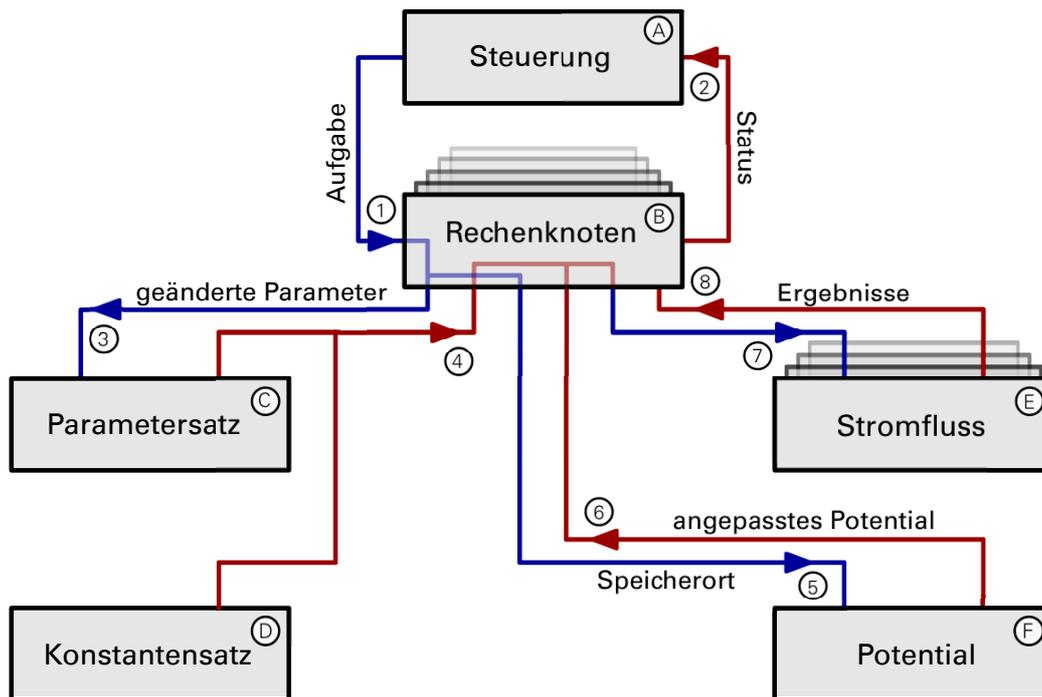


Abbildung 4.1: Schema des Programmablaufs

dafür gesorgt, dass Abhängigkeiten unter den Parametern aufgelöst werden.

Die durch die FEM-Analyse berechneten Punkte des eindimensionalen elektrischen Potentials sind nicht gleichmäßig über die Länge des Leiters verteilt. Dies ist ein Resultat aus der Aufteilung der Modelle in Teilvolumina. Für die Berechnungen ist aber ein regelmäßiges Ortsgitter mit dem Rasterabstand  $a$  nötig. Um dies zu erreichen, wird in einem Unterprogramm (F) das unbearbeitete Potential eingelesen (5) und ein Spline des 3. Grades an alle Datenpunkte angepasst. Mit Hilfe dieses Splines werden die Werte des elektrischen Potentials an den Punkten des Rasters interpoliert (6).

Damit sind alle Vorbereitungen getroffen, um die eigentlichen Berechnungen (E) beginnen zu können. Für jede Gatespannung müssen vier rechenintensive Aufgaben durchgeführt werden. Dies sind jeweils die Transmissionen  $\bar{T}$  von Elektronen und Löchern zwischen Source- und Leiterregion als auch zwischen Leiter- und Drainregion. Um die Leistungsfähigkeit moderner Rechner auszulasten, werden diese vier Aufgaben parallel bearbeitet.

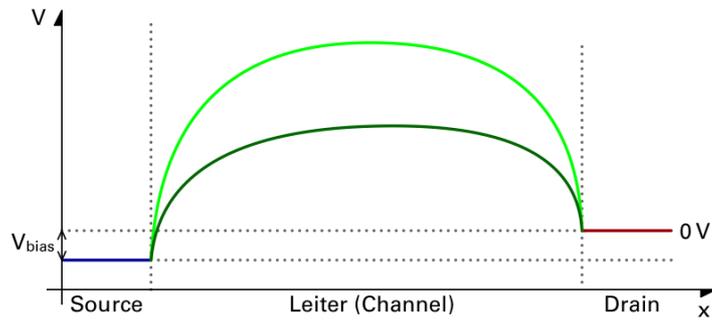


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung zweier elektrischer Potentiale bei unterschiedlichen Gatespannungen

Im Unterprogramm  $\textcircled{E}$  werden nun zunächst einige Variablen initialisiert. So wird das elektrische Potential verarbeitet. Abbildung 4.2 zeigt schematisch das elektrische Ausgangspotential für eine kleine und eine große positive Gatespannung  $V_G$ . Um die Berechnung effektiv zu gestalten, werden die beiden Übergänge jeweils einzeln betrachtet. In der Abbildung 4.3 wird gezeigt, wie sich die Ausgangsbarriere zusammensetzt. Beim linken Übergang (Abbildung 4.3 a) beginnt das Potential bei  $E_F - \Phi_L$ . Am Übergang zur Leiterregion springt es auf  $E_F + \Phi_{SB}$  und bleibt auf diesem Niveau. Die Abschnitte  $N_s \cdot a$  und  $N_c \cdot a$  stehen hier jeweils für einen kleinen Ausschnitt aus der tatsächlichen Source- und Leiterregion. Durch die Aufteilung in zwei getrennte Berechnungen stellt  $N_d \cdot a$  nur einen virtuellen Behelfsanschluss dar.

Bei dem Übergang zwischen Leiter- und Drain-Region (Abbildung 4.3 b) ist  $N_s \cdot a$  dieser virtuelle Anschluss. Hier beginnt das Potential mit  $E_F + \Phi_{SB}$  und fällt am rechten Übergang um  $\Phi_{SB} - V_{bias} + \Phi_L$  ab. Diese Ausgangsbarriere unterscheidet sich zwischen Elektronen und Löchern nur durch die unterschiedliche Höhe der Schottky-Barriere  $\Phi_{SB_e}$  und  $\Phi_{SB_h}$ .

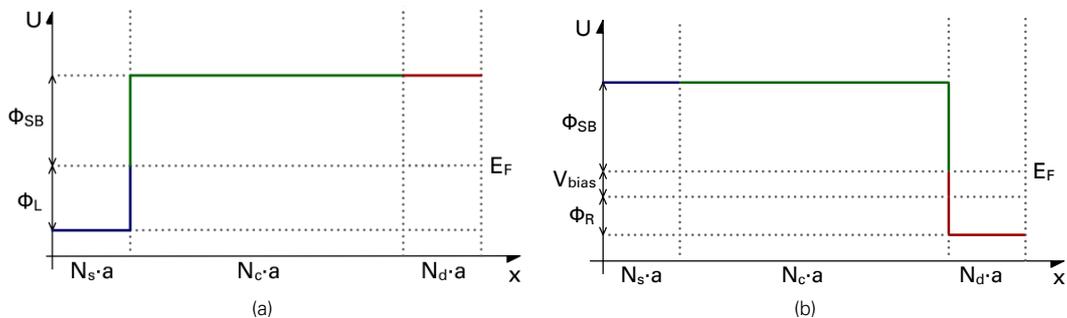


Abbildung 4.3: Ausgangsbarriere für den linken (a) und rechten (b) Kontakt

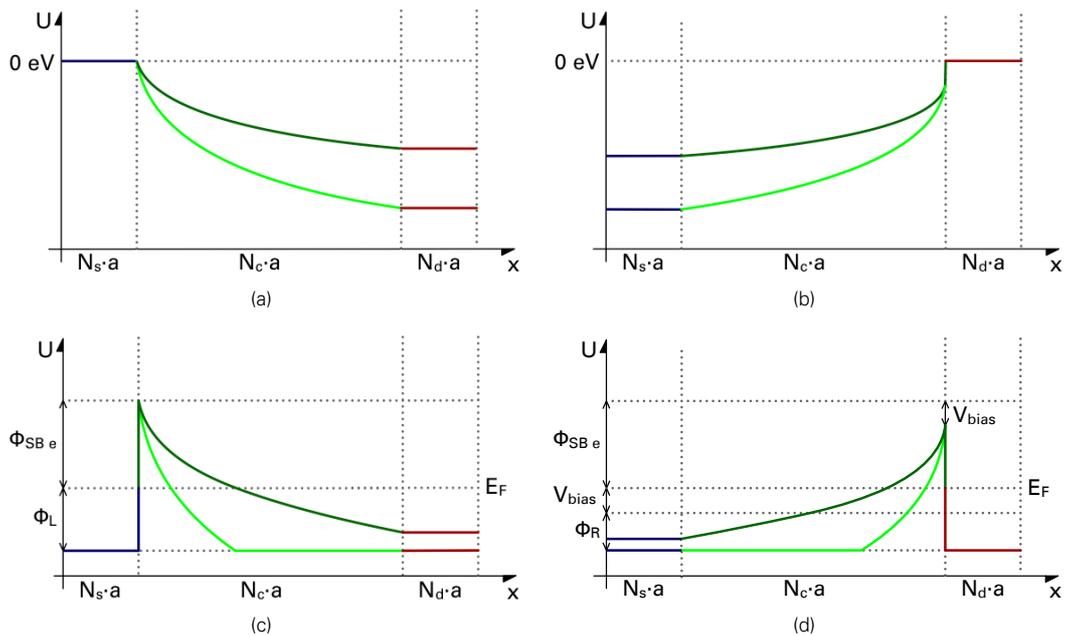


Abbildung 4.4: Ausgangsbarriere kombiniert mit dem Potential (a)/(b) zur Potential-Barriere der Elektronen für den linken (c) und rechten (d) Kontakt

Die Abbildung 4.4 zeigt die weiteren nötigen Schritte, um eine fertige Barriere für die Elektronen zu erzeugen. Zuerst wird die Beziehung  $U = -eV$  angewandt und das erzeugte Potential bei  $0 \text{ eV}$  am linken Übergang fixiert. Im Bereich des virtuellen Anschlusses wird der letzte Wert konstant gehalten (a/b). In den Teilbildern (c) und (d) wird die Ausgangsbarriere hinzuaddiert. Alle Werte, die dabei unter  $E_F - \Phi_L$  beim linken Kontakt, beziehungsweise  $E_F + V_{bias} - \Phi_R$  beim rechten Kontakt liegen, werden abgeschnitten.

Um auch die Transmission der Löcher mit dem gleichen Programmcode berechnen zu können, wird das Potential für diese abgewandelt. Um der veränderten Fermi-Dirac-Verteilung für die Löcher  $f_L = 1 - f_E$  gerecht zu werden, wird der Verlauf des Potentials umgekehrt  $U = +eV$ . Bei der Löcherleitung werden die Ladungsträger außerdem von der gegenüberliegenden Seite eingebracht. Aus diesem Grund müssen die Seiten des Potentials vertauscht werden. Als nächstes wird das Potential wieder bei  $0 \text{ V}$  am linken Kontakt fixiert. Wie auch bei den Elektronen wird nun die Ausgangsbarriere dieses Mal mit der Schottky-Barriere  $\Phi_{SB h}$  der Löcher erstellt, hinzugefügt und nach den gleichen Regeln zu niedrige Werte abgeschnitten. Abbildung 4.5 zeigt diesen Vorgang. Bei der Berechnung muss dann nur noch die effektive Masse der Elektronen mit der Masse der Löcher ausgetauscht werden.

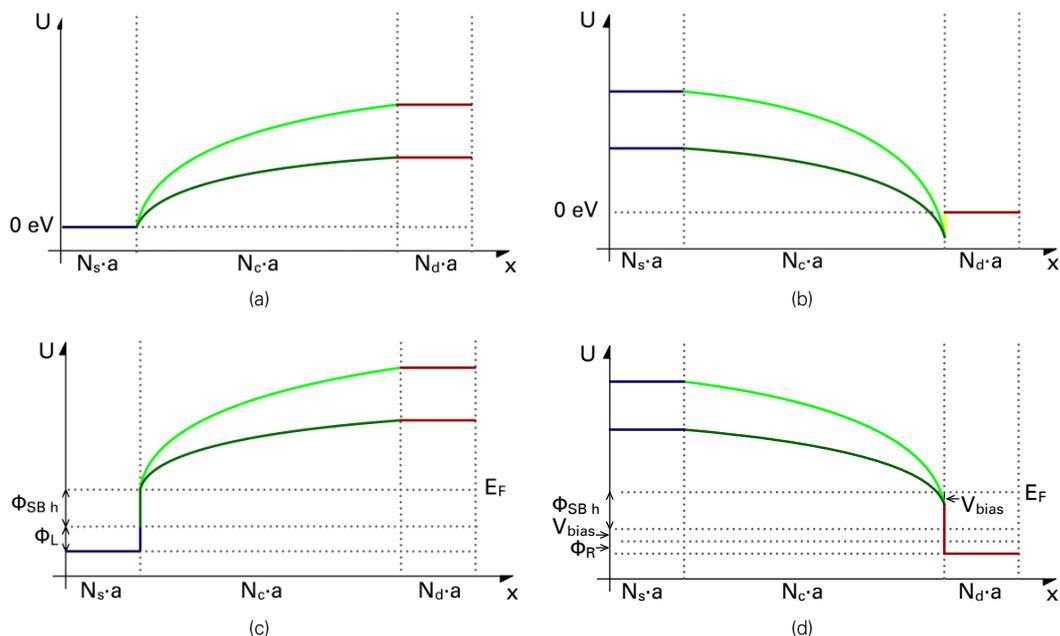


Abbildung 4.5: Ausgangsbarriere kombiniert mit Potential (a)/(b) zur Potential-Barriere der Löcher für den linke (c) und rechte (d) Kontakt

Nachdem nun das Potential für den jeweiligen Fall konstruiert wurde, kann nun die Hamiltonmatrix, wie in Gleichung 3.10 beschrieben, zusammengestellt werden. Um die Integration in der Gleichung 3.3 zu berechnen, wird sie in eine Summation überführt. Dabei wird als obere Grenze  $E_{\max}$  und als untere Grenze  $E_{\min}$  verwendet. Die Schrittweite des Energiegitters wird durch die Anzahl der Summanden  $N_E$  bestimmt. Innerhalb dieses Fensters werden nun die anderen benötigten Daten, wie die Erweiterungsfunktion  $\Gamma$  oder die Spektralfunktion  $\Sigma$  vorbereitet.

In einer Schleife wird abschließend für alle k-Punkte die Greensche Funktion und die Transmission berechnet. Nach Gleichung 4.1 wird dann der Stromfluss ermittelt.

$$I = \frac{q}{h} \frac{E_{\max} - E_{\min}}{N_E} \sum_{k=E_{\min}}^{E_{\max}} \bar{T}_k (f_{1k} - f_{2k}) \quad (4.1)$$

Da das Problem in zwei Bereichen gelöst wurde, muss am Ende das System wieder als ein Ganzes betrachtet werden. Dafür werden die berechneten Transmissionen der beiden Kontakte nach der Gleichung 3.18 zusammengefasst. Anschließend wird wieder die Gleichung 4.1 angewandt, um den Stromfluss zu erhalten. Diese Werte für die Elektronen und Löcher werden am Ende zum Gesamtstrom addiert.

## 4.2 BERECHNUNG DER BASIS-STROM-SPANNUNGS-KENNLINIE

In diesem Abschnitt soll die Basis-Strom-Spannungs-Kennlinie vorgestellt werden. Sie stellt die Vergleichsgrundlage innerhalb der Diskussion dar. Einige Zwischenergebnisse der in Abschnitt 4.1 gezeigten Arbeitsschritte werden präsentiert. Die Basis-Kennlinie basiert auf den im Abschnitt 4.3 festgelegten Simulationsparametern und den auf Seite VI zusammengefassten Werten.

Eine zentrale Bedeutung im Simulationsmodell nehmen die Potential-Barrieren ein. Bei der Berechnung der Strom-Spannungs-Kennlinien (siehe Abbildung 4.8) sind für die 21 Gatespannungspunkte jeweils die Konstruktion von vier verschiedenen Barrieren nötig, da sowohl der linke und rechte Kontakt als auch der Löcher- und Elektronentransport separat betrachtet werden. In Abbildung 4.6 sind jedoch nur einige der 84 Barrieren stellvertretend dargestellt.

Bei negativen Gatespannungen ist klar zu erkennen, dass für Elektronen das Tunneln aufgrund der sehr hohen Barriere quasi unmöglich ist. Hingegen befindet sich bei den Löchern eine räumlich stark begrenzte Potential-Barriere, welche relativ leicht durchtunnelt werden kann. Jedoch nimmt die Breite dieser Barriere mit steigender Gatespannung deutlich zu.

Wenn  $V_G = 0\text{ V}$  erreicht ist, bestimmen nur die jeweilige Schottky-Barriere und die angelegte Spannung zwischen den Kontakten das Aussehen der Barriere. Da Löcher und Elektronen von unterschiedlichen Seiten in den Transistor eingebracht werden, mussten die Seiten des Potentials zur Betrachtung der Löcher vertauscht werden. An dieser Stelle ist das Tauschen an den Barrieren gut zu erkennen. Bei den Elektronen ist auf der linken Seite der fast gerade Ausschnitt aus dem Potential zu erkennen, der sich bei den Löchern auf der rechten Seite befindet.

Im positiven Gatespannungsbereich ist fast das gespiegelte Bild zum negativen Bereich zu finden. Es gibt aber hier einige signifikante Unterschiede. Im Vergleich zu den Löchern ist die Schottky-Barriere bei den Elektronen größer. Dadurch ist die Barriere der Elektronen höher und an der Basis auch breiter. Dies erschwert das Tunneln der Elektronen merklich.

Die diskutierten Trends sind auch in der Quantifizierung des Tunneleffektes, der Transmissionsfunktion  $\bar{T}(E)$ , zu erkennen. In Abbildung 4.7 sind die entsprechenden Transmissionen in Abhängigkeit der Energie aufgetragen.

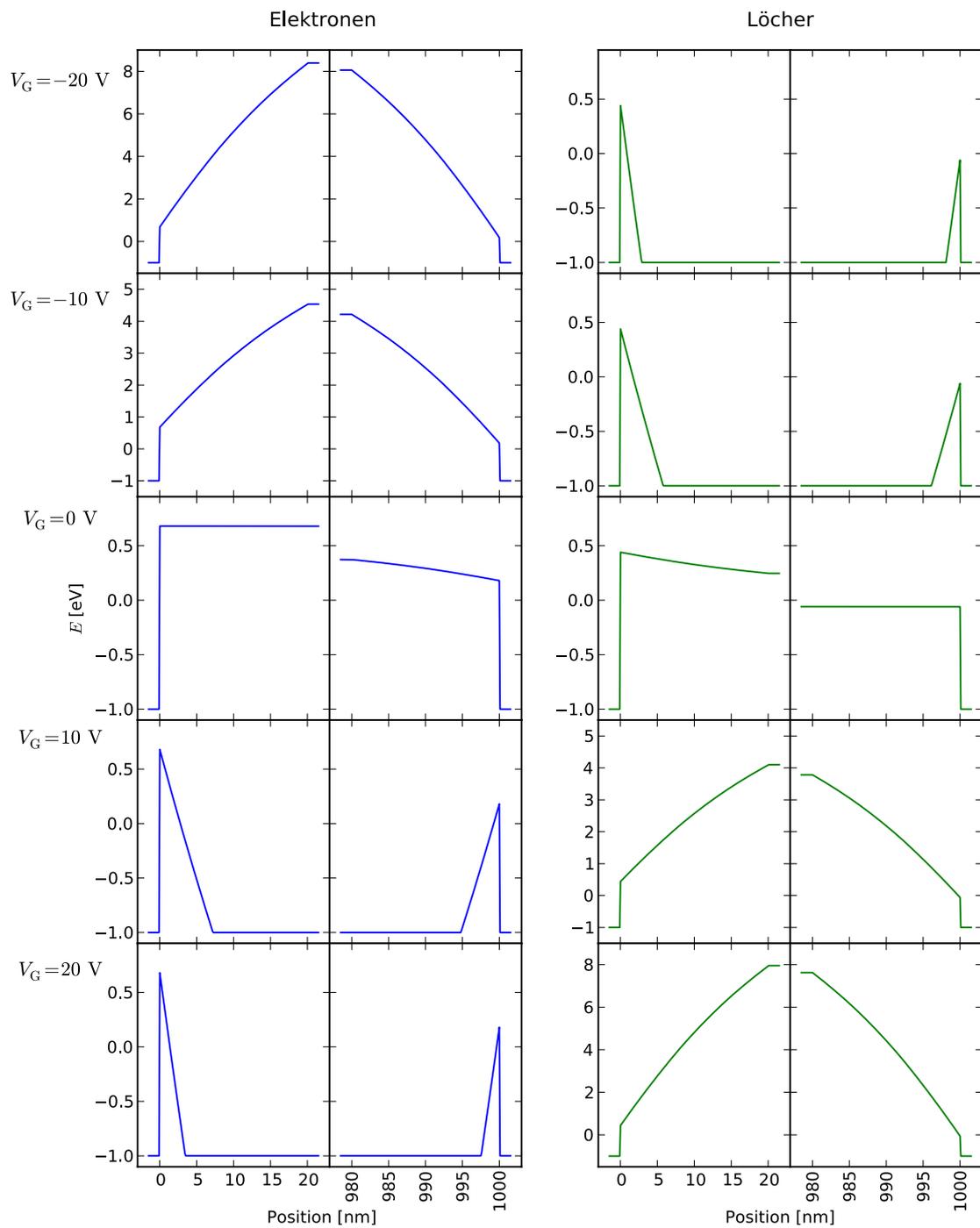


Abbildung 4.6: Potential-Barrieren im Bereich des linken und rechten Kontakts für Elektronen und Löcher bei unterschiedlichen Gatespannungen  $V_G$  (die Position 0 nm bezieht sich auf die linke und 1000 nm auf die rechte Kontaktfläche)

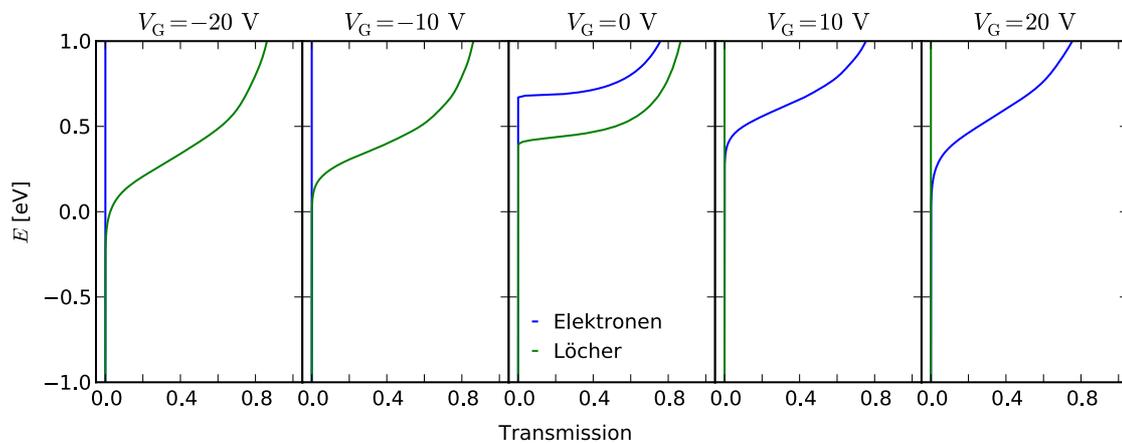


Abbildung 4.7: Die Transmissionsfunktion  $\bar{T}(E)$  von Elektronen und Löchern in Abhängigkeit der Energie bei unterschiedlichen Gatespannungen  $V_G$

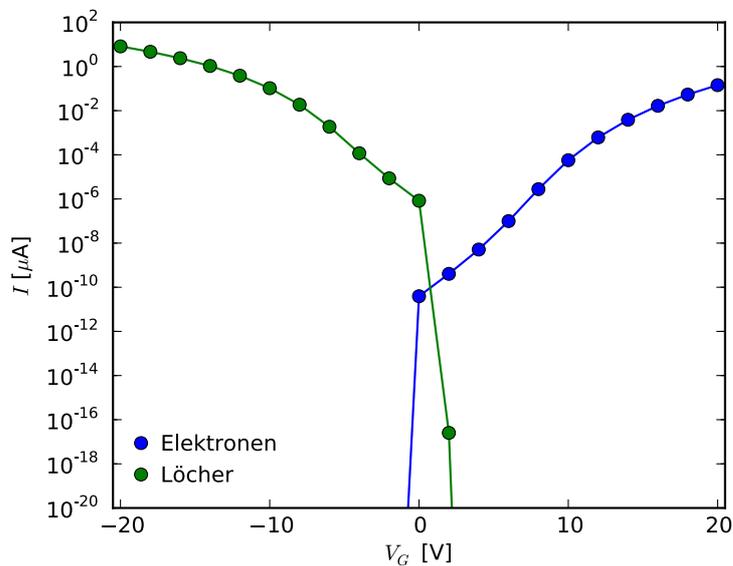


Abbildung 4.8: Strom-Spannungs-Kennlinie für Elektronen- und Löcherströme

Bei  $V_G = -20\text{ V}$  und  $V_G = -10\text{ V}$  ist für Elektronen die Transmission im gesamten betrachteten Energiebereich Null. Das Gleiche gilt für die Löcher bei  $V_G = 10\text{ V}$  und  $V_G = 20\text{ V}$ .

Wenn keine Spannung am Gate anliegt, tragen sowohl Löcher als auch Elektronen, die eine Energie oberhalb der Schottky-Barriere besitzen, zum Stromfluss bei. Da die Fermi-Dirac-Verteilung für Löcher und Elektronen gleich ist, dominieren die Löcher den Ladungstransport in diesem Bereich aufgrund ihrer niedrigeren Schottky-Barriere.

Der Beginn der Transmissionskurve der Elektronen verschiebt sich bei steigender Gatespannung ( $V_G > 0\text{ V}$ ) zu niedrigeren Energien. Der Bereich oberhalb der Schottky-Barriere bleibt hingegen fast unverändert. Die Ursache hierfür ist, dass sich die Höhe der Barriere nicht mehr ändert, sondern nur noch ihre Breite (vergleiche Abbildung 4.6). Wenn nun die Gatespannung steigt, schrumpft die Breite und Elektronen niedrigerer Energie können mit einer größeren Wahrscheinlichkeit das Hindernis überwinden. Das Gleiche passiert auch bei den Löchern, wenn die Gatespannung sinkt ( $V_G < 0\text{ V}$ ). Hier sinkt der Beginn der Transmissionskurve jedoch tiefer, was wieder auf die niedrigere und dünnere Barriere zurückzuführen ist.

Abschließend zeigt die Abbildung 4.8 die Basis-Strom-Spannungs-Kennlinie. In diesem Diagramm sind die Anteile der Elektronen und der Löcher am Stromfluss getrennt dargestellt. Die weiteren Strom-Spannungs-Kennlinien stellen immer den Gesamtstrom beider Arten dar. Da sich einzelne Werte der beiden Ströme jedoch um mehrere Größenordnungen unterscheiden, bewirkt das fehlende Aufsummieren in diesem Fall keine Änderung in der Kurvenform.

Bereits in den Potential-Barrieren und Transmissionskurven konnte eine Asymmetrie zwischen Elektronen und Löchern durch die unterschiedlichen Werte von  $\Phi_{SB_e}$  und  $\Phi_{SB_h}$  gezeigt werden. In der Strom-Spannungs-Kennlinie kann man sie sowohl an den unterschiedlichen Höhen des Stroms als auch an der Verschiebung des Minimums zu einer positiven Gatespannung erkennen. Die vermutete Dominanz der Löcherleitung bei fehlender Gatespannung ist klar erkennbar.

### 4.3 WAHL DER SIMULATIONSPARAMETER

Der nächste Schritt nach der Implementierung ist die Wahl eines sinnvollen Satzes an Simulationsparametern. Hierbei muss besonders darauf geachtet werden, dass diese keinen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis haben. Um eine solche Verfälschung des Resultates ausschließen zu können, werden in diesem Abschnitt die einzelnen Parameter variiert und ihr Einfluss ermittelt. Als Basis der Parametersatz von Seite VI.

#### Gitterabstand

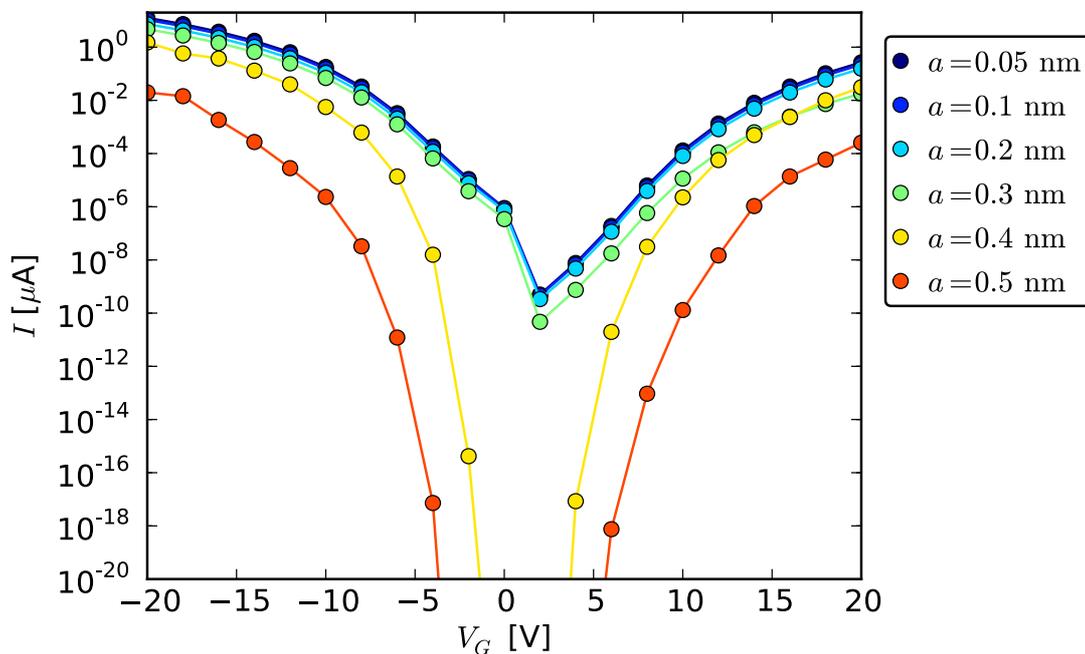


Abbildung 4.9: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie vom Gitterabstand  $a$

Der Gitterabstand ist für die Überführung des Hamiltonoperators in die Hamiltonmatrix (Gleichung 3.10) von zentraler Bedeutung. Durch ihn wird bestimmt, wie fein die räumliche Diskretisierung ist. In Abbildung 4.9 zeigt sich deutlich, dass die Wahl dieses Wertes einen großen Einfluss auf die zu berechnende Strom-Spannungs-Kennlinie hat. Der Test begann bei  $a = 1 \text{ nm}$  und zeigte dabei, dass bei einem deutlich zu groß gewählten Gitterabstand die Methode nicht mehr stabil ist und somit keine Ergebnisse liefert. Ab einem Wert von  $0,2 \text{ nm}$  ist die Form der Strom-Spannungs-Kennlinie relativ unverändert. Die Ergebnisse zeigen keinen relevanten Unterschied mehr zwischen  $a = 0,1 \text{ nm}$  und  $a = 0,05 \text{ nm}$ .

Da die Halbierung des Gitterabstandes die Berechnungszeit vervierfacht, stellt  $a = 0,1 \text{ nm}$  einen sehr guten Kompromiss zwischen hoher Genauigkeit und niedriger Rechenzeit dar.

## Grundpotentiale

Wie im Abschnitt 4.1 beschrieben wurde, bestimmen die Grundpotentiale  $\Phi_{L/R}$  die unteren Grenzen der Potential-Barrieren (siehe Gleichung 3.12). Da der größte Teil des Ladungstransports aufgrund der Form des Potentials (siehe Abbildung 4.4) im oberen Energiebereich stattfindet, wird erwartet, dass der Einfluss des Grundpotentials eher gering ist. Für den linken Kontakt ist in Abbildung 4.10 zu erkennen, dass nur sehr kleine Abweichungen erkennbar sind. In der Simulation wird  $\Phi_L = 1 \text{ eV}$  verwendet. Die Abbildung 4.11 zeigt auch, dass die Variation von  $\Phi_R$  keinen signifikanten Einfluss auf die Ergebnisse hat. Deshalb wird im folgenden  $\Phi_R = 0,5 \text{ eV}$  verwendet.

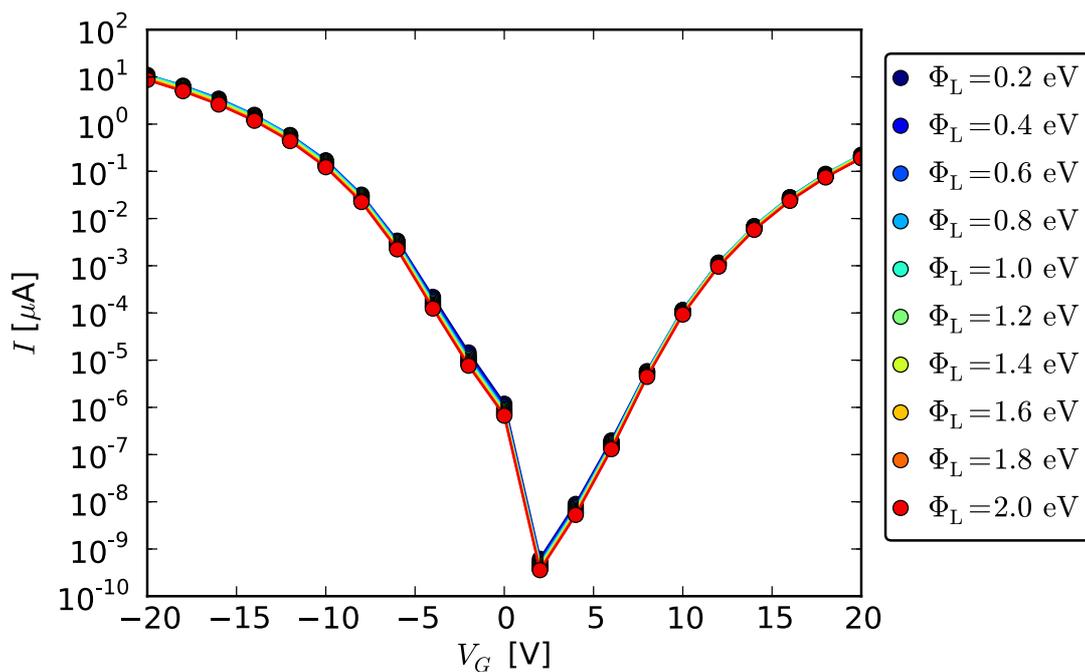


Abbildung 4.10: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie vom Grundpotential  $\Phi_L$

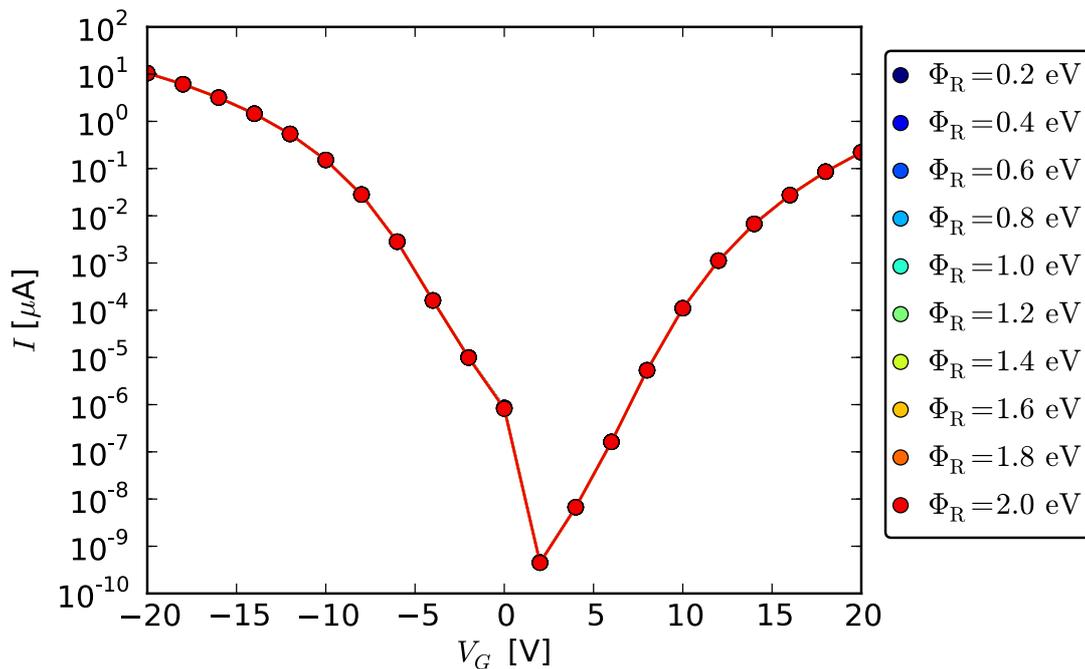


Abbildung 4.11: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie vom Grundpotential  $\Phi_R$

### Summationsgrenzen

In der Gleichung 4.1 werden die Summationsgrenzen  $E_{\min}$  und  $E_{\max}$  eingeführt. In Abbildung 4.12 ist ersichtlich, dass bei einer Senkung der maximalen Energie ein Teil der Ladungsträger, die die Potential-Barriere passieren könnten, nicht mehr erfasst werden. Alle Ladungsträger, die die Barriere oberhalb passieren, bilden den so genannten thermisch aktivierten Strom (thermionic current). Da im Bereich von  $-5\text{ V} < V_G < +5\text{ V}$  die Ladungen hauptsächlich in diesen oberen Energiebereich passieren, ist der Effekt hier sehr stark ausgeprägt. Zuerst werden Anteile des thermisch aktivierten Stroms abgeschnitten. Bei einer noch kleineren Grenze wird auch der Tunnelstrom (tunneling current) beschnitten, wodurch auch bei hohen Gatespannungen eine Reduzierung des Gesamtstroms ersichtlich wird. Nach der Fermi-Dirac Verteilung existieren jedoch nur sehr wenige Ladungsträger, die eine Energie weit über der Fermienergie besitzen. Aus diesem Grund ist die Wahl einer höheren Grenze als  $E_{\max} = 1\text{ eV}$  in diesem System nicht nötig.

Wenn der Energiebereich von der unteren Grenzen  $E_{\min}$  aus eingeschränkt wird, wie in Abbildung 4.13 gezeigt, ändern sich die äußeren Bereiche am stärksten.

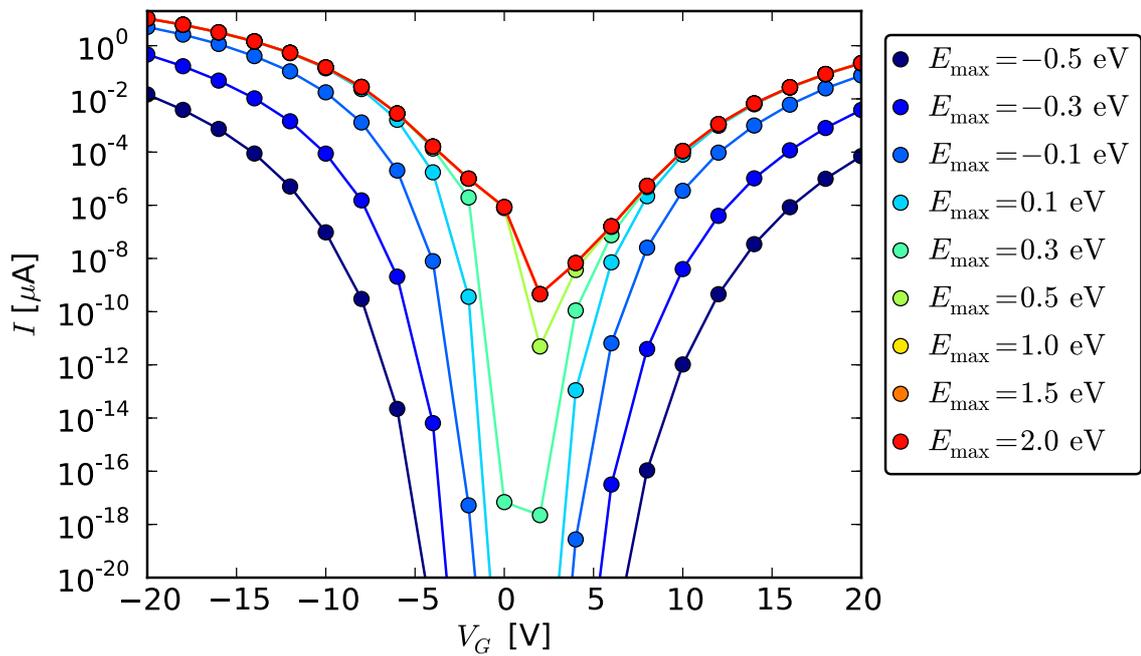


Abbildung 4.12: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der oberen Summationsgrenze  $E_{\max}$

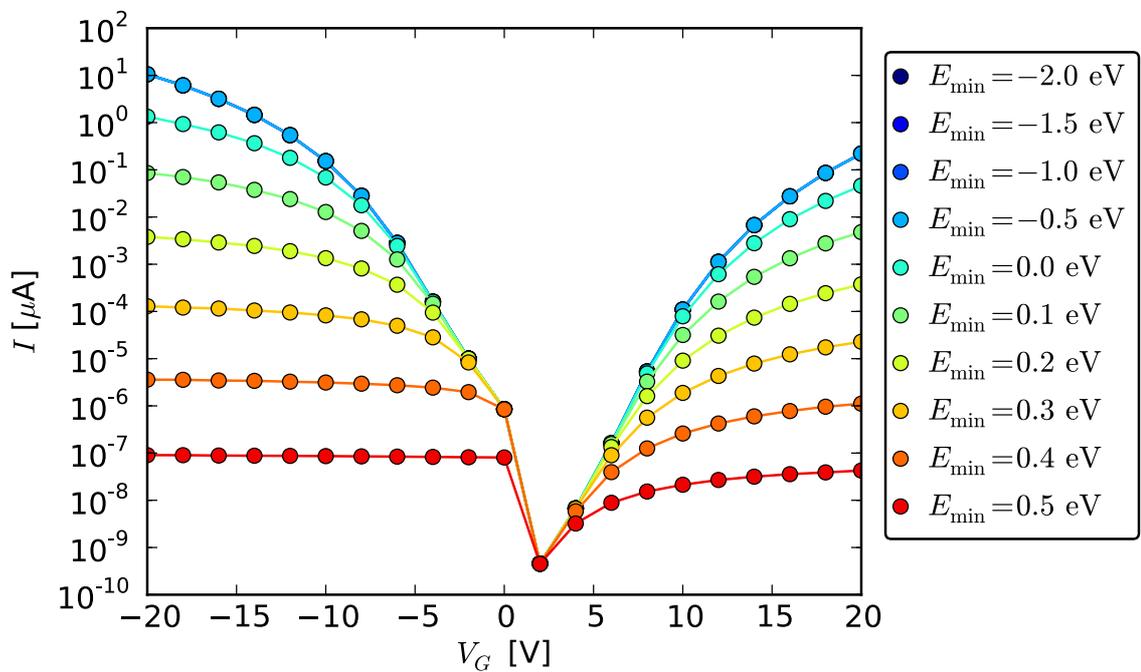


Abbildung 4.13: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der unteren Summationsgrenze  $E_{\min}$

Bei großen Gatespannungen  $V_G$  tunnelt ein bedeutender Teil der Ladungsträger schon bei niedrigeren Energien durch die Barriere. Dieser Teil wird hierbei abgeschnitten, der Tunnelstrom wird hierdurch stark eingeschränkt. Im Bereich der negativen Gatespannung ist bei  $E_{\min} = 0,5 \text{ eV}$  nur noch ein Teil des thermisch aktivierten Stroms vorhanden. Dies kommt dadurch zustande, weil  $E_{\min} > \Phi_{\text{SBh}}$  ist. Im Bereich von  $-20 \text{ V} < V_G < +20 \text{ V}$  sind ab  $E_{\min} = -0,5 \text{ eV}$  keine Veränderungen zu erkennen. Als Wert wird  $E_{\min} = -1 \text{ eV}$  gewählt, da sich dieser deutlich in einem stabilen Bereich befindet. Der Energiebereich für die Summation erstreckt sich somit von  $-1 \text{ eV}$  bis  $+1 \text{ eV}$ .

### Orts- und Energieraster

Innerhalb der Simulation werden die Kontakte des Transistors als einzelne Ausschnitte betrachtet. Diese Bereiche werden durch den Gitterabstand und die Anzahl der zu betrachtenden Punkte bestimmt. Für die drei Abschnitte Source, Leiter und Drain, wie sie im Abschnitt 4.1 (Seite 28) beschrieben werden, können die Punkteanzahlen getrennt festgelegt werden. Zu beachten ist, dass es sich jeweils nur um einen Ausschnitt eines realen Kontaktes und eines Hilfskontaktes handelt. Auch von der Leiterregion wird nur ein kleiner Bereich nahe des realen Kontaktes dargestellt.

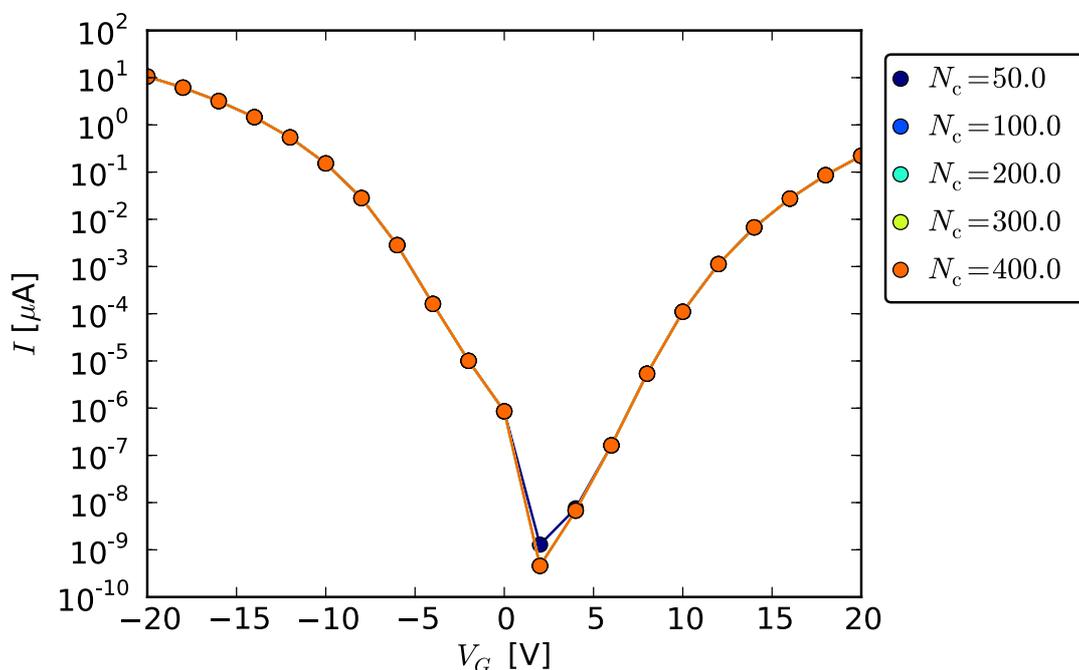


Abbildung 4.14: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Anzahl der Gitterpunkte  $N_c$  in der Leiterregion

Die Anzahl der Gitterpunkte der Kontakte wird im Bereich von  $5 \geq N_{s/d} \leq 31$  variiert. Bei einem Gitterparameter von  $a = 0,1 \text{ nm}$  entspricht das einer Länge der Kontakt-Regionen von 0,5 bis 3,1 nm. Da sich bei beiden Parametern im untersuchten Bereich keine Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie zeigten, wird darauf verzichtet, diesen Sachverhalt in einem Diagramm darzustellen. Als Simulationsparameter wird  $N_{s/d} = 15$  gewählt.

Im Leiterabschnitt liegt der untersuchte Bereich zwischen  $N_c = 50$  ( $\hat{=} 5 \text{ nm}$ ) und  $N_c = 400$  ( $\hat{=} 40 \text{ nm}$ ). In Abbildung 4.14 zeigt sich, dass eine Änderung an dieser Stelle nur kleine Veränderungen nach sich zieht. So ist bei einer Anzahl von nur 50 Punkten eine Abweichung im Minimum der Kurve zur erkennen. Um die Rechenzeit bei hoher Genauigkeit möglichst gering zu halten, wurde  $N_c = 200$  als Simulationsparameter gewählt.

Bei der Untersuchung des Transportvorgangs wurde neben der Länge des Transistors auch der zu untersuchende Energiebereich diskretisiert. Dieses Energiegitter ist durch seine Grenzen  $E_{\max}$  und  $E_{\min}$  sowie der Anzahl der Gitterpunkte  $N_E$  bestimmt (siehe Gleichung 4.1). Im Bereich von  $51 \geq N_E \leq 801$  wurde kein Einfluss durch diese Größe festgestellt. Dies ist einmal darauf zurückzuführen, dass die Transmissionsfunktion sich nur langsam mit dem Energiegehalt ändert und dass durch den Einsatz der Büttiker Sonde dieses Verhalten noch verstärkt wird. Der Wert  $N_E = 201$  wurde als Simulationsparameter ausgewählt.

## 4.4 ABHÄNGIGKEIT VON GEOMETRISCHEN PARAMETERN

Nachdem geeignete Simulationsparameter festgelegt wurden, ist die Simulationsplattform etabliert und es können die Fragestellungen dieser Arbeit beantwortet werden. In diesem Abschnitt lautet diese: Wie stark beeinflussen Ungenauigkeiten der geometrischen Parameter das Ergebnis der Simulation? Die hierfür nötigen Änderungen werden hauptsächlich im FEM-Modell umgesetzt.

### Radius

Als erstes wird der Radius variiert. In Abbildung 4.15 zeigt sich, dass trotz eines zunehmenden Radiuses der Stromfluss abnimmt. Dies ist ein besonderer Effekt, der aufgrund der nanoskaligen Größenordnung auftritt. Die Ursache dieses ungewöhnlichen Verhaltens liegt im starken Anstieg des elektrischen Feldes durch eine kleiner werdende Leiterspitze. Insgesamt steigt die Stromdichte dadurch so stark, dass auch bei der kleineren Leiterfläche ein größerer Gesamtstrom fließt. Jedoch ist der Effekt nur im Bereich kleiner Radien zu erwarten. Um die Veränderung des Stromflusses besser beurteilen zu können, ist in Abbildung 4.16 der Stromfluss über den Radius bei den Gatespannungen  $V_G = \pm 20$  V aufgetragen.

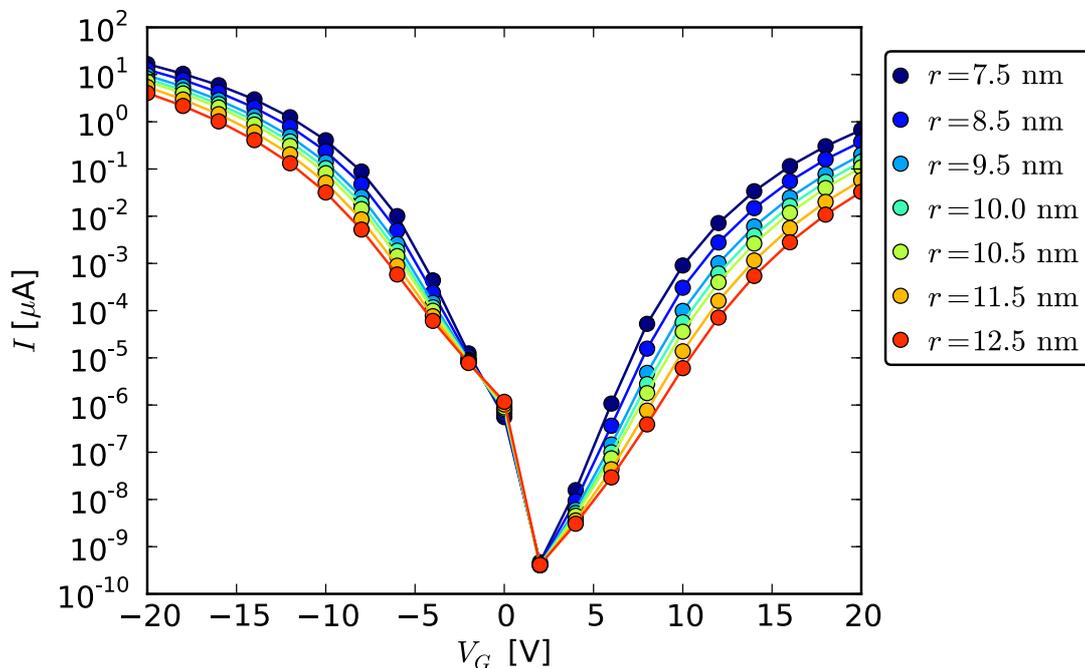


Abbildung 4.15: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie vom Radius  $r$  des Nanodrahtes

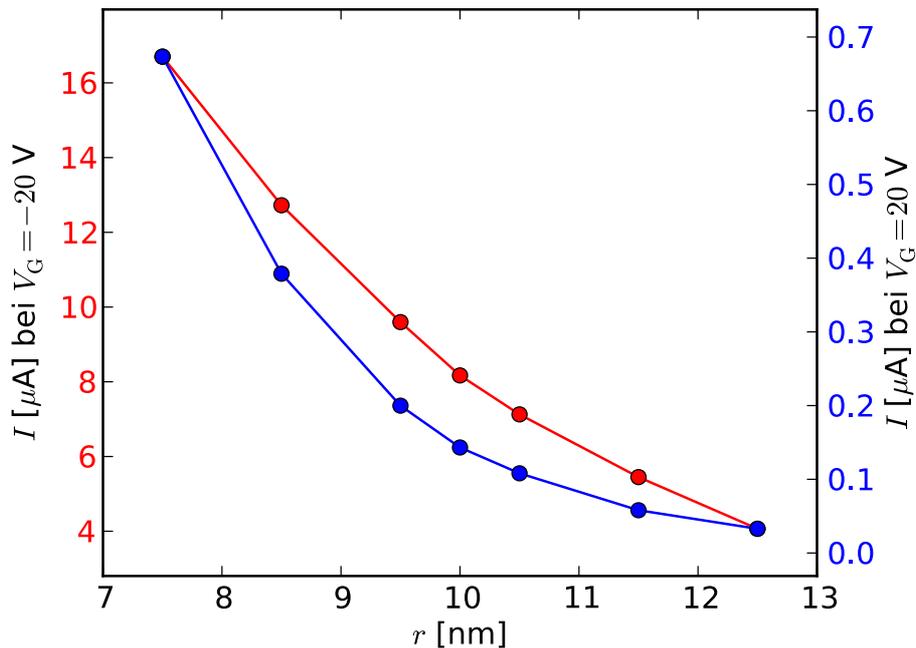


Abbildung 4.16: Abhängigkeit des Stromflusses vom Radius  $r$  des Nanodrahtes bei positiver und negativer Gatepannung  $V_G = \pm 20$  V

Hier ist zu erkennen, dass der Effekt sich bei großen Radien des Nanodrahtes abschwächt und es ist zu erwarten, dass er sich bei größeren Durchmessern umkehrt. Auch zeigt die Form der beiden Kurven, dass die Gatespannung einen Einfluss besitzt. Im Bereich der dominierenden Löcherleitung ist der Anstieg des Stromflusses deutlich stärker als in dem von Elektronen dominierten Bereich. So kann man bei  $V_G = 0$  V in Abbildung 4.15 erkennen, dass hier der eigentlich zu erwartende Zusammenhang zwischen Radius und Stromfluss zum Tragen kommt. Dies ist auf das Fehlen des Gatefeldes zurückzuführen. Ohne dieses Feld ist der Spitzeneffekt an den Kontakten nicht so ausgeprägt, da die Änderung des Gesamtfeldes deutlich kleiner ist. Es zeigt sich also, dass der ungewöhnliche Effekt von steigendem Stromfluss mit sinkendem Radius bei kleinem Radius und großen Gatespannungen am stärksten auftritt.

### Oxidschicht auf dem Nanodraht

Es ist davon auszugehen, dass sich auf der Oberfläche des Nanodrahtes nach der Herstellung eine Oxidschicht bildet. Bei der Modellierung des Transistors gibt es zwei Möglichkeiten, die Änderung der Oxidschicht zu beschreiben. Zum einen kann gesagt werden, dass die Oxidschicht einen Teil des ehemaligen aktiven

Volumens des Nanodrahtes darstellt. Dies würde bedeuten, dass bei einer Oxidschichtdicke  $d_{\text{ox w}} = 2 \text{ nm}$  der innere, aktive Bereich nur noch einen Radius  $r = 8 \text{ nm}$  besitzt. Oder die Oxidschicht wird als eine Zusatzschicht auf dem Nanodraht interpretiert. Bei diesem Ansatz würde sich die Fläche der aktiven Region nicht ändern. In der Natur ist natürlich eine Kombination beider Modelle zu erwarten, die aber nur schwer modellierbar wäre.

Das Ergebnis, das man bei der Nutzung des ersten Ansatzes erhält, ist in Abbildung 4.17 dargestellt. Im Vergleich mit Abbildung 4.15 ist klar ersichtlich, dass der Haupteffekt hier durch die Reduzierung der aktiven Fläche verursacht wird. Der Zusammenhang zwischen Oxidschicht und der aktiven Region stellt eine interessante Verbindung dar, die zur gezielten Einstellung von Eigenschaften des FET genutzt werden könnte.

Im zweiten Ansatz wird die aktive Region nur ein wenig weiter von der Gateelektrode entfernt. Dies führt dazu, dass das Potential etwas schwächer durch den Nanodraht dringen kann. Somit sinkt bei einer größeren Oxidschicht, wie zu erwarten war, der fließende Strom. Insgesamt ist diese Veränderung nur klein und hat nur wenig Einfluss auf den Verlauf der Strom-Spannungs-Kennlinie.

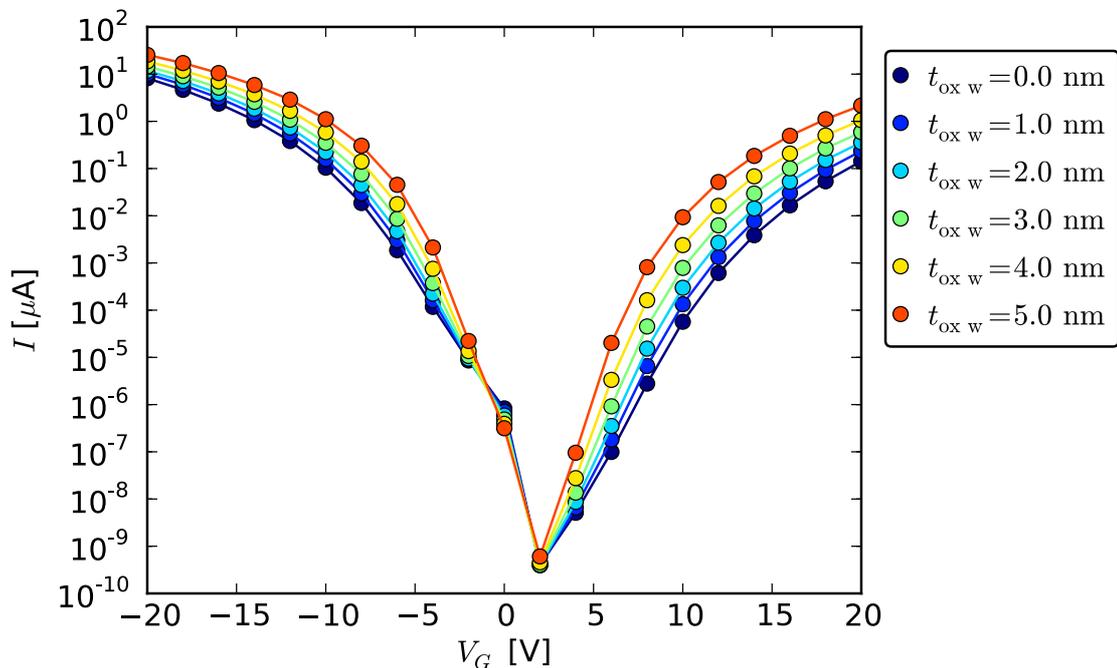


Abbildung 4.17: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Dicke der Oxidschicht  $t_{\text{ox w}}$  auf dem Nanodraht, wobei gilt  $t_{\text{ox w}} + r = 10 \text{ nm}$

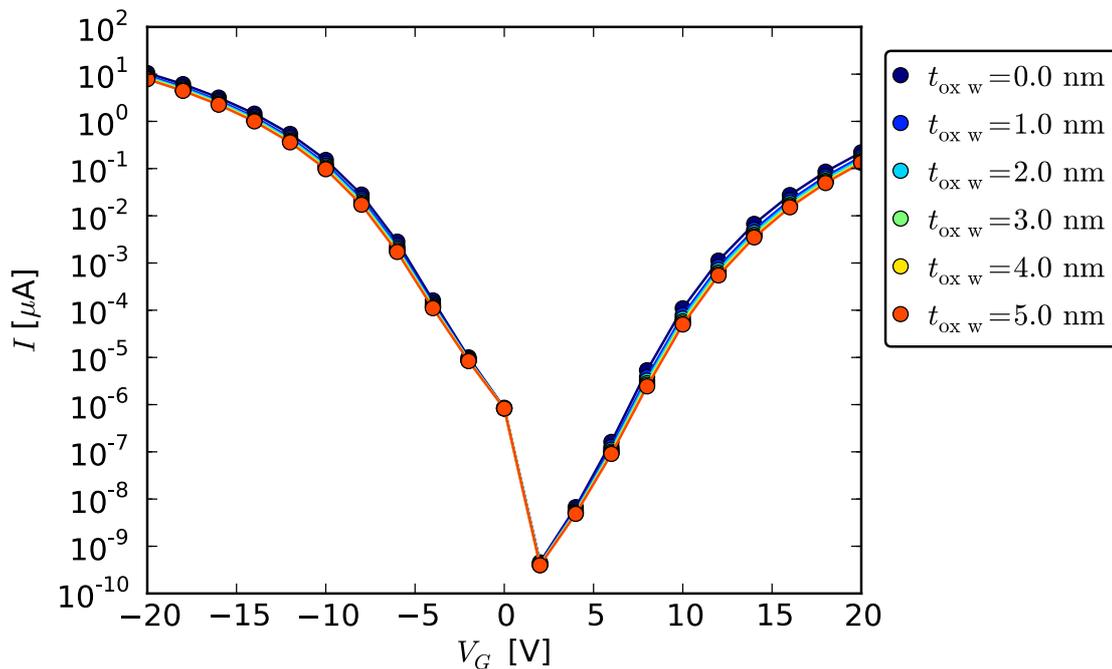


Abbildung 4.18: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Dicke der Oxidschicht  $t_{\text{ox w}}$  auf dem Nanodraht, wobei gilt  $r = 10 \text{ nm}$

### Länge der Leiterregion

In dem untersuchten Modell wird von einem ballistischen Ladungstransport ausgegangen. Somit kann erwartet werden, dass der Einfluss der Länge der Leiterregion (auch als Gate- oder Channellänge bekannt) klein ist. Jedoch muss beachtet werden, dass die nun präsentierten Erkenntnisse nicht auf größere Längen übertragen werden können. Weber et al. [24] zeigten experimentell, dass bis zu einer Länge von 1000 nm recht sicher von einem ballistischen Transport ohne ohmsche Anteile ausgegangen werden konnte. Bei Längen über 2000 nm ist dies jedoch nicht mehr möglich.

Die in Abbildung 4.19 zu beobachtende Änderung resultiert aus der leichten Modifikation des Potentials im Bereich der Kontakte. Es zeigt sich, dass bei kleinen Abständen der Stromfluss ein wenig zurück geht, da bei einer kurzen Länge der Leiterregion das Gatefeld schlechter in den Leiter eindringen kann, was zu einem schlechteren Gatedurchgriff führt.

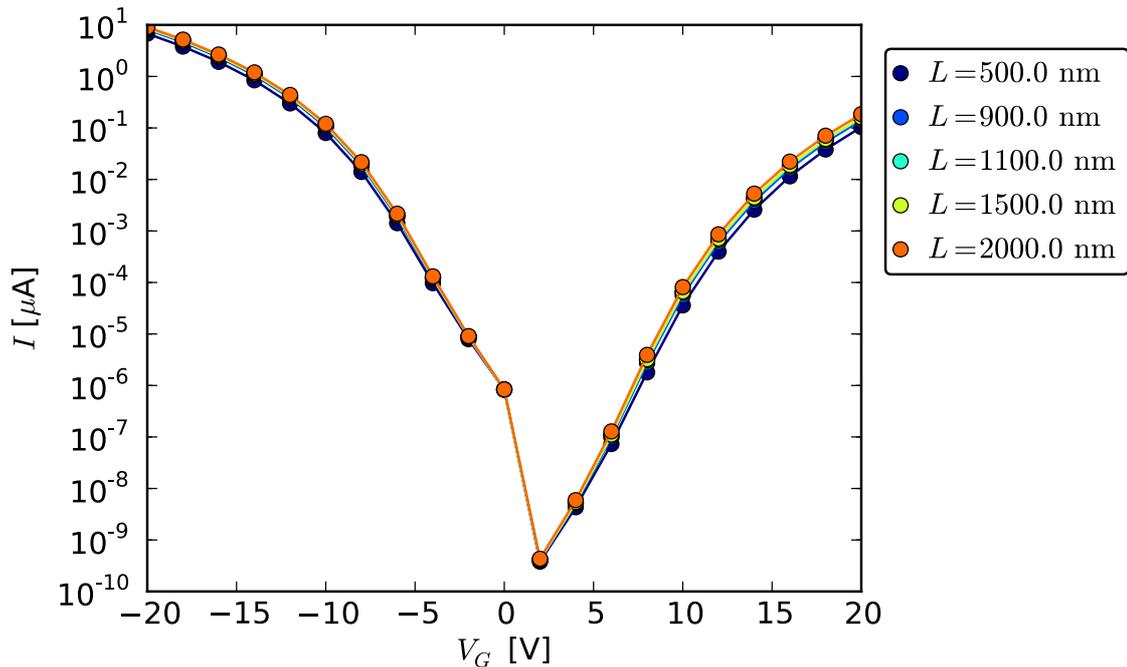


Abbildung 4.19: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Länge  $L$  der Leiterregion

### Höhe der Gateoxidschicht

Ein wichtiger geometrischer Parameter, um die Eigenschaften eines FETs zu beeinflussen, stellt der Abstand zwischen dem Nanodraht und der Gateelektrode dar. Je kleiner der Abstand ist, um so besser kann das vom Gate erzeugte elektrische Feld in den Draht eindringen. Somit wird bei einer dünneren Oxidschicht ein höherer Strom erreicht. Dieser Trend ist in Abbildung 4.20 bereits gut zu erkennen. Damit der Bereich um  $h_{\text{ox}} = 300 \text{ nm}$  besser dargestellt werden kann, ist in Abbildung 4.21 wieder der Verlauf für die beiden Gatespannungen  $V_G = \pm 20 \text{ V}$  aufgetragen. Dadurch ist zu erkennen, dass die kleinen Abweichungen von der angenommenen Transistorgeometrie die Strom-Spannung-Kennlinie nur wenig verändern. Um auch den Unterschied zeigen zu können, der durch eine gezielte Änderung der Gateoxidhöhe möglich ist, wurde der Wert auch halbiert und verdoppelt. Innerhalb dieses Bereiches hat man in etwa eine Veränderung von einer Größenordnung. Es ist also in der Regel sehr wünschenswert, einen möglichst kleinen Abstand zwischen dem Nanodraht und dem Gate zu haben.

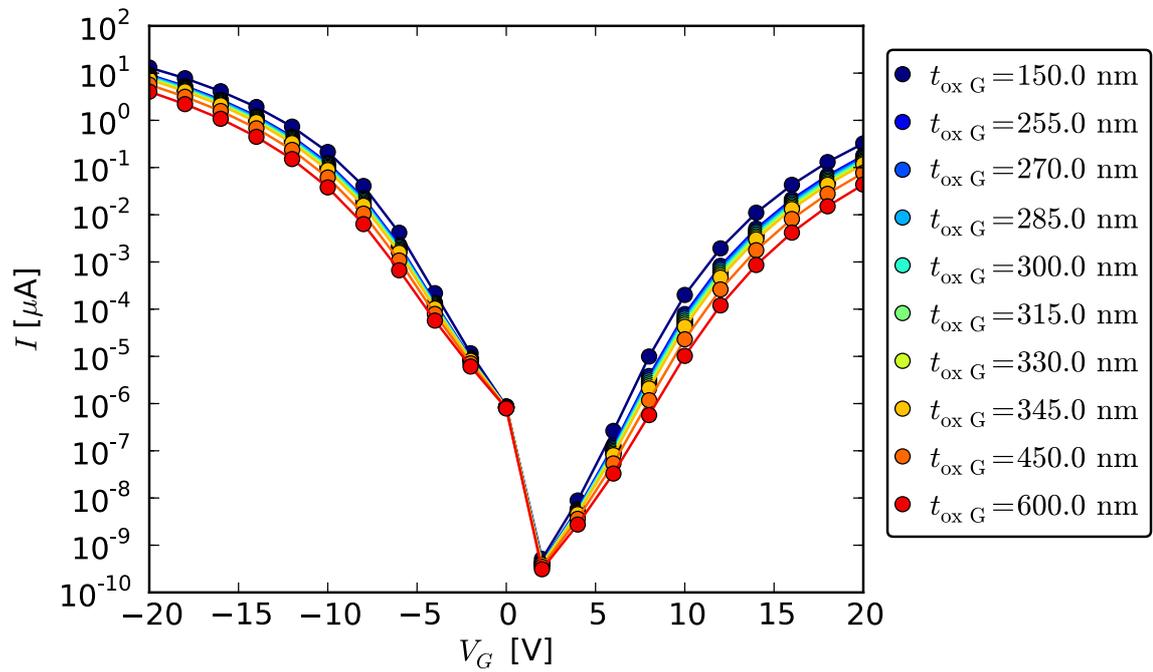


Abbildung 4.20: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Höhe des Gateoxids  $t_{\text{ox G}}$

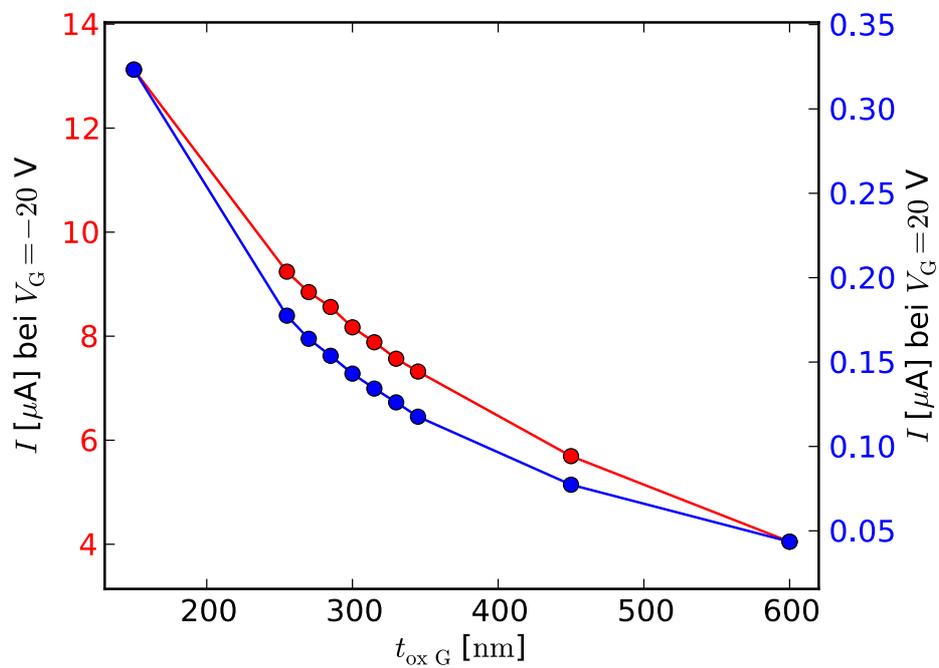


Abbildung 4.21: Abhängigkeit des Stromflusses von der Höhe des Gateoxids  $t_{\text{ox G}}$  bei positiver und negativer Gate-Spannung  $V_G = \pm 20 \text{ V}$

## Verformung des Nanodrahtes

Im Herstellungsprozess einer Sensormatrix werden die Nanodrähte mit Hilfe des Kontaktdruckes auf die Oberfläche des späteren Transistors aufgebracht. Aufgrund dieses Verfahrens ist damit zu rechnen, dass die Beschreibung der Schnittfläche des Nanodrahtes als perfekter Kreis unzureichend ist. Um den Einfluss der Querschnittsform zu untersuchen, wird diese in den Berechnungen als Ellipse beschrieben. Dabei wird die Halbachse  $r_a$  als Parameter gewählt und die zugehörige Halbachse  $r_b$  so festgelegt, dass die Querschnittsfläche immer die eines Kreises mit einem Radius von 10 nm entspricht.

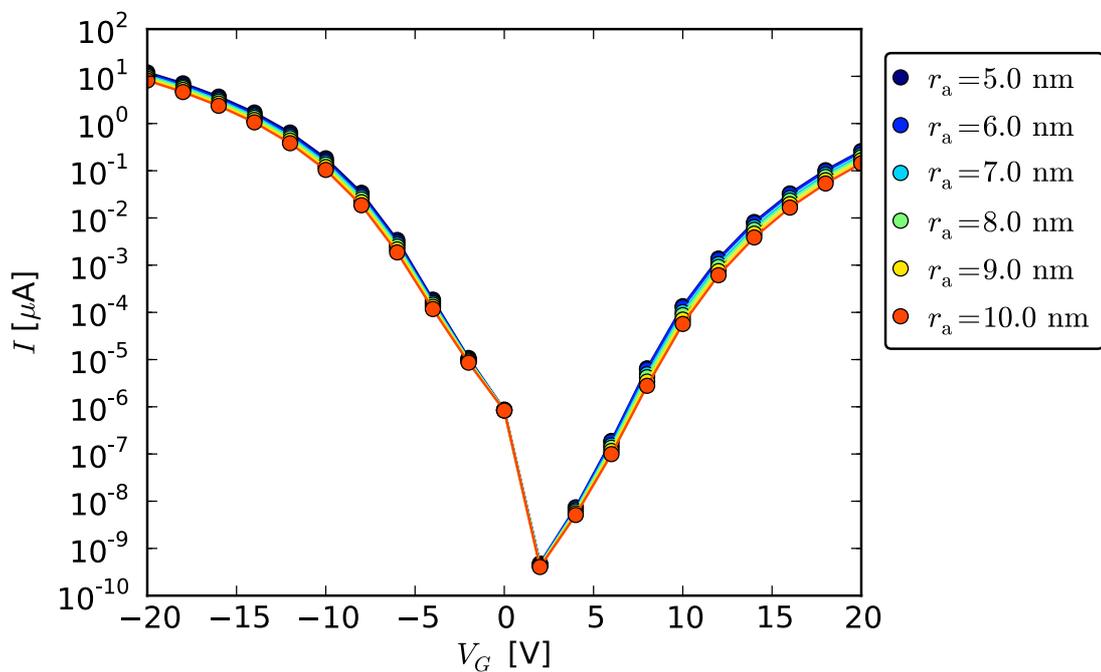


Abbildung 4.22: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Stärke der Verformung des Nanodrahtes zu einer Ellipse

Dass der Effekt nur einen kleinen Einfluss ausübt, zeigt Abbildung 4.22. Auch ist anzumerken, dass aufgrund des Nanodrahtmaterials nur kleine Verformungen zu erwarten sind. Hier ist dennoch bis zu einer Halbierung der Nanodrahthöhe betrachtet worden, um den Trend besser sichtbar zu machen. Interessant ist die Steigerung des Stromes mit zunehmender Verformung. Hier scheinen sich zwei Phänomene zu überlagern. Das Zentrum des Nanodrahtes rückt durch die Verformung ein wenig näher an die Gateelektrode heran. Dieser Effekt ist bereits aus Abbildung 4.18 bekannt. Dass in diesem Fall die Änderung in der Kurve größer ist, muss vermutlich auf ein Problem des Modells zurückgeführt werden. Da nur

ein 1-D-Potential in die Rechnung eingeht, wird nur die Steigerung des Potentials im Zentrum einbezogen, aber nicht seine Abschwächung an den nun angezogenen Rändern des Nanodrahtes. Wenn hier die Berechnung auf Grundlage eines 2-D-Potentials möglich wäre, ist zu vermuten, dass dieser Effekt verschwinden würde.

## 4.5 ABHÄNGIGKEIT VON PHYSIKALISCHEN PARAMETERN

### Effektive Ladungsträgermasse

Die effektive Ladungsträgermasse  $m_{\text{eff}}$  ist ein sehr häufig benötigter Parameter (zum Beispiel Gleichung 3.4, 3.9 oder 3.16). In der Literatur sind unterschiedliche Werte zu finden, die auch mit der Zeit Änderungen erfahren haben. So wurde häufig aus dem Jahre 1967 die Werte  $m_{\text{eff}e} = 1,18 \cdot m_e$  und  $m_{\text{eff}h} = 0,81 \cdot m_e$  von Barber [1] zitiert. Aktuellere Werte liefert Green [8] aus dem Jahr 1990 mit  $m_{\text{eff}e} = 1,09 \cdot m_e$  und  $m_{\text{eff}h} = 1,15 \cdot m_e$ . Green präsentiert neben diesen Werten bei 300 K noch weitere im Bereich zwischen 4,2 K und 500 K. Diese Temperaturabhängigkeit ist noch nicht im Modell implementiert. Jedoch zeigen die Werte bei 500 K mit  $m_{\text{eff}e} = 1,13 \cdot m_e$  und  $m_{\text{eff}h} = 1,29 \cdot m_e$ , dass der Bereich, in dem die effektive Teilchenmasse zu vermuten sind, recht umfangreich ist. Es stellt sich somit die Frage, wie groß ist die Unsicherheit der erzeugten Daten, wenn man von den verschiedenen möglichen Werten für die effektive Teilchenmasse ausgeht.

In der Abbildung 4.23 wird die effektive Masse der Elektronen variiert. Es ist gut zu erkennen, dass nur im rechten Ast Veränderungen auftreten. Auch in diesem Diagramm wurde ein größerer Bereich dargestellt, um den Trend deutlicher zu machen. Wie die Literaturwerte zeigen, ist der Abstand zwischen der gelben (Barber) und orangefarbenen Kurve (Green) der Unsicherheitsbereich, der durch die nicht genau bekannte effektive Masse der Elektronen zu erwarten ist.

Der Einfluss der effektiven Masse der Löcher wird in Abbildung 4.24 gezeigt. Hier sind nun die Veränderungen in dem linken Ast des Diagramms konzentriert. Insgesamt ist die Unsicherheit bei den Löchern als größer einzuschätzen, denn der mögliche Bereich erstreckt sich hierbei über  $0,5 m_e$ . Vor allem die starke Temperaturabhängigkeit verbreitet hier den Wertebereich. Trotzdem ist der resultierende Unsicherheitsbereich immer noch als klein einzuschätzen.

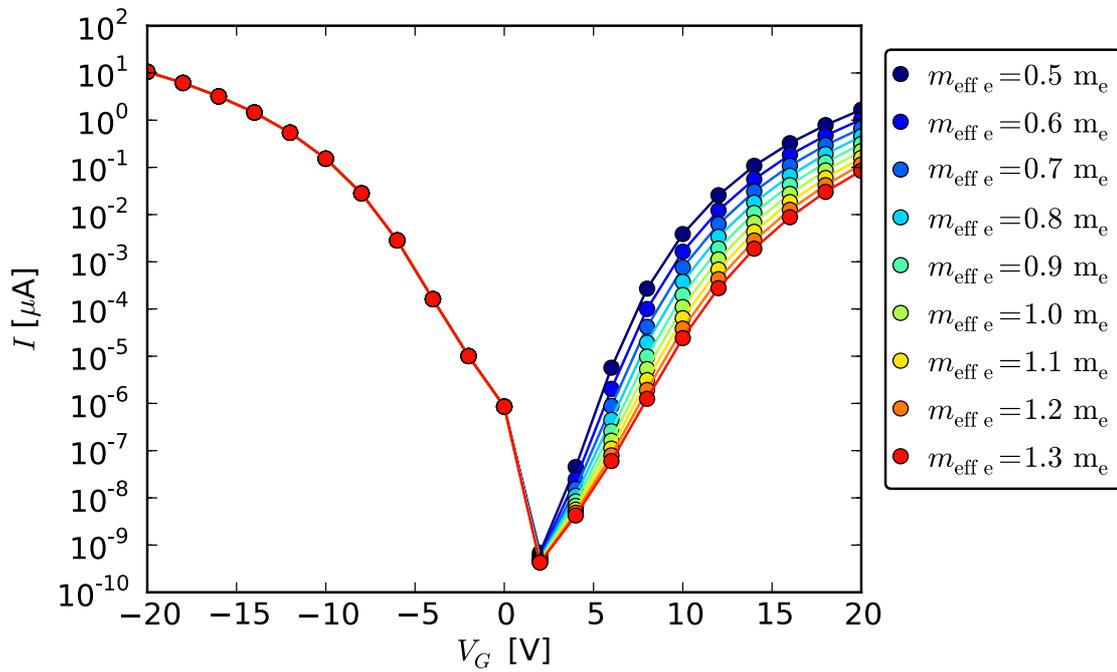


Abbildung 4.23: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Elektronenmasse  $m_{\text{eff } e}$

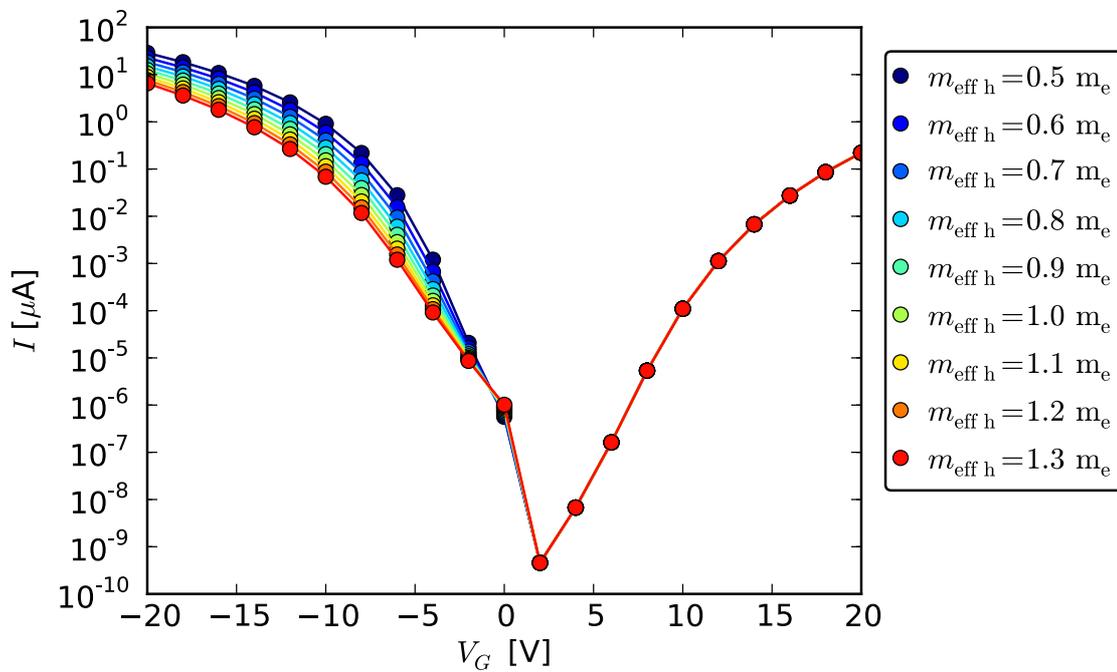


Abbildung 4.24: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Löchermasse  $m_{\text{eff } h}$

## Temperatur

Der Einfluss der Temperatur  $T$  ist auf die Fermi-Dirac-Verteilung (Gleichung 3.3) zurückzuführen. Sobald die Temperatur ansteigt, sind mehr Elektronen über und mehr Löcher unterhalb der Fermi-Energie zu finden. Damit sind mehr Ladungsträger in einem Energiebereich mit einer hohen Transmission. Es wird also mit steigender Temperatur ein steigender Stromfluss erwartet. In Abbildung 4.25 zeigt sich dies auch sehr deutlich.

Bei kleinen Gatespannungen ist der Einfluss besonders stark. Dies ist auf die breiten Potential-Barrieren zurückzuführen (vergleiche Abbildung 4.6). Im Energiebereich unterhalb der Schottky-Barriere ist das Tunneln so fast unmöglich (vergleiche Abbildung 4.7). Somit fließt bei sehr niedrigen Temperaturen nur ein verschwindend geringer Strom im Bereich um  $V_G = 0$  V. Eine Temperaturerhöhung hat hier somit eine sehr starke Auswirkung, da die Ladungsträger in Energiebereiche gehoben werden, in denen ein Tunneln möglich ist.

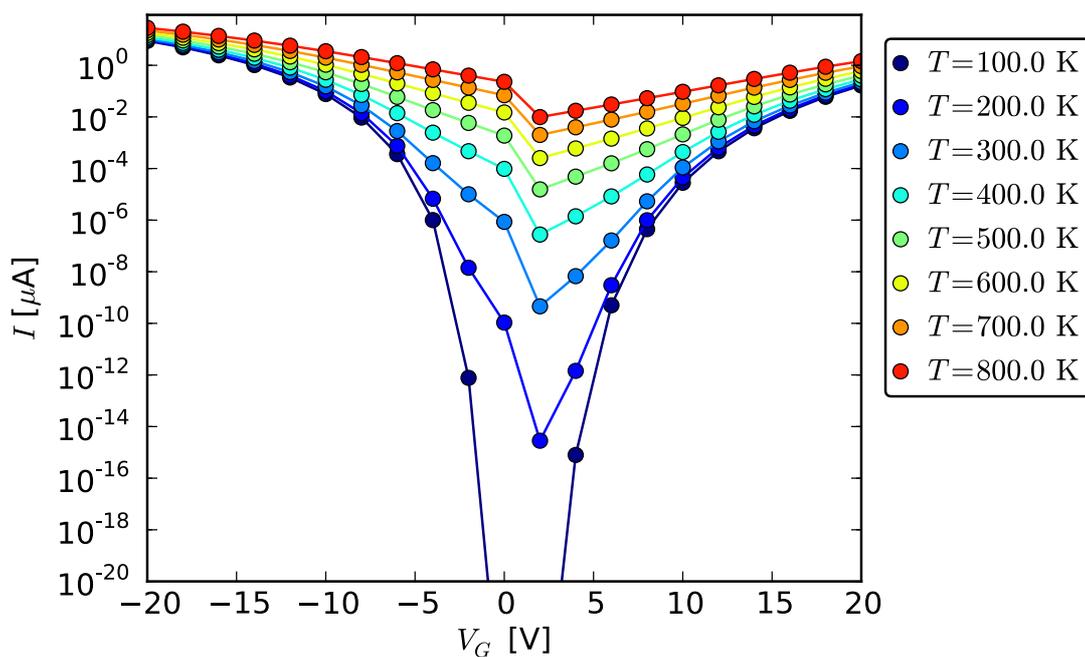


Abbildung 4.25: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Temperatur  $T$

Im Bereich der hohen Gatespannungen ist wiederum der Einfluss der Temperatur deutlich kleiner. Hier ist die Energiebarriere auch im gesamten betrachteten Energiebereich deutlich schmaler. Die Ladungsträger können also schon bei niedrigen Temperaturen mit einer hohen Wahrscheinlichkeit tunneln. Wird nun die

Temperatur erhöht, besitzen die freien Ladungsträger mehr Energie, die Transmission nimmt aber dadurch nur geringfügig zu.

Insgesamt ist die Abhängigkeit von der Temperatur sehr stark ausgeprägt. Da in den Kontakten des Nanodrahtes sehr hohe Stromdichten auftreten, ist mit einer lokalen Erwärmung des Transistors zu rechnen. Dies ist besonders in Regionen hoher Gatespannungen der Fall. Die genauen Temperaturen sind jedoch an diesem kleinen Bauteil ohne eine Verfälschung messtechnisch kaum zu erfassen. Eine möglichst genaue Kenntnis der Temperatur im Nanodraht ist dennoch sehr wichtig, um einen Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Strom-Spannungs-Kennlinien zu ermöglichen.

### **Schottky-Barriere**

Die Schottky-Barriere ist der wichtigste Parameter, der für die Konstruktion des Potentials benötigt wird. Von ihr hängt direkt die Höhe der Energie-Barriere ab (Gleichung 3.12). In der Literatur findet man  $0,63\text{ eV} \leq \Phi_{\text{SB}_e} \leq 0,77\text{ eV}$  und  $0,35\text{ eV} \leq \Phi_{\text{SB}_h} \leq 0,49\text{ eV}$  für das makroskopische System  $\text{Ni}_2\text{Si}$  [16, 17, 10]. Durch die besonderen Verhältnisse bei einem nanodrahtbasierenden Transistor ist jedoch davon auszugehen, dass diese Werte Abweichungen unterliegen. Als Ursache sind besonders die hohe elektrische Feldstärke an den Kontakten und die Größendimension im Nanometerbereich zu nennen. Auch die unterschiedliche kristallographische Ausrichtung im Bereich der Kontakte hat einen starken Einfluss [16]. Ebenfalls kann die Temperatur, bei der die Eindiffusion des Nickels in das Silizium stattfindet, die Höhe der Schottky-Barriere beeinflussen [11]. Als weitere mögliche Einflussparameter werden zum Beispiel geometrische Faktoren und Inhomogenitäten in der Kontaktfläche diskutiert [19, 20, 10]. Der Einfluss der Schottky-Barriere der Elektronen ist in Abbildung 4.26 und der der Löcher in Abbildung 4.27 gezeigt.

Deutlich ist zu erkennen, dass ein Senken von  $\Phi_{\text{SB}}$  den Stromfluss über den gesamten Teilbereich einer Ladungsträgersorte stark ansteigen lässt. Durch die Verschiebung der Potentialbarriere zu niedrigeren Energien, sind mehr Ladungsträger in der Lage diese zu überwinden. Diese Verschiebung ist auch der Grund für die sehr gleichmäßige Änderung, da die Transmissionsfunktion sich nicht in ihrer Form verändert, sondern ebenfalls nur verschoben wird.

Ein interessanter Effekt ist die Veränderung des Stromminimums. So wird dieses bei Verringerung der Schottky-Barriere der Elektronen zu negativen Gatespannungen verschoben. Im Bereich der Löcherleitung zeigt sich genau das gegenteilige Verhalten.

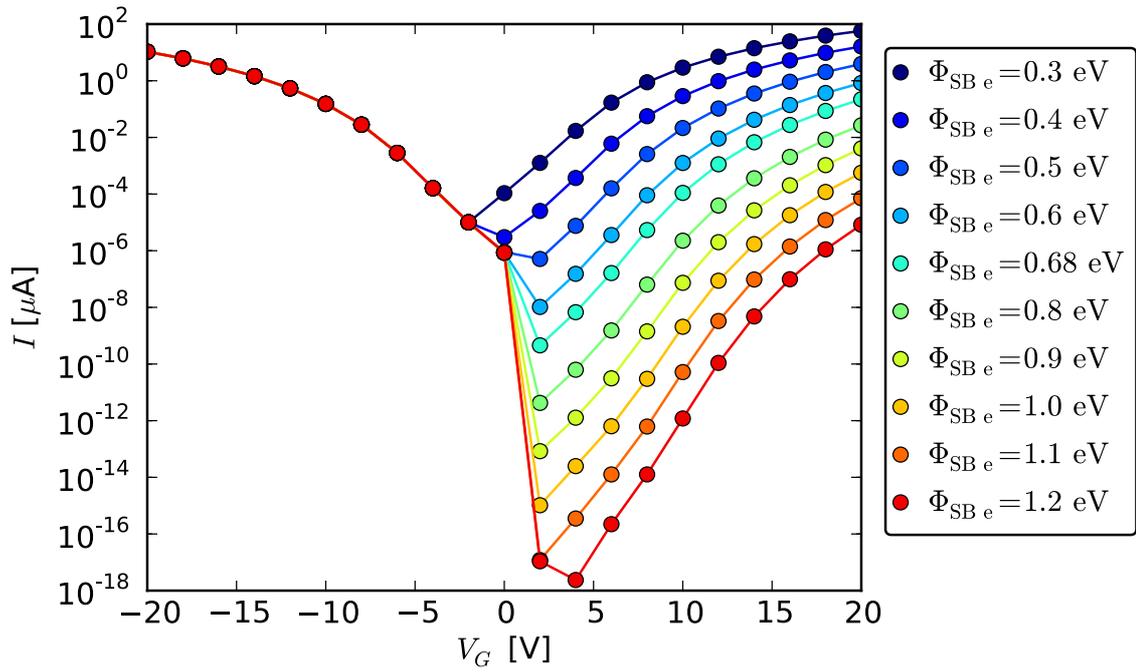


Abbildung 4.26: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Schottky-Barriere  $\Phi_{\text{SB}e}$  für Elektronen

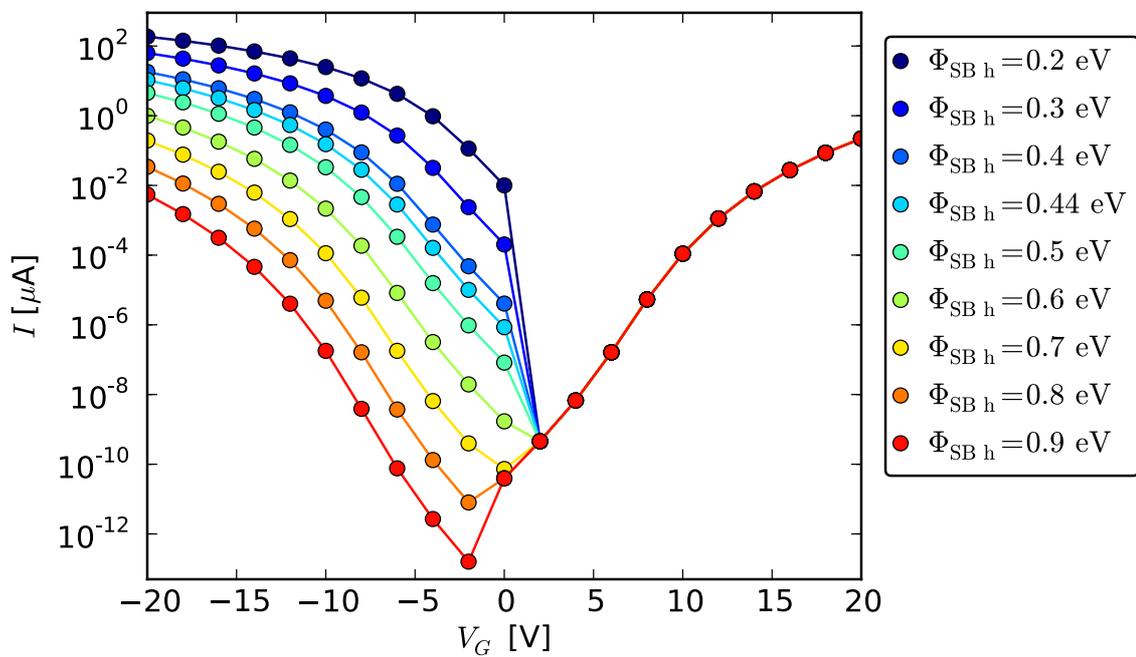


Abbildung 4.27: Abhängigkeit der Strom-Spannungs-Kennlinie von der Schottky-Barriere  $\Phi_{\text{SB}h}$  für Löcher

Das Minimum wird zu positiven Gatespannungen verschoben. Die Verschiebung entsteht durch die Kombination der von den Elektronen und Löchern transportierten Ströme. Da bei geringen Gatespannungen die Anteile beider Ladungsträgerarten am Gesamtstrom in einer ähnlichen Größenordnung liegen, kann durch eine Veränderung der Barrieren die dominierende Art wechseln. Besonders gut wäre ein solcher Effekt bei gleichzeitiger gegensätzlicher Änderung der beiden Schottky-Barrieren zu erkennen. Dies ist zu erwarten, da die Schottky-Barriere der Elektronen und der Löcher durch die Größe der Bandlücke miteinander verknüpft wird.

# 5 ZUSAMMENFASSUNG, SCHLUSSFOLGERUNGEN UND AUSBLICK

In dieser Arbeit wurde das Multiskalenmodell von Nozaki et al. [15] zur Beschreibung des Stromflusses in nanodrahtbasierten SB-FET systematisch untersucht. Ziele waren dabei einerseits zu bestimmen, welche Bedingungen an die Genauigkeit der verwendeten Eingangsparameter gestellt werden. Außerdem sollten Vorhersagen über optimale Material- und Geräteparameter getroffen werden. Abschließend wurde die Frage beantwortet, ob die Bestimmung von physikalischen Parametern aus einzelnen gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien möglich ist.

Für eine umfassende systematische Untersuchung war eine Neuimplementierung des Modells nötig. In der Programmiersprache Python wurde ein Simulationsprogramm erstellt, das in der Lage ist, eine sehr große Anzahl von Berechnungen in relativ kurzer Zeit durchzuführen. Dies konnte zum einen durch die Verwendung eines Server-Client-System erreicht werden, wodurch die rechenintensiven Aufgaben auf viele Rechner verteilt werden können. Zum anderen ermöglichte die parallele Programmierung der Clients eine sehr gute Auslastung moderner Rechner mit mehreren Prozessorkernen.

Zum Beginn der Untersuchung wurde gezeigt, dass die Simulationsparameter so gewählt werden können, dass sie keinen Einfluss auf die weitere Analyse haben. Dies ermöglicht die sinnvolle Untersuchung der Eingangsparameter.

Als erster interessanter Effekt konnte gezeigt werden, dass bei kleinen Radien  $r$  der Stromfluss mit Abnahme der Querschnittsfläche des Nanodrahtes  $S$  zunimmt (Abbildung 5.1(a)). In Kombination mit der Analyse der Oxidschichtdicke  $t_{\text{ox w}}$  auf dem Nanodraht ergibt sich eine mögliche Anwendung dieses Effektes. Mit der Hilfe einer Wärmebehandlung könnte die aktive Region im Inneren des Nanodrahtes verringert werden, wenn die Oxidschicht sich nach innen ausbreitet. Dies würde eine Erhöhung des Stromflusses zur Folge haben. Insgesamt könnte das eine einfache Möglichkeit darstellen, die Stromdichte eines Transistors mit sehr dünnen Nanodrähten zu steigern.

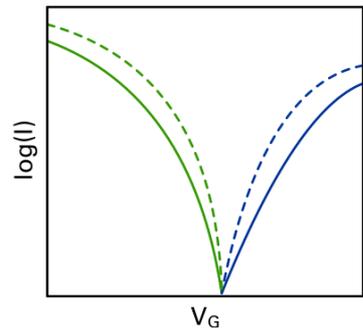
Der Einfluss der Leiterlänge  $L$  ist wie zu erwarten sehr gering. Somit sind selbst große Fehler in der Längenangabe tolerierbar, wenn experimentelle und berechnete Strom-Spannungs-Kennlinien verglichen werden sollen. Auch bei der Ermittlung der Schichtdicke des Gateoxides  $t_{\text{oxG}}$  ist der zu erwartende Messfehler für die theoretische Betrachtung nicht hinderlich. Jedoch kann durch eine gezielte Verringerung der Schichtdicke die Wirkung des Gatefeldes auf den Nanodraht verbessert werden und ein höherer Strom fließt bei gleicher angelegter Gate-spannung (Abbildung 5.1(b)). Die mögliche Verformung der Nanodrähte während der Herstellung des Transistors kann ebenfalls als unproblematisch betrachtet werden.

Die Rechnungen zeigen, dass der Einfluss der Temperatur  $T$  auf die Strom-Spannungs-Kennlinie im Bereich kleiner Gatespannungen sehr groß ist (Abbildung 5.1(h)). Im Bereich des Überganges zwischen den metallischen Kontakten und dem Halbleiter ist durch die hohen Stromdichten mit einer lokalen Aufheizung zu rechnen. Somit kann die für die Rechnungen benötigte Temperatur des Nanodrahtes erheblich von der Umgebungstemperatur abweichen. Um dennoch eine Relation zwischen gemessenen und berechneten Kurven herstellen zu können, wäre die Messung in einer Thermostatkammer nötig. Dadurch könnte der mögliche Temperaturbereich im Inneren des Nanodrahtes reduziert werden.

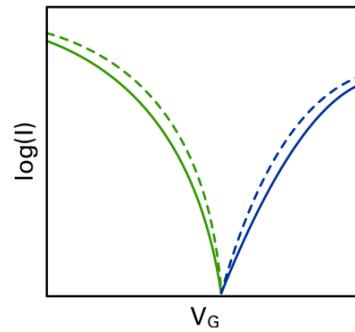
Die Abhängigkeit von der Ladungsträgermasse  $m_{\text{eff}}$  ist in Abbildung 5.1 (c) und (d) schematisch dargestellt. Die Werte aus der Literatur sind uneinheitlich und zeigen deutliche gegenseitige Abweichungen. Auch die Abhängigkeit der Ladungsträgermasse von der Temperatur erschwert es, einen exakten Wert für den Vergleich mit einem Experiment festzulegen.

Bei der Betrachtung der Schottky-Barrieren für Elektronen  $\Phi_{\text{SB}e}$  (Abbildung 5.1(e)) und Löcher  $\Phi_{\text{SB}h}$  (Abbildung 5.1(f)) wurden auch signifikante Abweichungen im Bereich der Literaturwerte gefunden. In Abbildung 5.1(g) wird gezeigt, welche Veränderung durch die Verknüpfung der beiden Schottky-Barrieren durch die Größe der Bandlücke zu erwarteten ist. Insgesamt ist neben der Temperatur die Höhe der Schottky-Barriere eine der einflussreichsten Größen in dieser Simulation.

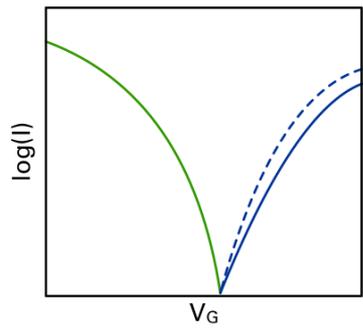
Die effektiven Ladungsträgermassen  $m_{\text{eff}}$  und die Schottky-Barrieren  $\Phi_{\text{SB}}$  wären Parameter, bei der eine einfache Methode zu ihrer Bestimmung sehr hilfreich wäre. Es bestand die Idee, sie durch das Anfitzen von einzelnen berechneten Strom-Spannungs-Kennlinien an gemessene zu bestimmen.



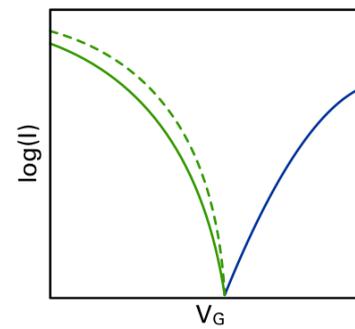
(a) Verkleinerung des Nanodrahtradiuses  $r$



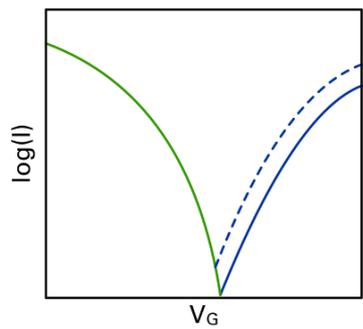
(b) Verkleinerung der Höhe des Gateoxides  $t_{\text{ox G}}$



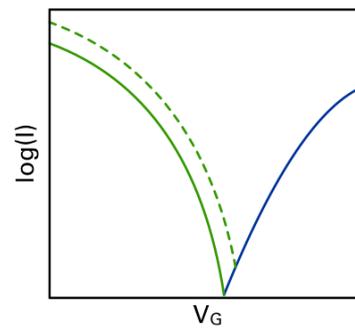
(c) Verkleinerung der Elektronenmasse  $m_{\text{eff e}}$



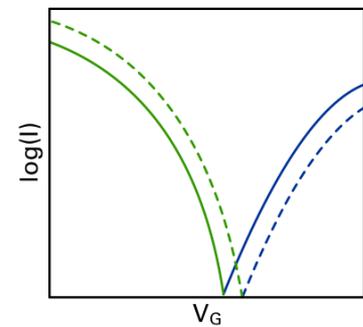
(d) Verkleinerung der Löchermasse  $m_{\text{eff h}}$



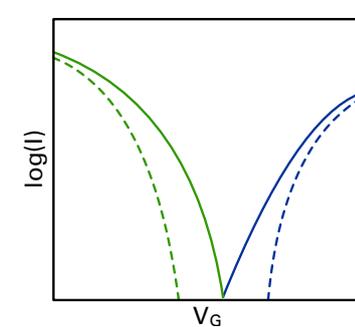
(e) Verkleinerung der Höhe der Schottky-Barriere für Elektronen  $\Phi_{\text{SB e}}$



(f) Verkleinerung der Höhe der Schottky-Barriere für Löcher  $\Phi_{\text{SB h}}$



(g) Kombiniertes Verhalten beim Verkleinern der Höhe der Schottky-Barriere für Elektronen



(h) Senkung der Temperatur  $T$

Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der wichtigsten ermittelten Trends durch die Veränderung unterschiedlicher Parameter. Die durchgezogenen Linien repräsentieren die Basis-Strom-Spannungs-Kennlinie (Abschnitt 4.2) und die gestrichelte die resultierende Kurve. Der **grüne** Anteil ist durch die Löcherleitung dominiert und der **blaue** Anteil durch die Elektronenleitung.

Jedoch könnte eine solche Anpassung nur in Abhängigkeit des jeweils anderen Parameters, des Nanodrahtradius und der Temperatur erfolgen. Die ermittelten Werte wären somit wahrscheinlich ungenauer als die momentanen Literaturwerte. Somit muss eine Bestimmung dieser Parameter durch Anfitten einzelner Strom-Spannungs-Kennlinien praktisch ausgeschlossen werden. Die Hoffnung, dass charakteristische Veränderungen der Kurvenform zu beobachten sind, um weitere Faktoren für einen Fit zu finden, hat sich nicht bestätigt.

Es zeigt sich damit, dass das Modell bei dem jetzigen Stand des Wissens nicht für eine einfache Bestimmung der Schottky-Barriere oder der effektiven Ladungsträgermasse durch Anfitten einzelner Strom-Spannungs-Kennlinien geeignet ist. Jedoch können anhand der gefundenen Zusammenhänge experimentell beobachtete Änderungen an den Strom-Spannungs-Kennlinien besser beurteilt werden.

Die wichtigste Motivation zur Untersuchung dieses Modells stellte der mögliche Einsatz der SB-FET als Sensoren dar. Um für diesen Einsatzfall noch besser relevante Aussagen treffen zu können, müsste das Modell um weitere Effekte erweitert werden. Ein wichtiger Aspekt ist die Umgebung in der ein solcher Sensor eingesetzt werden würde. So ist damit zu rechnen, dass der Nanodraht nicht wie in dem hier betrachteten Fall von Luft umgeben ist, sondern von einem Lösungsmittel. Durch die Änderung der Umgebung entstehen viele neu zu berücksichtigende Fragestellungen. Wie ist der Einfluss des pH-Wertes oder der Ionenkonzentration des Lösungsmittels? Auch die Ausbildung einer elektrostatischen Doppelschicht müsste berücksichtigt werden.

Für die Herstellung eines Biosensors müsste auch das Verhalten des Transistors auf das Anlagern der zu detektierenden Biomoleküle untersucht werden. Dazu sind genaue Kenntnisse der elektrischen Eigenschaften dieser Moleküle von Bedeutung. Hier bestünde die Möglichkeit, einen weiteren Schritt in das Multiskalenmodell einzubauen, um diese Daten zu generieren.

Es zeigt sich, dass die Möglichkeiten dieses Modells noch nicht ausgeschöpft sind. Durch einige Ergänzungen könnte es bei weiteren Fragestellungen helfen, Antworten zu finden und experimentelle Ergebnisse mit theoretischen Zusammenhängen zu verknüpfen.

# ABBILDUNGSVERZEICHNIS

2.1	Bänderdiagramm eines Schottky-Kontakts mit einem n-Halbleiter vor und nach dem Kontaktieren . . . . .	10
2.2	Bänderdiagramm eines Schottky-Kontakts in Durchlassrichtung und in Sperrrichtung geschalten. . . . .	11
2.3	Silizium-Nanodraht mit axial ausgeprägten Nickelsilizid Kontakten. . . . .	14
2.4	Schottky-Barrieren-Feldeffekt-Transistor basierend auf einem Silizium-Nanodraht mit axial eingewachsenen Nickelsilizid-Kontakten. . . . .	14
2.5	Strom-Spannungs-Kennlinie eines siliziumnanodrahtbasierten unpassivierten SB-FETs. . . . .	15
2.6	Leiterlängenabhängiges $L$ Verhalten von siliziumnanodrahtbasierten SB-FETs . . . . .	15
3.1	Schematische Darstellung der Potential-Bbarriere und Transportwege der Elektronen $e^-$ und der Löcher $h^+$ bei unterschiedlichen Gatespannungen $V_G$ mit genauer Betrachtung der Potential-Barriere bei positiver Gatespannung. . . . .	18
3.2	3-D-Modell eines SB-FETs mit unten liegender Gate-Elektrode . . . . .	20
4.1	Schema des Programmablaufs . . . . .	27
4.2	Schematische Darstellung zweier elektrischer Potentiale bei unterschiedlichen Gatespannungen . . . . .	28
4.3	Ausgangsbarriere für den linken und rechten Kontakt . . . . .	28
4.4	Ausgangsbarriere kombiniert mit dem Potential zur Potential-Barriere der Elektronen für den linken und rechten Kontakt . . . . .	29
4.5	Ausgangsbarriere kombiniert mit dem Potential zur Potential-Barriere der Löcher für den linke und rechte Kontakt . . . . .	30

4.6	Potential-Barrieren im Bereich des linken und rechten Kontakts für Elektronen und Löcher bei unterschiedlichen Gatespannungen $V_G$	32
4.7	Die Transmissionsfunktion $\bar{T}(E)$ von Elektronen und Löchern in Abhängigkeit der Energie bei unterschiedlichen Gatespannungen $V_G$	33
4.8	$I$ - $V_G$ -Kennlinie für Elektronen- und Löcherströme	33
4.9	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie vom Gitterabstand $a$	35
4.10	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie vom Grundpotential $\Phi_L$	36
4.11	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie vom Grundpotential $\Phi_R$	37
4.12	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der oberen Summationsgrenze $E_{\max}$	38
4.13	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der unteren Summationsgrenze $E_{\min}$	38
4.14	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Anzahl der Gitterpunkte $N_c$ in der Leiterregion	39
4.15	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie vom Radius $r$ des Nanodrahtes	41
4.16	Abhängigkeit des Stromflusses vom Radius $r$ des Nanodrahtes bei positiver und negativer Gatepannung	42
4.17	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Dicke der Oxidschicht $t_{\text{oxw}}$ auf dem Nanodraht, wobei gilt $t_{\text{oxw}} + r = 10 \text{ nm}$	43
4.18	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Dicke der Oxidschicht $t_{\text{oxw}}$ auf dem Nanodraht, wobei gilt $r = 10 \text{ nm}$	44
4.19	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Länge $L$ der Leiterregion	45
4.20	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Schichtdicke des Gateoxids $t_{\text{oxG}}$	46
4.21	Abhängigkeit des Stromflusses von der Höhe des Gateoxids $t_{\text{oxG}}$ bei positiver und negativer Gatepannung	46
4.22	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Stärke der Verformung des Nanodrahtes zu einer Ellipse	47

4.23	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Elektronenmasse $m_{\text{eff}e}$ . . .	50
4.24	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Löchermasse $m_{\text{eff}h}$ . . . . .	50
4.25	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Temperatur $T$ . . . . .	51
4.26	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Schottky-Barriere $\Phi_{\text{SB}e}$ für Elektronen . . . . .	53
4.27	Abhängigkeit der $I$ - $V_G$ -Kennlinie von der Schottky-Barriere $\Phi_{\text{SB}h}$ für Löcher . . . . .	53
5.1	Schematische Darstellung der wichtigsten ermittelten Trends durch die Veränderung unterschiedlicher Parameter. . . . .	57

# LITERATURVERZEICHNIS

- [1] BARBER, H. D.: Effective mass and intrinsic concentration in silicon. In: *Solid-State Electronics* 10 (1967), Nr. 11, 1039
- [2] BÖHMER, E. ; EHRHARDT, D. ; OBERSCHELP, W.: *Elemente der angewandten Elektronik*. 16. Auflage. Wiesbaden : Vieweg+Teubner, 2010
- [3] BÜTTIKER, M. ; IMRY, Y. ; LANDAUER, R. ; PINHAS, S.: Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. In: *Physical Review B* 31 (1985), Nr. 10, 6207
- [4] DATTA, S.: Nanoscale device modeling: the Green's function method. In: *Superlattices and Microstructures* 28 (2000), Nr. 4, 253
- [5] DATTA, S.: *Quantum Transport: Atom to Transistor*. 4. Auflage. Cambridge : University Press, 2009
- [6] FISHER, D. ; LEE, P.: Relation between conductivity and transmission matrix. In: *Physical Review B* 23 (1981), Nr. 12, 6851
- [7] GÖBEL, H.: *Einführung in die Halbleiter-Schaltungstechnik*. 4. Auflage. Berlin : Springer, 2011
- [8] GREEN, M. A.: Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon. In: *Journal of Applied Physics* 67 (1990), Nr. 6, 2944
- [9] HERGERT, W. (Hrsg.) ; DÄNE, M. (Hrsg.) ; ERNST, A. (Hrsg.): *Lecture Notes in Physics*. Bd. 642: *Computational Materials Science - From Basic Principles to Material Properties*. 1. Auflage. Berlin : Springer, 2004
- [10] HO, P. S.: Chemical bonding and Schottky barrier formation at transition metal-silicon interfaces. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 1 (1983), Nr. 2, 745
- [11] HUANG, S. ; LU, F.: Investigation on the barrier height and inhomogeneity of nickel silicide Schottky. In: *Applied Surface Science* 252 (2006), Nr. 12, 4027
- [12] LANDAUER, R.: Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. In: *Philosophical Magazine* 21 (1970), Nr. 172, 863
- [13] LU, W. ; LIEBER, C. M.: Semiconductor nanowires. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 39 (2006), Nr. 21, R387

- [14] MOHR, P. J. ; TAYLOR, B. N. ; NEWELL, D. B.: CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006. In: *Reviews of Modern Physics* 80 (2008), Nr. 2, 633
- [15] NOZAKI, D. ; KUNSTMANN, J. ; ZÖRGIEBEL, F. ; WEBER, W. M. ; MIKOLAJICK, T. ; CUNIBERTI, G.: Multiscale modeling of nanowire-based Schottky-barrier field-effect transistors for sensor applications. In: *Nanotechnology* 22 (2011), Nr. 32, 325703
- [16] OTTAVIANI, G. ; TU, K. ; MAYER, J.: Barrier heights and silicide formation for Ni, Pd, and Pt on silicon. In: *Physical Review B* 24 (1981), Nr. 6, 3354
- [17] REES, N. V. ; MATTHAI, C. C.: The Schottky barrier height at the NiSi<sub>2</sub>-Si(111) interface. In: *Semiconductor Science and Technology* 4 (1989), Nr. 5, 412
- [18] ROSENBLUETH, A. ; WIENER, N.: The Role of Models in Science. In: *Philosophy of Science* 12 (1945), Nr. 4, 316
- [19] SARPATWARI, K. ; DELLAS, N. S. ; AWADELKARIM, O. O. ; MOHNEY, S. E.: Extracting the Schottky barrier height from axial contacts to semiconductor nanowires. In: *Solid-State Electronics* 54 (2010), Nr. 7, 689
- [20] SULLIVAN, J. P. ; TUNG, R. T. ; PINTO, M. R. ; GRAHAM, W. R.: Electron transport of inhomogeneous Schottky barriers: A numerical study. In: *Journal of Applied Physics* 70 (1991), Nr. 12, 7403
- [21] TUNG, R. T.: Recent advances in Schottky barrier concepts. In: *Materials Science and Engineering R* 35 (2001), Nr. 1-3, 1
- [22] VENUGOPAL, R. ; PAULSSON, M. ; GOASGUEN, S. ; DATTA, S. ; LUNDSTROM, M. S.: A simple quantum mechanical treatment of scattering in nanoscale transistors. In: *Journal of Applied Physics* 93 (2003), Nr. 9, 5613
- [23] WEBER, W. M. ; DUESBERG, G. S. ; GRAHAM, A. P. ; LIEBAU, M. ; UNGER, E. ; CHÈZE, C. ; GEELHAAR, L. ; LUGLI, P. ; RIECHERT, H. ; KREUPL, F.: Silicon nanowires: catalytic growth and electrical characterization. In: *physica status solidi (b)* 243 (2006), Nr. 13, 3340
- [24] WEBER, W. M. ; GEELHAAR, L. ; GRAHAM, A. P. ; UNGER, E. ; DUESBERG, G. S. ; LIEBAU, M. ; PAMLER, W. ; CHÈZE, C. ; RIECHERT, H. ; LUGLI, P. ; KREUPL, F.: Silicon-nanowire transistors with intruded nickel-silicide contacts. In: *Nano letters* 6 (2006), Nr. 12, 2660–6
- [25] WEBER, W. M. ; GEELHAAR, L. ; UNGER, E. ; CHÈZE, C. ; KREUPL, F. ; RIECHERT, H. ; LUGLI, P.: Silicon to nickel-silicide axial nanowire heterostructures for high performance electronics. In: *physica status solidi (b)* 244 (2007), Nr. 11, 4170