



TECHNISCHE UNIVERSITÄT  
CHEMNITZ

---

Fakultät für Naturwissenschaften  
Institut für Physik



---

Fraunhofer-Institut für Elektronische Nanosysteme  
Abteilung Back-End of Line

MASTERARBEIT

**Feldeffekttransistoren auf Basis von  
Kohlenstoffnanoröhrchen:  
Vergleich zwischen atomistischer  
Simulation und Bauelementesimulation**

B.Sc. Florian Fuchs

Chemnitz, den 20. November 2014

Gutachter: Prof. Dr. Stefan E. Schulz  
Technologien der Nanoelektronik  
Prof. Dr. Angela Thränhardt  
Theoretische Physik – Simulation neuer Materialien

**Fuchs, Florian**

*Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen:*

*Vergleich zwischen atomistischer Simulation und Bauelementesimulation*

Masterarbeit, Technische Universität Chemnitz, November 2014

99 Seiten, 34 Abbildungen, 4 Tabellen, 97 Quellen

Stichworte: Kohlenstoffnanoröhrchen (CNT), Feldeffekttransistor (FET), Multiskalenmodellierung, Dichtefunktionaltheorie (DFT), Erweiterte Hückelmethode (EHT), Elektronischer Transport, Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus (NEGF), numerische Bauelementesimulation

## **Zusammenfassung**

Kohlenstoffnanoröhrchen (CNTs) sind vielversprechende Kandidaten für neuartige nanoelektronische Bauelemente, wie zum Beispiel Transistoren für Hochfrequenzanwendungen. Simulationen CNT-basierter Bauelemente sind dabei unverzichtbar, um deren Anwendungspotential und das Verhalten in Schaltungen zu untersuchen. Die vorliegende Arbeit konzentriert sich auf einen Methodenvergleich zwischen einem atomistischen Ansatz basierend auf dem Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus und einem Modell zur numerischen Bauelementesimulation, welches auf der Schrödinger-Gleichung in effektiver-Massen-Näherung basiert. Ein Transistor mit zylindrischem Gate und dotierten Kontakten wird untersucht, wobei eine effektive Dotierung genutzt wird.

Es wird gezeigt, dass die Beschränkungen des elektronischen Transports durch Quanteneffekte im Kanal nur mit dem atomistischen Ansatz beschrieben werden können. Diese Effekte verhindern das Auftreten von Band-zu-Band-Tunnelströmen, die bei der numerischen Bauelementesimulation zu größeren Aus-Strömen und einem leicht ambipolaren Verhalten führen. Das Schaltverhalten wird hingegen von beiden Modellen vergleichbar beschrieben. Durch Variation der Kanallänge wird das Potential des untersuchten Transistors für zukünftige Anwendungen demonstriert. Dieser zeigt bis hinab zu Kanallängen von circa 8 nm einen Subthreshold-Swing von unter 80 mV/dec und ein An/Aus-Verhältnis von über  $10^6$ .

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>VI</b>
<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>VII</b>
<b>Konstanten</b>	<b>IX</b>
<b>Mathematische Notation</b>	<b>X</b>
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen</b>	<b>5</b>
2.1. Geometrische Struktur von Kohlenstoffnanoröhrchen . . . . .	7
2.2. Elektronische Eigenschaften von Kohlenstoffnanoröhrchen . . . . .	8
2.3. Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen . . . . .	11
2.3.1. Möglichkeiten der Kontaktierung . . . . .	11
2.3.2. Geometrie des Gates . . . . .	14
2.3.3. Kenngrößen zur Transistor-Charakterisierung . . . . .	15
<b>3. Simulationsmethoden</b>	<b>17</b>
3.1. Grundlegende Begriffe . . . . .	20
3.1.1. Schrödinger-Gleichung, Wellen- und Basisfunktion . . . . .	20
3.1.2. Elektronendichte . . . . .	21
3.1.3. Zustandsdichte . . . . .	21
3.2. Atomistische Elektronenstrukturrechnung . . . . .	22
3.2.1. Dichtefunktionaltheorie . . . . .	22
3.2.2. Erweiterte Hückelmethode . . . . .	23
3.3. Quantentransport . . . . .	24
3.3.1. Streumechanismen und Transportregime . . . . .	24
3.3.2. Landauer-Büttiker-Formalismus . . . . .	25
3.3.3. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus . . . . .	26
3.4. Numerische Bauelementesimulation . . . . .	28
3.4.1. Schrödinger-Gleichung in effektiver-Massen-Näherung . . . . .	28
3.4.2. Beschreibung der Kontakte . . . . .	29
3.4.3. Lösung der Poisson-Gleichung . . . . .	30
3.4.4. Selbstkonsistente Rechnung . . . . .	30

<b>4. Entwicklung des Modellsystems</b>	<b>33</b>
4.1. Beschaffenheit des Kanals . . . . .	33
4.2. Eigenschaften der Gate-Elektrode . . . . .	35
4.3. Eigenschaften der Source- und Drain-Elektroden . . . . .	36
<b>5. Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>39</b>
5.1. Numerische Bauelementesimulation . . . . .	39
5.1.1. Extraktion der Parameter . . . . .	39
5.1.2. Einfluss verschiedener Faktoren auf das Kohlenstoffnanoröhrchen .	40
5.1.3. Transistorverhalten und Transistorregime . . . . .	42
5.2. Atomistische Simulation . . . . .	44
5.2.1. Einfluss verschiedener Faktoren auf das Kohlenstoffnanoröhrchen .	44
5.2.2. Transistorverhalten und Transistorregime . . . . .	46
5.2.3. Einfluss der Dotierung . . . . .	50
5.3. Variation der Kanallänge und Methodenvergleich . . . . .	52
5.3.1. Diskussion der Transfercharakteristiken . . . . .	52
5.3.2. Verhalten von An/Aus-Verhältnis und Subthreshold-Swing . . . . .	57
5.4. Variation der Gate-Länge bei fester Kanallänge und Methodenvergleich . .	58
5.5. Abschließende Bemerkungen und Vergleich mit Literatur . . . . .	61
<b>6. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick</b>	<b>63</b>
<b>A. Elektronische Struktur des (7,0)-Kohlenstoffnanoröhrchens</b>	<b>67</b>
<b>B. Simulationsparameter</b>	<b>69</b>
B.1. Parameter für Rechnungen mit Dichtefunktionaltheorie . . . . .	69
B.2. Parameter für Rechnungen mit erweiterter Hückelmethode . . . . .	70
B.3. Verwendete Randbedingungen zur Lösung der Poisson-Gleichung . . . . .	71
<b>C. Vergleich zwischen Dichtefunktionaltheorie und erweiterter Hückelmethode</b>	<b>72</b>
C.1. Physikalische Betrachtung . . . . .	72
C.2. Rechenzeit und Konvergenz . . . . .	74
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>75</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>85</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>86</b>
<b>Danksagung</b>	<b>87</b>
<b>Selbstständigkeitserklärung</b>	<b>89</b>

## Abkürzungsverzeichnis

ATK	Atomistix ToolKit	Atomistix ToolKit
CNT	Carbon Nanotube	Kohlenstoffnanoröhrchen
CNTFET	Carbon Nanotube Field-Effect Transistor	Feldeffekttransistor auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen
DFT	Density Functional Theory	Dichtefunktionaltheorie
EHT	Extended Hückel Theory	Erweiterte Hückelmethode
ENAS	Fraunhofer Institute for Electronic Nano Systems	Fraunhofer Institut für elektronische Nanosysteme
GGA	Generalized Gradient Approximation	Verallgemeinerte Gradientennäherung
LBF	Landauer-Büttiker Formalism	Landauer-Büttiker-Formalismus
LDA	Local Density Approximation	Lokale Dichtenäherung
MOSFET	Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor	Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistor
NDS	Numerical Device Simulation	Numerische Bauelementesimulation
NEGF	Non-equilibrium Green Function Formalism	Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus
TBM	Tight-Binding Model	Modell starker Bindung
ZfM	Center for Microtechnologies	Zentrum für Mikrotechnologien

## Symbolverzeichnis

$a$	Gitterkonstante des Graphengitters
$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$	Basisvektoren des Graphengitters im Ortsraum
$a_{c-c}$	Abstand benachbarter Kohlenstoffatome
$\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$	Basisvektoren des Graphengitters im reziproken Raum
$\beta$	Wichtungparameter im Rahmen der EHT
$\mathbf{c}$	CNT-Chiralitätsvektor
$C$	Wichtungparameter im Rahmen der EHT
$d_{\text{cnt}}$	CNT-Durchmesser
$D$	Zustandsdichte
$D_{\text{local}}$	Lokale Zustandsdichte
$D_{\text{proj}}$	Projizierte Zustandsdichte
$E$	Energie
$E_c$	Leitungsbandkante
$E_F$	Fermienergie
$E_{\text{gap}}$	Bandlücke
$E_{\text{ion}}$	Wichtungparameter im Rahmen der EHT
$E_v$	Valenzbandkante
$E_{\text{xc}}$	Austausch- und Korrelationsfunktional
$\epsilon_{\text{diel}}$	Relative Permittivität eines Dielektrikums
$f$	Fermi-Verteilung
$G$	Leitfähigkeit
$\mathbf{H}$	Hamilton-Matrix
$\eta$	Slater-Koeffizient im Rahmen der EHT
$I_{\text{btbt}}$	Band-zu-Band-Tunnelstrom
$I_{\text{ds}}$	Drain-Source-Strom
$I_{\text{off}}$	Aus-Strom

SYMBOLVERZEICHNIS

$I_{\text{on}}$	An-Strom
$I_{\text{therm}}$	Thermisch angeregter Strom
$I_{\text{tun}}$	Tunnelstrom
$k$	Impuls
$l$	Drehimpulsquantenzahl
$L$	Systemlänge
$L_{\text{ch}}$	Länge des Kanals
$L_{\text{cnt}}$	Länge einer CNT-Einheit
$L_{\text{elec}}$	Länge einer Elektroden-Einheit
$L_{\text{g}}$	Länge der Gate-Elektrode
$L_{\text{spac}}$	Länge des Spacerbereichs
$\lambda_{\text{coh}}$	Kohärenzlänge
$\lambda_{\text{el}}$	Mittlere freie Weglänge
$m$	Erster chiraler Index, Magnetquantenzahl
$m^*$	Effektive Masse
$m_{\text{th}}$	Subthreshold-Anstieg
$n$	Zweiter chiraler Index, Hauptquantenzahl, Elektronendichte
$N_{\text{atom}}$	Anzahl von Kohlenstoffatomen
$N_{\text{cnt}}$	Anzahl von CNT-Einheiten
$N_{\text{orb}}$	Anzahl von Orbitalen
$\phi$	Basisfunktion
$\Phi_{\text{Sb}}$	Höhe einer Schottky-Barriere
$\psi$	Wellenfunktion
$\Psi$	Wellenfunktion in Basisdarstellung
$q_{\text{dop}}$	Höhe der Dotierung
$\mathbf{r}$	Ortsvektor
$r_{\text{cnt}}$	Radius eines CNT
$R$	Widerstand, Radiale Funktion, Reflexionswahrscheinlichkeit
$R_{\text{on/off}}$	An/Aus-Verhältnis
$\mathbf{S}$	Überlappmatrix
$S_{\text{th}}$	Subthreshold-Swing

$\mathbf{t}$	CNT-Translationsvektor
$t_{\text{diel}}$	Dicke des Dielektrikums
$T$	Transmission
$\mathbf{T}$	Transmissionsmatrix
$T_{\text{el}}$	Elektronentemperatur
$V$	Potential
$V_{\text{ds}}$	Drain-Source-Spannung
$V_{\text{gs}}$	Gate-Source-Spannung
$V_{\text{H}}$	Hartree-Potential
$V_{\text{th}}$	Schwellspannung
$x_{\text{cell}}$	Größe der Einheitszelle in x-Richtung
$y_{\text{cell}}$	Größe der Einheitszelle in y-Richtung
$Y$	Kugelflächenfunktion
$z$	Position entlang der Symmetrieachse eines Transistormodells

## Konstanten

$i = \sqrt{-1}$	Imaginäre Einheit
$\pi \approx 3.141\,592\,653\,590$	Kreiszahl
$e \approx 1.602\,177 \times 10^{-19} \text{ C}$	Elementarladung
$G_0 = \frac{2e^2}{h} \approx 7.748\,092 \times 10^{-5} \text{ A V}^{-1}$	Leitfähigkeitsquant
$h \approx 6.626\,070 \times 10^{-34} \text{ J s}$	Plancksches Wirkungsquantum
$\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.054\,572 \times 10^{-34} \text{ J s}$	Reduziertes Plancksches Wirkungsquantum
$k_{\text{B}} \approx 1.380\,649 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$	Boltzmann-Konstante
$m_{\text{e}} \approx 9.109\,383 \times 10^{-31} \text{ kg}$	Ruhemasse des Elektrons

## Mathematische Notation

$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen, $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$
$a$	Skalar
$\mathbf{a}$	Vektor mit Einträgen $a_i$
$\mathbf{A}$	Matrix mit Einträgen $A_{ij}$
$\hat{A}$	Operator
$a^*, \mathbf{a}^*, \mathbf{A}^*$	Komplex konjugiertes Skalar, Vektor, Matrix
$\nabla$	Nabla-Operator
$\delta_{ij}$	Kronecker-Delta mit $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{falls } i \neq j \end{cases}$
$\delta(\cdot)$	Deltadistribution
$f(\cdot)$	Funktion
$f[\cdot]$	Funktional
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Skalarprodukt
$\cdot \times \cdot$	Kreuzprodukt
$\text{Sp}[\cdot]$	Spur einer quadratischen Matrix, $\text{Sp}[\mathbf{A}] = \sum_i A_{ii}$
$\text{ggT}(\cdot, \cdot)$	Größter gemeinsamer Teiler

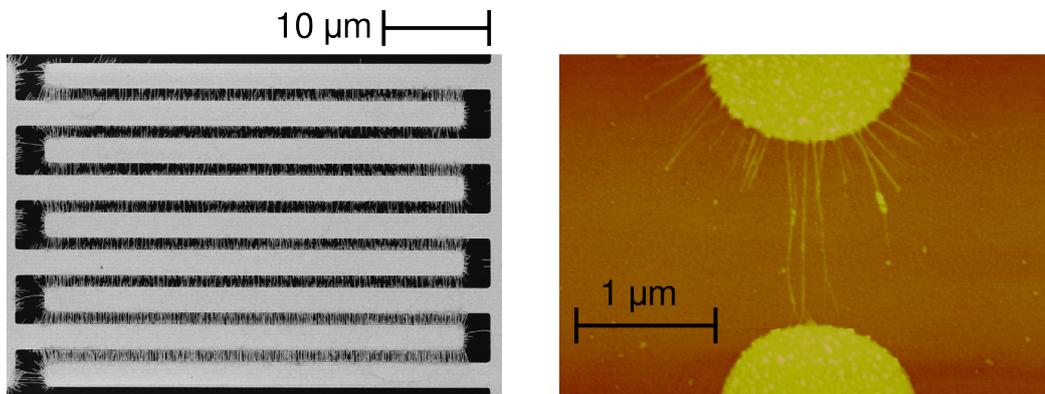
# 1. Einleitung

Zentraler Baustein heutiger elektronischer Geräte sind Transistoren. Seit den ersten Bipolar-Transistoren im Jahr 1947 wurden Transistoren in rasantem Tempo weiterentwickelt [1] und ihre Größe dabei zunehmend verkleinert. Das ermöglicht die Integration einer größeren Anzahl an Transistoren pro Chip und entsprechend dem bekannten *Moore'schen Gesetz* verdoppelt sich diese Anzahl aller zwei Jahre. Silizium hat sich dabei zum Material der Wahl bei der Transistorproduktion entwickelt. Der Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistor (engl. Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor, MOSFET) ist seit der erstmaligen experimentellen Realisierung im Jahr 1960 [2] von großer Relevanz und machte um das Jahr 2010 zusammen mit darauf aufbauenden Systemen circa 90 % des Halbleitermarktes aus [3].

Mit zunehmender Miniaturisierung spielen die physikalischen Grenzen auf Silizium basierender Transistoren eine steigende Rolle [3, 4]. Zu den Herausforderungen gehört hier zum Beispiel die gezielte Dotierung der Transistoren, da sowohl die Position der Dotierungsatome als auch die Konzentration der Dotierung bei kleinen Systemen schwierig zu kontrollieren ist. Auch Tunnelströme durch die Oxidschicht und Leckströme im Aus-Zustand des Transistors verschlechtern dessen Eigenschaften. Mit kürzer werdenden Kanallängen kommt es außerdem zu Kurzkanaleffekten wie dem sogenannten Drain-Induced-Barrier-Lowering. Das Potential des Drain-Kontakts beeinflusst hier die Höhe der Barriere im Kanal und verschlechtert die elektrostatische Kontrolle durch das Gate.

Ein möglicher Ansatz zur Überwindung der Hindernisse bei der Miniaturisierung ist die *Silicon-on-Insulator-Technologie*, bei welcher zur Reduzierung der Kapazität des Transistors eine Isolatorschicht unterhalb des Siliziumkanals eingefügt wird und der Transistor so leichter schaltet [5]. Alternativ dazu werden Feldeffekttransistoren mit *mehreren Gates* untersucht, wodurch die elektrostatische Kontrolle des Kanals verstärkt werden kann [6]. Auch *Silizium-Nanodrähte* sind im Fokus der Forschung, da sie aufgrund der nahezu eindimensionalen Struktur die Verwendung zylindrischer Gate-Strukturen ermöglichen und in diesem Fall die elektrostatische Kontrolle des Kanals optimal ist [7]. Es ist naheliegend, auch andere quasi-eindimensionale Materialien aufgrund der Möglichkeit zylindrischer Gate-Strukturen zu untersuchen. *Kohlenstoffnanoröhrchen* (engl. Carbon Nanotubes, CNTs) sind dabei vielversprechende Vertreter. CNTs ermöglichen hohe Stromdichten, sind aufgrund ihrer stabilen Struktur unanfällig gegenüber Elektromigration und zeigen eine hohe Ladungsträgermobilität [8]. Infolge einer großen freien Weglänge der Elektronen im  $\mu\text{m}$ -Bereich [9–11] zeigen sie außerdem ballistische Transporteigenschaften selbst für relativ große Transistorlängen, wie sie bereits hergestellt werden können [12–14]. Schließlich sind Feldeffekttransistoren auf Basis von CNTs (engl. Carbon Nanotube Field-Effect Transistor, CNTFETs) auch für Hochfrequenzanwendungen sehr vielversprechend [15].

## 1. EINLEITUNG



**Abb. 1.1.:** Am ZfM Chemnitz hergestellte CNTFETs. Zahlreiche CNTs zwischen Kamm-Elektroden sind in der linken Aufnahme (mit dem Rasterelektronenmikroskop) zu sehen und einzelne CNTs zwischen zwei Finger-Elektroden in der rechten Aufnahme (mit dem Rasterkraftmikroskop). Zur Verfügung gestellt von J. TITTMANN-OTTO (ZfM Chemnitz).

Auch am Fraunhofer Institut für elektronische Nanosysteme (ENAS) sowie dem Zentrum für Mikrotechnologien (ZfM) in Chemnitz werden CNTFETs, im Rahmen des Center for Advancing Electronics Dresden, untersucht [16–18]. Der Fokus der experimentellen Arbeit liegt dabei auf der Integration einer großen Zahl von CNTFETs auf einem Wafer (Wafer-Level-Integration). Beispielhaft dafür sind in Abb. 1.1 mikroskopische Aufnahmen von integrierten CNTs bei Verwendung zweier unterschiedlicher Layouts zu sehen. Für ein grundlegendes Verständnis der CNT-Bauelemente und die Interpretation der experimentellen Ergebnisse sind theoretische Untersuchungen notwendig. Von besonderer Relevanz ist dabei unter anderem der Einfluss von Defekten auf die Transporteigenschaften [19] und die Änderung der elektronischen Eigenschaften bei uniaxialer Verformung [20]. Auch der Einfluss unterschiedlicher Metalle zur CNT-Kontaktierung [21, 22] oder zur Dekoration von CNTs werden am ENAS und ZfM untersucht [23, 24]. Um einen direkten Vergleich mit den experimentellen Messungen zu ermöglichen, ist die Simulation ganzer Transistoren, also eine Bauelementesimulation erforderlich.

An dieser Stelle setzt die vorliegende Arbeit an. Atomistische Ansätze sind für die Untersuchungen essentiell, da diese die quantenmechanischen Eigenschaften des Systems umfassend berücksichtigen. Ein auf dem Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus (Non-equilibrium Green function formalism, NEGF) basierender Ansatz wird in dieser Arbeit zur Untersuchung eines CNTFET genutzt. Jedoch gehen atomistischen Simulationen mit hohem Rechenaufwand einher, weshalb atomistische Ansätze für Routinerechnungen, etwa zum Schaltkreisentwurf, ungeeignet sind. Ein anderer Ansatz ist hier die numerische Bauelementesimulation (engl. Numerical Device Simulation, NDS), welche numerisch vergleichsweise effizient ist. Die NDS beruht jedoch auf Parametern, die a priori nicht bekannt sind und erlaubt

oftmals nur begrenzte Einsicht in die Funktion des Bauelements. In dieser Arbeit werden Rechnungen mit einem Modell zur NDS genutzt, welches die Schrödinger-Gleichung in effektiver-Massen-Näherung selbstkonsistent mit der Poisson-Gleichung löst. Als Parameter für die effektive Behandlung des CNTs gehen hier Parameter wie die effektive Masse und die Lage der Bänder ein. Zusätzlich basiert das verwendete Modell auf einer parametrisierten Beschreibung der Kontakte, wobei die Parameter meist an experimentelle Daten angepasst werden. Die vorliegende Arbeit geht hier einen anderen Weg. Statt experimenteller Daten werden die Ergebnisse der atomistischen Simulation als Referenz verwendet. Dadurch ist es möglich, die Grenzen der NDS aufzuzeigen. Bei der Entwicklung zukünftiger und Weiterentwicklung vorhandener Modelle kann dieses Wissen einfließen und so eine physikalisch fundierte Beschreibung ermöglicht werden.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert.

## **Kap. 2 Kohlenstoffnanoröhrchen und darauf basierende Transistoren**

Das im Mittelpunkt der Arbeit stehende Material, die CNTs, werden ausgehend von Graphen vorgestellt. Anschließend werden Grundlagen zu Feldeffekttransistoren und insbesondere CNTFETs besprochen.

## **Kap. 3 Simulationsmethoden**

Es werden verschiedene Ansätze zur Transistorsimulation vorgestellt. Anschließend werden die für die atomistischen Rechnungen verwendeten Methoden, Dichtefunktionaltheorie (engl. Density Functional Theory, DFT) und die erweiterte Hückelmethode (engl. Extended Hückel Theory, EHT), vorgestellt und wesentliche Aspekte des Landauer-Büttiker-Formalismus (Landauer-Büttiker Formalism, LBF) und des NEGF erläutert. Auch der verwendete Ansatz zur NDS wird vorgestellt.

## **Kap. 4 Entwicklung des Modellsystems**

Das Modellsystem dieser Arbeit wird präsentiert. Es wird das halbleitende (7,0)-CNT als Kanal verwendet, welcher mit n-dotierten (7,0)-CNTs kontaktiert ist. Ein zylindersymmetrisches Gate wird untersucht, wobei Vakuum als Dielektrikum verwendet wird.

## **Kap. 5 Ergebnisse und Diskussion**

Parameter für die Rechnungen mit der NDS werden aus atomistischen Rechnungen extrahiert. Darauf aufbauend wird mit dem verwendeten Modell zur NDS ein Transistor der Länge 10 nm untersucht. Das Eintreten des Band-zu-Band-Tunneleffekts wird für hohe negative Spannungen beobachtet, was zu leicht ambipolarem Verhalten und der Anhebung des Aus-Stroms führt. Anschließend werden atomistische Rechnungen auf Basis des NEGF durchgeführt. Hier wird die Entstehung lokalisierter Zustände im Kanal beobachtet, wodurch der Band-zu-Band-Tunnelstrom verhindert wird. Das An/Aus-Verhältnis des Transistors ist dadurch größer als durch die NDS vorhergesagt wird. Durch systematische Variation der

## 1. EINLEITUNG

Kanal- und der Gate-Länge werden anschließend weitere Einsichten in das Verhalten des Bauelements ermöglicht und das Potential des Transistors für zukünftige Anwendungen demonstriert.

### **Kap. 6 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick**

Die Ergebnisse werden zusammengefasst und Ansätze für zukünftige Arbeiten aufgezeigt.

### **Anhänge**

Zusätzliche Informationen können in den Anhängen gefunden werden. Hier wird auf die elektronische Struktur des (7,0)-CNTs eingegangen und die verwendeten Parameter der atomistischen Untersuchungen vorgestellt. Außerdem erfolgt ein Vergleich zwischen DFT und EHT in Hinblick auf die Transistorsimulation.

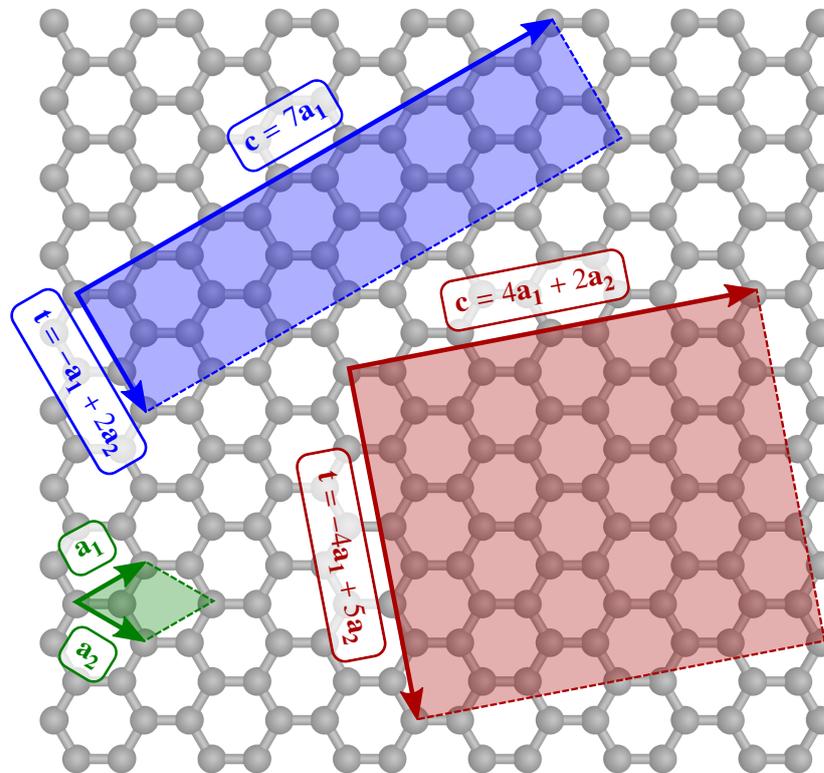
## 2. Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen

Kohlenstoff ist eines der vielseitigsten Materialien der Natur. Es ist Grundbaustein des organischen Lebens, bildet weichen Graphit oder mit Diamant das härteste Material der Welt. Die Ursache für dieses facettenreiche Auftreten ist in der atomaren Struktur des Kohlenstoffs zu finden, bei welchem das  $2s$ - und die  $2p$ -Orbitale energetisch nah beieinander liegen und daher leicht hybridisieren können [8]. Diese Hybridorbitale bilden kovalente Bindungen miteinander und bestimmen so die Struktur des Materials.

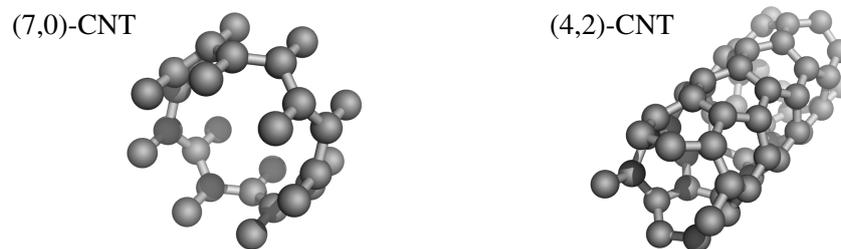
- Bei der  $sp^1$ -Hybridisierung ist eines der  $2p$ -Orbitale mit dem  $2s$ -Orbital hybridisiert. Die resultierenden Hybridorbitale bilden kovalente Bindungen. Zusätzlich bilden die  $p$ -Orbitale  $\pi$ -Bindungen, welche vergleichsweise schwach sind. Bei Stoffen mit  $sp^1$ -Hybridisierung, wie zum Beispiel Ethin, liegt daher eine Dreifachbindung vor.
- Im Fall der  $sp^2$ -Hybridisierung sind zwei der  $2p$ -Orbitale mit dem  $2s$ -Orbital hybridisiert. Die drei energetisch gleichen Hybridorbitale liegen in einer Ebene und bilden Winkel von  $120^\circ$ . Die Hybridorbitale bilden kovalente Bindungen mit den Nachbaratomen. Es entstehen sechseckige Strukturen, wie sie zum Beispiel bei Benzol, Graphen oder CNTs gefunden werden können. Das dritte  $2p$ -Orbital befindet sich in diesen Strukturen senkrecht zur Kohlenstoffstruktur und ist wesentlich für den Elektronentransport.
- Schließlich können auch alle drei  $2p$ -Orbitale mit dem  $2s$ -Orbital hybridisieren und man spricht von  $sp^3$ -Hybridisierung. Die vier Hybridorbitale ordnen sich tetraedrisch an und die Kohlenstoffatome bilden so Diamant. Da in diesem Fall vier Hybridorbitale pro Atom vorhanden sind, und diese jeweils zu kovalenten Bindungen mit den Nachbaratomen führen, ist Diamant sehr stabil.

Im Folgenden wird die Struktur (Kap. 2.1) und die elektronischen Eigenschaften (Kap. 2.2) von CNTs erläutert. Da die Eigenschaften der in der Arbeit untersuchten CNTs stark mit denen von Graphen zusammenhängen, wird Graphen jeweils kurz vorgestellt und anschließend Rückschlüsse auf CNTs gezogen. Darauf aufbauend werden in Kap. 2.3 für die Arbeit wesentliche Aspekte zu Feldeffekttransistoren und insbesondere CNTFETs besprochen.

## 2. FELDEFFEKTRANSISTOREN AUF BASIS VON KOHLENSTOFFNANORÖHRCHEN



**Abb. 2.1.:** Graphenebene, die sich aus den Basisvektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  ergibt. Die durch  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  aufgespannte Fläche  $A_{\text{basis}}$  ist grün eingezeichnet. Die Einheitszellen des (7,0)-CNTs (blau) und (4,2)-CNTs (rot) sind zusammen mit den jeweiligen Vektoren  $\mathbf{t}$  und  $\mathbf{c}$  dargestellt. Rollt man die jeweils markierte Fläche entlang  $\mathbf{c}$  auf, so erhält man die CNT-Einheitszellen aus Abb. 2.2.



**Abb. 2.2.:** Einheitszellen zweier CNTs.

## 2.1. Geometrische Struktur von Kohlenstoffnanoröhrchen

### Graphen

Graphen besteht aus hexagonal angeordneten Kohlenstoffatomen, wie sie in Abb. 2.1 dargestellt sind. Zwei benachbarte Kohlenstoffatome sind dabei  $a_{c-c} \approx 0.142$  nm voneinander entfernt [25]. Das Graphengitter kann mit einer zweiatomigen Basis beschrieben werden. Es kann daher in zwei Untergitter unterteilt werden, die zueinander verschoben sind und sich jeweils aus den *Basisvektoren*

$$\mathbf{a}_1 = a_{c-c} \left( \frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad \text{und} \quad \mathbf{a}_2 = a_{c-c} \left( \frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.1)$$

ergeben. Diese spannen eine Fläche  $A_{\text{basis}} = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| = \frac{1}{2} \sqrt{3} a^2$  auf (dargestellt in Abb. 2.1). Für die Gitterkonstante folgt  $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3} a_{c-c} \approx 0.256$  nm.

### Kohlenstoffnanoröhrchen

Die Struktur eines CNTs ergibt sich gedanklich durch Aufrollen eines streifenförmigen Ausschnitts der Graphenebene, wobei die Breite des Streifens durch den *Chiralitätsvektor*  $\mathbf{c}$  bestimmt ist. Dieser lässt sich als ganzzahlige Linearkombination aus den Basisvektoren über

$$\mathbf{c} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 \quad (2.2)$$

darstellen. Die Koeffizienten  $m$  und  $n$  identifizieren eindeutig jedes CNT, weshalb für die Benennung bestimmter CNTs die Bezeichnung  $(m, n)$ -CNT gebräuchlich ist. Aufgrund der Periodizität der Atompositionen entlang dieses Streifens lässt sich eine Einheitszelle des CNTs finden. Die Länge dieser Einheitszelle ist dabei durch den Translationsvektor mit

$$\mathbf{t} = m'\mathbf{a}_1 + n'\mathbf{a}_2 \quad (2.3)$$

bestimmt. Die Koeffizienten  $m'$  und  $n'$  ergeben sich aus den Bedingungen, dass  $\mathbf{t}$  senkrecht auf  $\mathbf{c}$  steht und  $m', n' \in \mathbb{N}$  gilt, als

$$m' = -\frac{2n + m}{\text{ggT}(2m + n, 2n + m)} \quad \text{und} \quad n' = \frac{2m + n}{\text{ggT}(2m + n, 2n + m)} \quad (2.4)$$

Dabei ist ggT der größte gemeinsame Teiler von  $2m + n$  und  $2n + m$ . Aus den eingeführten Vektoren kann schließlich der CNT-Durchmesser  $d_{\text{cnt}}$ , die Länge der CNT-Einheitszelle  $L_{\text{cnt}}$

## 2. FELDEFFEKTRANSISTOREN AUF BASIS VON KOHLENSTOFFNANORÖHRCHEN

und die Anzahl der Kohlenstoffatome pro Einheitszelle  $N_{\text{atom}}$  berechnet werden:

$$d_{\text{cnt}} = \frac{|\mathbf{c}|}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{m^2 + mn + n^2} \quad (2.5)$$

$$L_{\text{cnt}} = |\mathbf{t}| = \frac{a \sqrt{3(m^2 + mn + n^2)}}{\text{ggT}(2m + n, 2n + m)} \quad (2.6)$$

$$N_{\text{atom}} = 2 \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{t}}{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2} = \frac{4(n^2 + nm + m^2)}{\text{ggT}(2m + n, 2n + m)} \quad (2.7)$$

Zur Illustration sind  $\mathbf{c}$  und  $\mathbf{t}$  nebst aufgespannten Flächen für das (7,0)- und (4,2)-CNT in Abb. 2.1 eingezeichnet und in Abb. 2.2 die dazugehörigen CNT-Einheitszellen – mit 28 beziehungsweise 56 Atomen – dargestellt.

## 2.2. Elektronische Eigenschaften von Kohlenstoffnanoröhrchen

### Graphen

Die Graphen-Gittervektoren im reziproken Raum erhält man über die Bedingung  $\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$  als

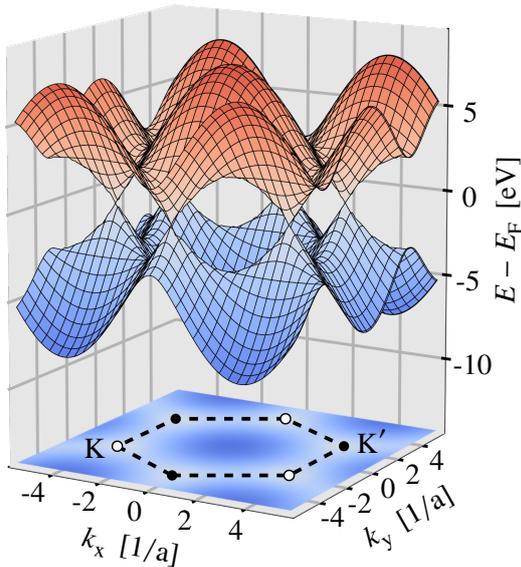
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_{\text{c-c}}} \left( \frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad \text{und} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_{\text{c-c}}} \left( \frac{1}{3}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (2.8)$$

Diese spannen ein hexagonales Gitter auf, weshalb die Brillouin-Zone von Graphen ebenfalls hexagonal ist.

Für Graphen wurde die Bandstruktur erstmals von P. R. WALLACE [26] berechnet und ist in Abb. 2.3 dargestellt. Valenz- und Leitungsband berühren sich dabei an den Gitterpunkten  $K$  und  $K'$  des reziproken Raums, weshalb Graphen metallische Eigenschaften besitzt (verschwindende Bandlücke). Nahe der Fermi-Energie  $E_F$  ist die Dispersionsrelation linear und die effektive Masse der Elektronen verschwindet, was unter anderem die hohe Elektronenmobilität bei Graphen und auch CNTs begründet.

### Kohlenstoffnanoröhrchen

Die Bandstruktur von CNTs erhält man infolge der zylinderförmigen Struktur und resultierenden Randbedingungen im Rahmen der sogenannten *Zonenfaltungsmethode* aus Schnittebenen der Graphen-Bandstruktur. Von besonderer Bedeutung ist dabei, ob die Ebenen einen der Gitterpunkte ( $K$  oder  $K'$ ) schneiden. Ist dies der Fall, so hat das CNT wie Graphen metallische Eigenschaften. Das trifft genau dann zu, wenn die Differenz der chiralen Indizes ein


**Abb. 2.3.:**

Bandstruktur von Graphen. Leitungsband (rot) und Valenzband (blau) berühren sich auf Höhe der Fermi-Energie  $E_F$  an den Gitterpunkten  $K$  und  $K'$  des reziproken Raums. Die Projektion des Valenzbandes auf die  $k_x$ - $k_y$ -Ebene ist ebenfalls eingezeichnet. Gestrichelte Linien zeigen die Brillouin-Zone und die Punkte markieren  $K$  beziehungsweise  $K'$ .

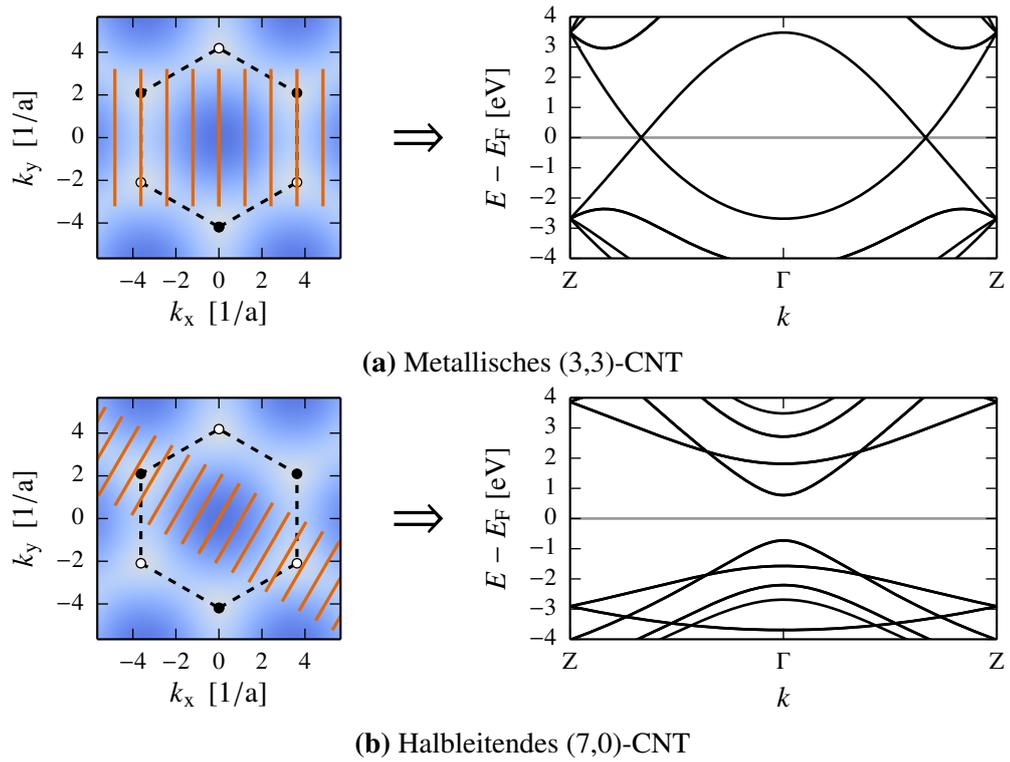
Vielfaches von drei ist [8]. In Abb. 2.4a ist die Bandstruktur des (3,3)-CNTs exemplarisch dargestellt, wobei nahe der Fermienergie wie bei Graphen die Linearität der Dispersionsrelation zu erkennen ist.

Wird  $K$  oder  $K'$  durch die Schnittebenen nicht geschnitten, besitzt das CNT keine Zustände nahe der Fermienergie. Es hat dann eine Bandlücke  $E_{\text{gap}}$  und ist halbleitend, wie in Abb. 2.4b am Beispiel des (7,0)-CNT zu sehen ist. Die Dispersionsrelation kann am  $\Gamma$ -Punkt der CNT-Bandstruktur als Parabel angenähert werden, was in Kap. 5.1 zur Extraktion der effektiven Masse genutzt wird. Für  $E_{\text{gap}}$  von halbleitenden CNTs lässt sich im Rahmen des Tight-Binding-Modells (Tight Binding Model, TBM) außerdem ein Ausdruck in Abhängigkeit des CNT-Durchmessers  $d_{\text{cnt}}$  finden [8]:

$$E_{\text{gap}} = \frac{|\gamma|a_{\text{c-c}}}{d_{\text{cnt}}} \quad . \quad (2.9)$$

Dabei ist  $\gamma$  der Hopping-Parameter.  $E_{\text{gap}}$  ist also indirekt proportional zu  $d_{\text{cnt}}$ . Für den Grenzwert  $d_{\text{cnt}} \rightarrow \infty$  (Graphen) folgt  $E_{\text{gap}} \rightarrow 0$ , was konsistent zu den Ausführungen weiter oben ist (Graphen ist metallisch).

## 2. FELDEFFEKTTTRANSISTOREN AUF BASIS VON KOHLENSTOFFNANORÖHRCHEN



**Abb. 2.4.:** Veranschaulichung des Zusammenhangs zwischen Graphen- und CNT-Bandstruktur. Diese wurden mittels der TBM berechnet, wozu in Ref. [8] weitere Details gefunden werden können. Jeweils links ist die Graphen-Bandstruktur (die Brillouin-Zone ist als schwarz gestrichelte Linien und die Gitterpunkte  $K$  und  $K'$  des reziproken Raums als Punkte eingezeichnet) und die sich für CNTs aufgrund der periodischen Zwangsbedingungen ergebenden Schnittlinien (orange) zu sehen. Die sich daraus ergebende CNT-Bandstruktur ist recht gezeigt, wobei die Fermi-Energie  $E_F$  grau eingezeichnet ist.

## 2.3. Feldeffekttransistoren auf Basis von Kohlenstoffnanoröhrchen

CNTFETs sind herausragende Kandidaten für die Anwendung in zukünftigen Schaltkreisen. Als *Kanal* des Transistors fungiert meist ein halbleitendes CNT. Der Kanal ist mit zwei Kontakten verbunden, welche als *Source*- und *Drain*-Elektroden bezeichnet werden. Damit ein Strom fließt, muss eine Potentialdifferenz zwischen den Kontakten angelegt werden, diese ist die *Drain-Source-Spannung*  $V_{ds}$ . Der Strom wird als *Drain-Source-Strom*  $I_{ds}$  bezeichnet. Zur Steuerung des Transistors wird eine *Gate-Elektrode* verwendet, die die elektronische Struktur des Kanals beeinflusst. Dabei wird die Potentialdifferenz zwischen Gate- und Source-Elektrode variiert, welche die *Gate-Source-Spannung*  $V_{gs}$  ist.

In diesem Kapitel werden wesentliche Aspekte zu CNTFETs vorgestellt. Zu Beginn werden Möglichkeiten der Kontaktierung besprochen (Kap. 2.3.1) und insbesondere die später in der Arbeit wesentliche Funktionsweise eines Transistors mit dotierten Kontakten vorgestellt. Auch auf typische Geometrien der Gate-Elektrode wird eingegangen (Kap. 2.3.2). Abschließend werden die später verwendete Kenngrößen zur Charakterisierung von CNT-FETs vorgestellt (Kap. 2.3.2) und in diesem Zusammenhang der Einfluss der Temperatur auf diese Größen besprochen.

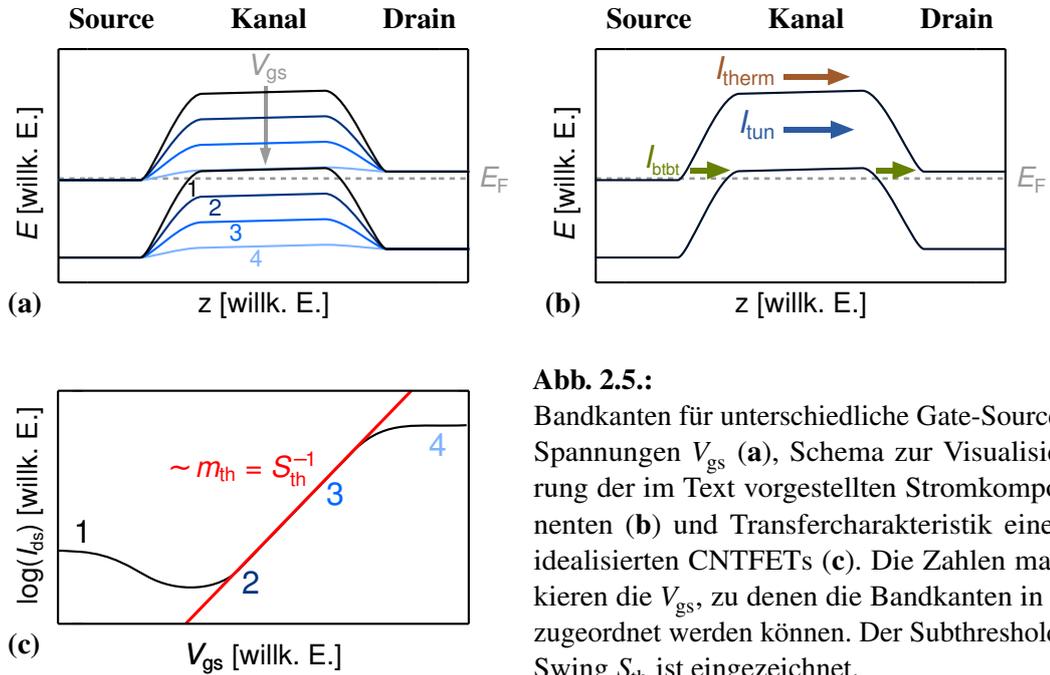
### 2.3.1. Möglichkeiten der Kontaktierung

#### Transistor mit dotierten Kontakten

In Analogie zu MOSFETs kann ein CNTFET durch Dotierung der Kontakte hergestellt werden. *Dotierung* bezeichnet die Vermehrung oder Verminderung von Elektronen in einem Halbleiter durch Fremdatome. Im Falle der Vermehrung besetzen zusätzliche Elektronen die leeren Zustände des Valenzbandes, was zu einem Anstieg der Fermienergie führt und man spricht von *n-Dotierung*. Werden Elektronen aus dem System entfernt, so entstehen Löcher und die Fermienergie sinkt, was als *p-Dotierung* bezeichnet wird. Zusätzlich entstehen durch die Fremdatome neue Zustände, was die elektronische Struktur beeinflusst. In der vorliegenden Arbeit ist dies aufgrund der verwendeten Art der Dotierung nicht relevant, da bei dieser ausschließlich die Fermienergie verschoben wird. Diese Verschiebung ist dabei auch bei Untersuchungen mit Dotierungsatomen [27–29] der vorherrschende Effekt, weshalb die Näherung dieser Arbeit gültig ist.

Die Realisierung der Dotierung kann dabei ähnlich wie im Falle von siliziumbasierten Transistoren, auch bei CNTs durch *Substitution* einzelner Atome erreicht werden. Dies wurde in zahlreichen theoretischen Arbeiten untersucht [27–29] und auch experimentell gelang es, einzelne Kohlenstoff-Atome zu ersetzen [30]. Für die Herstellung von Transistoren, insbesondere für die industrielle Produktion, ist jedoch eine Dotierung von CNTs durch Substitution aufgrund der eindimensionalen Struktur des CNTs nicht praktikabel. Hierzu müsste man gezielt in bestimmten Bereichen des CNTs die Kohlenstoff-Atome ersetzen, was

## 2. FELDEFFEKTTRANSISTOREN AUF BASIS VON KOHLENSTOFFNANORÖHRCHEN



**Abb. 2.5.:**

Bandkanten für unterschiedliche Gate-Source-Spannungen  $V_{gs}$  (a), Schema zur Visualisierung der im Text vorgestellten Stromkomponenten (b) und Transfercharakteristik eines idealisierten CNTFETs (c). Die Zahlen markieren die  $V_{gs}$ , zu denen die Bandkanten in a zugeordnet werden können. Der Subthreshold-Swing  $S_{th}$  ist eingezeichnet.

infolge der stabilen CNT-Struktur schwierig ist. Auch führt eine Störung der CNT-Struktur zu einer Senkung der Leitfähigkeit [19]. Besser geeignet ist daher eine Dotierung mittels *Funktionalisierung*, bei welcher einzelne Atome auf die CNT-Oberfläche gebracht werden. Eine experimentelle Realisierung wurde zum Beispiel von A. JAVEY ET AL. [31] demonstriert. Dabei wurde das CNT mit Palladium kontaktiert, jedoch die Bereiche zwischen Kontakten und Gate in einem anschließenden Prozessschritt mit Kalium-Atomen dotiert.

Die nun folgenden Ausführungen betrachten einen CNTFET mit n-dotierten Kontakten, welcher auch im späteren Teil der Arbeit untersucht wird. Ein solcher Transistor ähnelt einem MOSFET hinsichtlich der Funktionsweise stark, wo die Gate-Elektrode das Potential im Kanal beeinflusst. In Abb. 2.5a ist die Valenz- und Leitungsbandkante für einen solchen Transistor schematisch dargestellt. Eine positive (negative) Gate-Source-Spannung verschiebt im Kanal die Bandkanten zu niedrigeren (höheren) Energien. Da das Potential der Kontakte fest ist, resultiert für entsprechende Gate-Source-Spannungen im Kanal eine Barriere. Durch Modulation der Gate-Source-Spannung kann die Höhe der Barriere und bei angelegter Drain-Source-Spannung kann darüber der Drain-Source-Strom gesteuert werden.

Der Drain-Source-Strom setzt sich aus drei Anteilen zusammen, welche in Abb. 2.5b angedeutet sind. Elektronen, die sich aufgrund thermischer Anregung oberhalb der im Kanal befindlichen Barriere befinden, führen zu *thermisch angeregtem Strom*  $I_{therm}$ . Da Elektronen der Fermi-Statistik gehorchen, nimmt  $I_{therm}$  exponentiell mit dem Abstand zur Fermienergie  $E_F$  ab. Außerdem können Elektronen die Barriere durchtunneln, woraus ein *Tunnelstrom*  $I_{tun}$

folgt. Dieser Anteil ist vergleichsweise klein und nur für kurze Transistoren (wenige Nanometer) wesentlich. Eine dritte Komponente ist der sogenannte *Band-zu-Band-Tunnelstrom*. Dieser tritt ein, sobald die Valenzbandkante durch den Einfluss des Gates zur Fermienergie verschoben ist. Elektronen aus der Leitungsbandkante des Source-Kontakts können in die Valenzbandkante tunneln und durch erneutes Tunneln den Drain-Kontakt erreichen.

Die *Transfercharakteristik* ergibt sich durch Auftragen des Drain-Source-Stroms als Funktion der Gate-Source-Spannung und ist von zentraler Rolle bei der Einschätzung des Schaltverhaltens von Transistoren. In Abb. 2.5c ist eine idealisierte Transfercharakteristik in logarithmischer Skala dargestellt, zu welcher die Bandkanten in Abb. 2.5b zugeordnet werden können (markiert mit Zahlen 1 bis 4). Ist die Barriere im Kanal klein, so fließt ein wesentlicher Strom und der Transistor befindet sich im *An-Zustand* (Zustand 4 in Abb. 2.5). Durch Anlegen einer negativen Gate-Source-Spannung verschieben sich die Bandkanten zu höheren Energien und der thermisch angeregte Strom nimmt ab (Zustand 2 und 3 in Abb. 2.5). Der Bereich, wo der Transistor schaltet, wird als *Sperrbereich* oder *Subthreshold-Regime* bezeichnet. Hier zeigt die Transfercharakteristik in logarithmischer Darstellung ein lineares Verhalten (Abb. 2.5c). Sobald sich die Leitungsbandkante weit genug von der Fermienergie entfernt befindet, ist der Anteil des thermisch angeregten Stroms klein und der Drain-Source-Strom wird durch Tunnelströme beeinflusst, die das Ausschalten des Transistors limitieren. Infolge des Band-zu-Band-Tunnelstroms kann es dabei zu einem erneuten Anstieg des Drain-Source-Stroms kommen, falls die Valenzbandkante sich aufgrund der durch das Gate verursachten Verschiebung im Bereich der Fermienergie befindet. Dadurch kann ein leicht ambipolares Verhalten des Transistors beobachtet werden (Zustand 1 in Abb. 2.5).

### Transistor mit Schottky-Barrieren

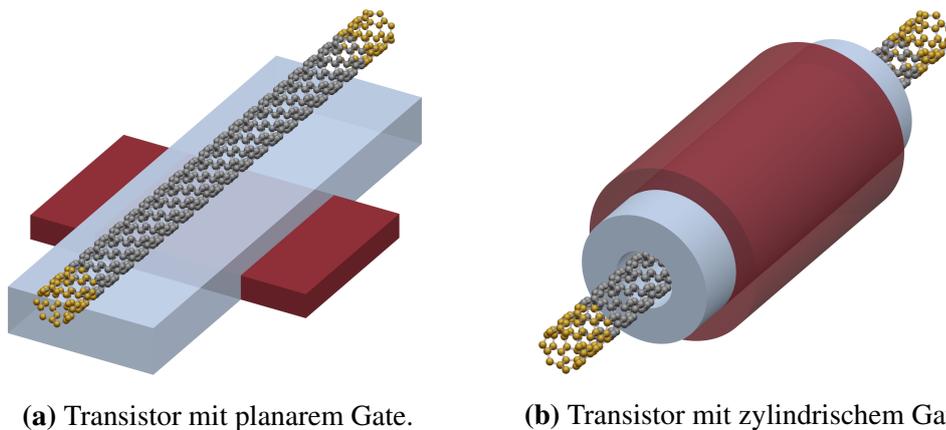
CNTFETs mit *Metallkontakten* werden wegen ihrer technologischen Relevanz intensiv untersucht [21, 22]. Wesentliche Aspekte werden nun vorgestellt, da das später verwendete Modell zur NDS ursprünglich für einen Transistor mit Metallkontakten entwickelt wurde.

An der Grenzfläche zwischen Halbleitern und Metallen können Schottky-Barrieren auftreten. Diese resultieren daraus, dass aufgrund eines Unterschieds zwischen Austrittsarbeit des Metalls  $W_{\text{met}}$  und der Elektronenaffinität des CNTs  $\Psi_{\text{cnt}}$  Elektronen vom CNT in den Metallkontakt fließen (es wird der Fall  $W_{\text{met}} > \Psi_{\text{cnt}}$  betrachtet). Nahe des Kontakts entsteht eine Verarmungsregion und damit eine Schottky-Barriere. Die Höhe dieser Schottky-Barriere ist  $\Phi_{\text{Sb}}$  und ergibt sich im Rahmen des Schottky-Mott-Modells als [32]:

$$\Phi_{\text{Sb}} = W_{\text{met}} - \Psi_{\text{cnt}} \quad . \quad (2.10)$$

Dieses Modell hat sich jedoch in der Praxis als unzureichend bei der Vorhersage von  $\Phi_{\text{Sb}}$  ergeben. Effekte wie das sogenannte Fermi-Level Pinning werden beispielsweise nicht berücksichtigt [32]. In dieser Arbeit wird  $\Phi_{\text{Sb}}$  später im Rahmen des NDS-Modells als freier Parameter zur Modellierung der Kontakte verwendet.

Im Gegensatz zu den oben diskutierten CNTFETs mit dotierten Kontakten, können CNT-FETs mit Schottky-Barrieren ein stark ambipolares Verhalten zeigen, wie beispielsweise bei Titan-Kontakten beobachtet wurde [33]. Bei Verwendung von Palladium-Kontakten sind hingegen sehr kleine Schottky-Barrieren vorhanden und die Kontakte verhalten sich wie Ohmsche Kontakte [34, 35]<sup>1</sup>. Bei atomistischen Simulationen ist die Untersuchung von Metallkontakten aufgrund der großen Anzahl der benötigten Atome sehr rechenintensiv, weshalb für den in dieser Arbeit angestrebten Methodenvergleich dotierte halbleitende CNTs zur Kontaktierung verwendet werden.



**Abb. 2.6.:** CNTFETs mit unterschiedlicher Gate-Geometrie. Effektiv dotierte Kontakte, wie sie auch im späteren Teil der Arbeit verwendet werden, sind gelb hervorgehoben. Das Dielektrikum ist hellgrau dargestellt, das Gate rot.

### 2.3.2. Geometrie des Gates

*Planare* Gate-Strukturen werden am häufigsten verwendet, da sie experimentell vergleichsweise leicht umzusetzen sind. Abb. 2.6a zeigt ein Beispiel einer solchen Geometrie. Nachteile bestehen hier in der relativ geringen Kontrolle des Kanals und langreichweitigen Streufeldern.

Für eindimensionale Strukturen, wie zum Beispiel CNTs oder Halbleiternanodrähte, stellen *zylindrische* Gate-Strukturen eine vielversprechende Alternative dar (siehe Abb. 2.6b). Diese ermöglichen eine bessere elektrostatische Kontrolle des Kanals. Hinzu kommt, dass äußere Einflüsse (zum Beispiel aufgrund anderer Transistoren) abgeschirmt werden und so eine kompaktere Integration der Transistoren ermöglicht wird [14]. Letztlich sind zylindrische Gate-Strukturen auch bei theoretischen Untersuchungen günstig. Aufgrund geringerer Streufelder wird die Verwendung eines kleineren Simulationsraums ermöglicht. Hinzu kommt,

<sup>1</sup> Wie in Ref. [36–38] gezeigt, sind für Ohmsche Kontakte auch CNTs mit großen Radien notwendig. Diese haben entsprechend Gl. (2.9) eine kleinere Bandlücke. Der Abstand zwischen Leitungsbandkante des CNTs und Fermienergie des Metalls ist kleiner und somit auch die Höhe der Schottky-Barriere.

dass der Berechnungsaufwand unter Ausnutzung der Zylindersymmetrie reduziert werden kann (in Kap. 3.4.3 wird dieser Umstand ausgenutzt). Voraussetzung ist jedoch eine kontinuierliche Beschreibung des CNTs, da die Berücksichtigung der exakten Atompositionen die Symmetrie zerstört. Ungeachtet der praktischen Schwierigkeiten konnten zylindrische Gates erfolgreich hergestellt werden [14]. In dieser Arbeit wird ein solcher CNTFET untersucht.

### 2.3.3. Kenngrößen zur Transistor-Charakterisierung

Um unterschiedliche Transistoren quantitativ vergleichen zu können, haben sich zahlreiche Kenngrößen etabliert. Die wichtigsten Größen, die auch später in der Arbeit relevant sind, werden im Folgenden vorgestellt.

#### Schwellspannung

Als *Schwellspannung*  $V_{th}$  wird diejenige Gate-Source-Spannung bezeichnet, ab welcher ein signifikanter Strom fließt. Für die Bestimmung von  $V_{th}$  aus der Transfercharakteristik hat sich keine Methode durchgesetzt und so wurden bisher zahlreiche Ansätze vorgeschlagen [39]. In Übereinstimmung mit aktuellen Arbeiten anderer Gruppen [14, 40] zu CNTFETs wird im Rahmen der Arbeit die *Extrapolationsmethode* verwendet. Dabei wird an der Transfercharakteristik in linearer Darstellung eine Tangente im Bereich des höchsten Anstiegs angelegt und deren Nullstelle bestimmt. Diese ergibt  $V_{th}$ . Die Tangente und die daraus folgende Schwellspannung ist am Beispiel der Ergebnisse dieser Arbeit in Abb. 5.6 und 5.2 eingezeichnet. Hinsichtlich der Temperaturabhängigkeit von  $V_{th}$  bei CNTFETs zeigt sich ein leichter Rückgang der Schwellspannung mit steigender Temperatur [41, 42]. Dies ist in Übereinstimmung zum Verhalten von MOSFETs [43].

#### Subthreshold-Anstieg und Subthreshold-Swing

Die logarithmisch aufgetragene Transfercharakteristik im Sperrbereich kann durch eine Gerade mit dem Anstieg  $m_{th}$ , dem sogenannten *Subthreshold-Anstieg*, beschrieben werden (eingezeichnet in Abb. 2.5c). Über das Inverse des Anstiegs ist der *Subthreshold-Swing*  $S_{th}$  definiert, welcher in der Technologie zur Einschätzung des Schaltverhaltens von Transistoren gebräuchlich ist:

$$S_{th} \equiv m_{th}^{-1} = \frac{dV_{gs}}{d\log(I_{ds}/A)} \quad (2.11)$$

$S_{th}$  wird meist in Einheiten von mV/dec angegeben („dec“ bezeichnet eine Dekade). Anschaulich ist  $S_{th}$  die Spannung, um die  $V_{gs}$  variiert werden muss, damit sich  $I_{ds}$  um eine Größenordnung ändert. Vernachlässigt man Tunnelströme, so entspricht  $I_{ds}$  dem thermisch angeregten Strom oberhalb der Barriere und kann durch den Strom in einer p-n-Diode

ausgedrückt werden [43]:

$$I_{ds} = A \left[ \exp\left(\frac{eV_{gs}}{k_B T_{el}}\right) - 1 \right] \quad \text{mit } A \geq 1 \quad . \quad (2.12)$$

Dabei ist  $k_B$  die Boltzmann-Konstante,  $e$  die Elementarladung und  $T_{el}$  die Elektronentemperatur. Die Konstante  $A$  gibt an, wie effektiv das Gate den Kanal kontrolliert und dadurch die Bandkanten verschiebt. Einsetzen in Gl. (2.11) ergibt

$$S_{th} = \ln(10) \frac{k_B T_{el}}{Ae} \quad . \quad (2.13)$$

Für ein ideales Gate ( $A = 1$ ) folgt bei Raumtemperatur ( $T_{el} = 300$  K) daraus  $S_{th}^{\max} \approx 59.53$  mV/dec. Dies stellt ein fundamentales Limit von  $S_{th}$  für klassische MOSFETs bei Raumtemperatur dar<sup>2</sup>. Bei  $T_{el} = 300$  K werden auch die Untersuchungen dieser Arbeit durchgeführt. Aus Gl. (2.13) folgt, dass kleinere Werte für  $S_{th}$  erreicht werden können und so ein schnelleres Schalten des Transistors möglich ist. Bei höheren Temperaturen verschlechtert sich  $S_{th}$  und damit die Schaltgeschwindigkeit des Transistors entsprechend. Diese Überlegungen stimmen mit den Aussagen aufwändigere Simulationen überein [41, 42].

### An- und Aus-Strom sowie das An/Aus-Verhältnis

Bei der Bestimmung des An-Stroms  $I_{on}$  und Aus-Stroms  $I_{off}$  existiert in der Literatur eine gewisse Willkür. So ist es durchaus verbreitet, die Stromstärken für fest definierte Spannungen zu bestimmen [40]. Die Transfercharakteristiken, die sich später ergeben, weisen jedoch Schwankungen im An- als auch im Aus-Bereich (vergleiche Abb. 5.2 und 5.6) auf. Um diese Schwankungen zu neutralisieren, werden im Rahmen dieser Arbeit die Mittelwerte über gewisse Spannungsbereiche gebildet. Für den An-Strom wird über die Ströme im Intervall von  $V_{gs} = (0 \text{ V}, 0.5 \text{ V})$  gemittelt, für den Aus-Strom über die Ströme im Intervall  $V_{gs} = (-0.5 \text{ V}, -1.0 \text{ V})$ . Aus An- und Aus-Strom kann das *An/Aus-Verhältnis* berechnet werden:

$$R_{on/off} = \frac{I_{on}}{I_{off}} \quad . \quad (2.14)$$

Hier ist ein hoher Wert gewünscht, da in diesem Fall das Transistorsignal im Verhältnis zum Leckstrom deutlich ist. Sehr gute experimentelle Werte für CNTFETs mit Kanallängen von 10 bis 20 nm liegen hier im Bereich von  $10^4$  bis  $10^5$  [13, 14]. Die Temperaturabhängigkeit von  $I_{on}$  und  $I_{off}$  wurde in Ref. [41, 42] intensiv untersucht.  $I_{off}$  zeigte bei diesen Untersuchungen eine weitaus höhere Abhängigkeit von der Temperatur als  $I_{on}$ , da bei  $I_{on}$  durch die größere thermische Anregung mehr Elektronen für den Ladungstransport oberhalb der Barriere zur Verfügung stehen und dies den kleinen Aus-Strom wesentlich beeinflusst. Als Resultat wird das An/Aus-Verhältnis mit steigender Temperatur kleiner und die Leistung des Transistors verschlechtert sich.

<sup>2</sup>Transistoren mit einem niedrigeren Subthreshold-Swing können zum Beispiel unter Ausnutzung von Schottky-Barrieren [44] oder des Band-zu-Band-Tunneleffekts [45] produziert werden

### 3. Simulationsmethoden

Für Simulationen existieren zahlreiche Anwendungsszenarien im Zusammenhang mit CNT-FETs. Zum einen sind sie unerlässlich bei der *Einschätzung neuer Technologien*. Ziel hierbei ist, die neue Technologie hinsichtlich ihres Leistungspotentials zu untersuchen, aber auch Fragen nach Zuverlässigkeit, Lebensdauer und anfallenden Kosten zu beantworten. Auch die *Optimierung von Transistoren* ist ein wichtiges Anwendungsfeld für Simulationen, wobei hier die optimale Kombination zahlreicher möglicher Parameter des Transistors zu finden ist. Die Ergebnisse können anschließend als Ausgangspunkt für experimentelle Arbeiten und die industrielle Fertigung dienen. Schließlich ist mittels Simulationen auch ein *tieferer Einblick in die Physik* der Transistoren möglich, was für das Verständnis experimenteller Ergebnisse essentiell ist. Da aufgrund der zunehmenden Miniaturisierung heutiger Transistoren atomare sowie quantenmechanische Effekte berücksichtigt werden müssen, ist dies von großer Wichtigkeit.

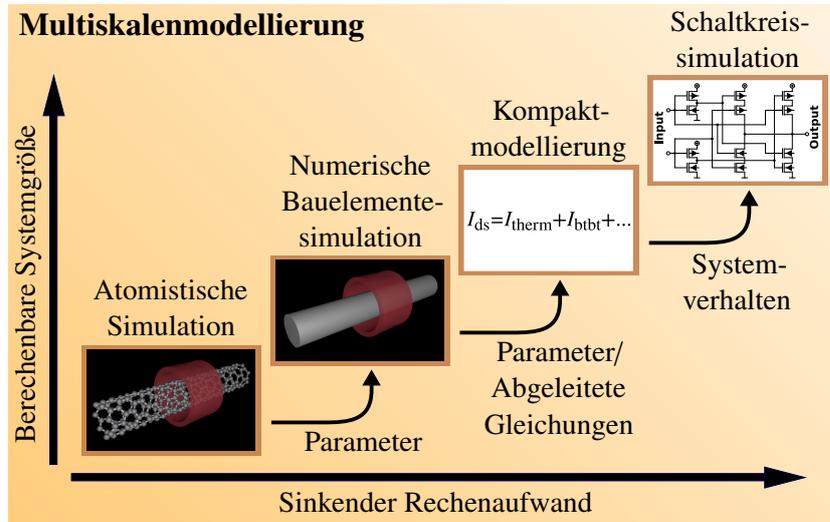
Für die theoretische Beschreibung und Simulation von Transistoren existieren verschiedene Ansätze. In Abhängigkeit von der Genauigkeit der Methode können dabei unterschiedlich große Systeme untersucht werden. Die Rechnungen können somit auf verschiedenen Skalen durchgeführt werden, wobei die jeweiligen Ansätze durch Extraktion und Übergabe von Parametern miteinander verknüpft sind. Für dieses Konzept hat sich der Begriff *Multiskalenmodellierung* etabliert. Es können dabei vier Kategorien formuliert werden, die in Abb. 3.1, geordnet nach Rechenaufwand und berechenbarer Systemgröße, dargestellt sind.

Aufgrund der sehr kleinen Abmessungen heutiger und insbesondere zukünftiger Transistoren sind Quanteneffekte bei der Beschreibung des Systemverhaltens von zunehmender Bedeutung. Um diese zu berücksichtigen, sind *atomistische Simulationen* unumgänglich<sup>1</sup>. Hierbei stellt die elektronische Struktur der einzelnen Atome den Ausgangspunkt der Rechnungen dar. Derartige Ansätze basieren meist auf dem NEGF (Kap. 3.3.3) in Kombination mit Elektronenstrukturrechnungen. In Abhängigkeit von der verwendeten Methode sind dabei keine, wie im Falle von ab initio Methoden wie DFT<sup>2</sup> (Kap. 3.2.1), oder empirische Parameter notwendig (die EHT ist hier ein Vertreter, siehe Kap. 3.2.2). Damit verbunden ist jedoch ein hoher Rechenaufwand, der diese Methoden meist nur für kleine Systeme praktikabel macht.

---

<sup>1</sup>Eine andere Bezeichnung für diese Methoden ist hier *Quantentransportsimulation*. Da in der Rechnung hauptsächlich die Elektronen der Atome wesentlich sind, ist diese Bezeichnung exakter. *Atomistische Simulation* ist im Bereich der Halbleiterphysik weit verbreitet, weshalb dieser Begriff auch in der vorliegenden Arbeit verwendet wird.

<sup>2</sup>Allerdings ist dies streng genommen nicht richtig, da das exakte Austausch- und Korrelationsfunktional unbekannt ist und die Wahl eines der vielen verfügbaren Funktionale in der Praxis prinzipiell ein freier ganzzahliger Parameter bei DFT-Rechnungen ist.



**Abb. 3.1.:** Im Text vorgestellte Ansätze zur Modellierung von CNTFETs, wobei die Achsen der groben Orientierung dienen. Die Kopplung der Methoden erfolgt durch Extraktion und Übergabe entsprechender Parameter von kleineren zu größeren Skalen.

Eine Alternative zu atomistischen Methoden stellt die NDS dar. Anstelle der exakten Atompositionen kommen hier effektive Modelle zur Beschreibung der Systemeigenschaften zum Einsatz. Dadurch ist eine wesentlich schnellere Berechnung der Systeme möglich. Allerdings sind externe Parameter notwendig, welche beispielsweise aus atomistischen Rechnungen oder im Vergleich mit experimentellen Untersuchungen bestimmt werden müssen. So ist eine Übereinstimmung zum Experiment schnell erreichbar. Die Entwicklung eines Modells zur NDS erfordert allerdings umfangreiche Kenntnisse der Physik des zu untersuchenden Systems, wohingegen atomistische Ansätze in vielen Fällen direkt physikalisch korrekte Resultate liefern. In Kap. 3.4 wird ein möglicher Ansatz der NDS, welcher in dieser Arbeit verwendet wird, vorgestellt.

Ein weitere Ansatz zur Untersuchung von Transistoren sind sogenannte *Kompaktmodelle*, die zum Beispiel auf stark vereinfachten physikalischen Überlegungen basieren können oder aber rein empirisch sind. Dadurch sind die Rechenzeiten nochmals reduziert, jedoch ist die Transferierbarkeit der Ergebnisse im Vergleich zur NDS stark eingeschränkt. Basierend auf Kompaktmodellen ermöglichen *Schaltkreissimulationen* schließlich die Beschreibung ganzer Schaltkreise mit vielen Transistoren. Einen Überblick über ausgewählte Methoden der jeweiligen Methodenkatgorie gibt Tab. 3.1.

In diesem Kapitel werden die Grundlagen der in der Arbeit verwendeten Methoden vorgestellt. Anfangs werden wichtige physikalische Begriffe eingeführt und erklärt (Kap. 3.1). Darauf aufbauend wird auf zwei Methoden der atomistischen Elektronenstrukturrechnung,

**Tab. 3.1.:** Überblick einiger Methoden zur Transistor- und Schaltkreisuntersuchung.

Modellkategorie	Theoretische Grundlagen	Ausgewählte Implementierungen
Atomistische Simulation	NEGF in Kombination mit DFT, EHT oder TBM	Atomistix ToolKit (ATK) [46–49] <sup>a</sup> , TranSIESTA [50] <sup>b</sup> , NEMO und OMEN [51]
	Gleichgewichtsansatz	GOLLUM [52] <sup>c</sup>
Numerische Bauelementesimulation	Schrödinger-Gleichung in effektiver-Massen-Näherung	M. CLAUS ET AL. [53–56] <sup>a</sup> , NEMO und OMEN [51]
	Monte-Carlo Ansatz (Lösung der Boltzmann-Transportgleichung)	S. MOTHEs [57], Sentaurus TCAD [58]
	Drift-Diffusions-Modell	TiberCAD [59], Sentaurus TCAD [58]
	Einhüllende-Funktionen-Approximation	TiberCAD [59]
Kompaktmodellierung	Physikalische Formeln	Stanford-Modell [60, 61], BSIM [62]
	Empirische Fitprozedur	TAKEUCHI ET AL. [63]
	Neuronales Netzwerk	MOHSEN ET AL. [64]
Schaltkreissimulation	Systembeschreibende Differentialgleichungen	SPICE [65] mit zahlreichen Nachfolgern und Weiterentwicklungen

<sup>a</sup> Wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendet.

<sup>b</sup> Ein Gate kann mit der aktuellen Version von TranSIESTA nicht berücksichtigt werden.

<sup>c</sup> Nichtgleichgewichtseffekte können durch geschickte Manipulation der Hamilton-Matrix in die Rechnungen mit einbezogen werden.

DFT und EHT (Kap. 3.2) eingegangen, die für die späteren NEGF-Rechnungen benötigt werden. Der NEGF wird darauf aufbauen zusammen mit dem LBF und allgemeinen Grundlagen zum elektronischen Transport in Kap. 3.3 besprochen. Eine alternative Herangehensweise zu atomistischen Methoden ist die NDS, wofür die in der Arbeit verwendete Implementierung am Ende dieses Kapitels vorgestellt wird (Kap. 3.4).

## 3.1. Grundlegende Begriffe

### 3.1.1. Schrödinger-Gleichung, Wellen- und Basisfunktion

Von zentraler Bedeutung für das Verständnis zahlreicher physikalischer Phänomene ist die von E. SCHRÖDINGER im Jahre 1926 [66] postulierte *Schrödinger-Gleichung*. Für den zeitunabhängigen Fall lautet sie

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.1)$$

$\hat{H}$  ist der *Hamilton-Operator* des betrachteten Systems,  $\psi(\mathbf{r})$  ist die ortsabhängige *Wellenfunktion*, deren Betragsquadrat die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen angibt und  $E$  ist die Energie des Elektronensystems. Ziel ist nun,  $\psi(\mathbf{r})$  zu bestimmen und daraus im Anschluss die Eigenschaften des Systems zu berechnen. Da analytische Lösungen für forschungsrelevante Systeme nicht möglich sind, werden numerische Ansätze benötigt. Durch Wahl einer geeigneten *Basis*  $\phi(\mathbf{r})$  folgt

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad , \quad (3.2)$$

so dass sich Gl. (3.1) als Matrixgleichung

$$E\mathbf{S}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{H}\boldsymbol{\psi} \quad (3.3)$$

schreiben lässt. Es handelt sich dabei um ein verallgemeinertes Eigenwertproblem für Energien  $E$  und den Eigenvektoren  $\boldsymbol{\psi}$  mit Komponenten  $\psi_i$ .  $\mathbf{S}$  nennt man *Überlappmatrix* und  $\mathbf{H}$  *Hamilton-Matrix* mit den Einträgen

$$S_{ij} = \int d\mathbf{r} \phi_i(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) \quad \text{und} \quad H_{ij} = \int d\mathbf{r} \phi_i(\mathbf{r}) \hat{H} \phi_j^*(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.4)$$

Durch geschickte Wahl der Basisfunktionen kann man dünn besetzten Matrizen, Matrizen kleiner Dimension oder leicht auswertbare Integrale erreichen und dennoch physikalisch sinnvolle Ergebnisse erzielen.

Beispiele für Basisfunktionen sind *Ebene Wellen*  $\phi = \exp(\mathbf{i}\mathbf{k}\mathbf{r})$ , mit Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und *atomzentrierte Basisfunktionen* mit  $\phi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\mathbf{r})$ .  $Y_{lm}(\mathbf{r})$  sind die Kugelflächenfunktionen und  $R_{nl}(r)$  geeignet gewählte radiale Funktionen [67]. In der Arbeit werden

atomzentrierte Basisfunktionen verwendet, was eine Unterteilung des Systems in Teilsysteme ermöglicht (bei Verwendung von ebenen Wellen, die den ganzen Simulationsraum füllen, ist dies nicht ohne Approximationen möglich). Für den NEGF in Kap. 3.3.3 können so beispielsweise Wechselwirkungen der beiden Kontakte miteinander vernachlässigt werden. Die Matrizen sind bei Verwendung von atomzentrierten Basen außerdem dünner besetzt, was zum Beispiel bei der Berechnung der Green-Funktionen die Invertierung erleichtert.

### 3.1.2. Elektronendichte

Die *Elektronendichte* beschreibt die Verteilung der Elektronen im Raum und ergibt sich aus Integration über das Betragsquadrat der Wellenfunktion

$$n(\mathbf{r}) = N \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \dots \int d\mathbf{r}_N \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad . \quad (3.5)$$

Mit den zuvor eingeführten Basisfunktionen  $\phi_i(\mathbf{r})$  lässt sie sich außerdem als

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i f(E) \phi_i(\mathbf{r}) \phi_i^*(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

$$\text{mit } f(E) = \left[ \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T_{\text{el}}}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (3.7)$$

schreiben.  $f(E)$  ist die *Fermi-Verteilung*, welche die Energieverteilung der Elektronen angibt und beachtet werden muss, da Zustände bei endlichen Temperaturen teilweise gefüllt sein können.

### 3.1.3. Zustandsdichte

Die *lokale Zustandsdichte*  $D_{\text{local}}$  gibt die Zustände in Abhängigkeit der Energie und des Ortes an:

$$D_{\text{local}}(E, \mathbf{r}) = \sum_i \delta(E - E_i) \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i^*(\mathbf{r}) \quad (3.8)$$

mit der Delta-Distribution  $\delta$ . Daraus folgt die *Zustandsdichte*

$$D(E) = \int d\mathbf{r} D_{\text{local}}(E, \mathbf{r}) \quad . \quad (3.9)$$

Die *projizierte Zustandsdichte*  $D_{\text{proj}}$  erhält man, wenn man in Gl. (3.8) statt über alle, nur über ausgewählte Zustände  $\Omega$  summiert und dann in Analogie zur Berechnung von  $D$  über den Raum integriert:

$$D_{\text{proj}}(E, \Omega) = \int d\mathbf{r} D'_{\text{local}}(E, \Omega, \mathbf{r}) \quad (3.10)$$

$$\text{mit } D'_{\text{local}}(E, \Omega, \mathbf{r}) = \sum_{i \in \Omega} \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i^*(\mathbf{r}) \delta(E - E_i) \quad . \quad (3.11)$$

$D_{\text{proj}}$  ist nützlich, um in einem heterogenen System nur die Zustände einer bestimmten Atomsorte zu bekommen. Auch kann die Wahl der Zustände auf ein räumlich begrenztes Teilsystem beschränkt werden, um so eine orts aufgelöste Zustandsdichte zu erhalten. In Kap. 5.2 wird die projizierte Zustandsdichte verwendet, um die Verteilung der Zustände entlang des Transistors zu berechnen.

## 3.2. Atomistische Elektronenstrukturrechnung

### 3.2.1. Dichtefunktionaltheorie

Eine der am weitesten verbreiteten Theorien zur Elektronenstrukturrechnung ist die DFT. Diese wird im Folgenden vorgestellt, wobei sich die Ausführungen an Ref. [68] und Ref. [21] orientieren.

Für ein Elektronensystem mit  $N_{\text{elec}}$  Elektronen ist die Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_{\text{elec}}})$  eine Funktion von  $3N_{\text{elec}}$  Koordinaten (der Spin wird im Folgenden aus Gründen der Übersichtlichkeit vernachlässigt), was für größere Systeme numerisch nicht handhabbar ist. Die Kernidee der DFT ist, anstelle der Wellenfunktion die Elektronendichte  $n(\mathbf{r})$  zu betrachten, da diese nur von drei Koordinaten abhängt.

P. HOHENBERG und W. KOHN [69] zeigten, dass für den Grundzustand die Elektronendichte  $n_0(\mathbf{r})$  äquivalent zur Wellenfunktion  $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_{\text{elec}}})$  ist und somit  $n_0(\mathbf{r})$  alle Informationen über das zu betrachtende System beinhaltet. Somit lässt sich  $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_{\text{elec}}})$  prinzipiell auch aus  $n_0(\mathbf{r})$  berechnen und als eindeutiges Funktional  $\psi_0[n_0]$  schreiben<sup>3</sup>. Dies gilt auch für die Energie des Grundzustands  $E_0[n_0]$ . Da

$$E_0[n_0] \leq E[n] \quad , \quad (3.12)$$

müsste man, um  $n_0(\mathbf{r})$  zu finden, eine Minimierung von  $n(\mathbf{r})$  hinsichtlich  $E[n]$  durchführen und könnte im Anschluss die Eigenschaften des Systems bestimmen.

In der Praxis ist diese Vorgehensweise allerdings nicht effizient, weshalb alternative Verfahren entwickelt wurden. Von ATK wird der Ansatz von W. KOHN und L. J. SHAM [70] verwendet. Dabei wird das Vielteilchenproblem durch ein System von Gleichungen ersetzt, welche jeweils nur ein Eielektronensystem beschreiben. Die Beschreibung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung erfolgt durch ein effektives Potential

$$V'(\mathbf{r}) = V_{\text{H}}(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.13)$$

Hierbei ist  $V_{\text{H}}$  das Hartree-Potential und ergibt sich aus der *Poisson-Gleichung*  $\nabla^2 V_{\text{H}}(\mathbf{r}) = -e^2 n(\mathbf{r})/\epsilon$ , wobei  $\epsilon$  die Permittivität ist. Austausch- und Korrelationsterme stecken in  $V_{\text{xc}}$ ,

<sup>3</sup>Die Ortsabhängigkeit wird bei Funktionalen im Folgenden aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht explizit notiert.

welches mit dem Austausch- und Korrelationsfunktional über  $V_{xc}(\mathbf{r}) = \delta E_{xc}[n]/\delta n(\mathbf{r})$  zusammenhängt und  $V_{ext}(\mathbf{r})$  ist ein externes Potential. Aus der Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V'(\mathbf{r})\right) \phi_i(\mathbf{r}) = E_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (3.14)$$

lassen sich nun Orbitale berechnen, die eine neue Elektronendichte ergeben:

$$n(\mathbf{r}) \equiv n'(\mathbf{r}) = \sum_i f(E_i - E_F) \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) \quad (3.15)$$

Diese wird genutzt, um ein neues effektives Potential zu berechnen. Die Gleichungen (3.13), (3.14) und (3.15) müssen nun selbstkonsistent gelöst werden, wobei für die Elektronendichte zu Beginn eine geeignet gewählte Anfangsvermutung benutzt wird.

Die DFT ist mit Ausnahme des Austausch- und Korrelationsfunktionals prinzipiell exakt. Für dieses ist die exakte Form unbekannt, weshalb unterschiedliche Näherungen entwickelt wurden. In der Arbeit wird die Gradientennäherung (Generalized Gradient Approximation, GGA) von J. P. PERDEW, K. BURKE und M. ERNZERHOF [71] und in Anh. A zu Vergleichszwecken die lokale Dichtenäherung (engl. Local Density Approximation, LDA) von J. P. PERDEW und A. ZUNGER [72] verwendet. Diese sagen jedoch oft zu kleine Bandlücken voraus [68], was in Anh. A anhand des in der Arbeit verwendeten (7,0)-CNTs nochmal angesprochen wird.

### 3.2.2. Erweiterte Hückelmethode

Für Transistorsimulationen mit bis zu einigen tausend Atomen ist die Verwendung von DFT aufgrund begrenzter Rechenressourcen nicht praktikabel. Semiempirische Methoden stellen geeignete Alternativen dar. Im Rahmen der Arbeit kommt die EHT [49, 73–75] zum Einsatz, die anhand der angegebenen Referenzen nun vorgestellt wird.

Die EHT ähnelt der TBM und basiert auf einem Schema zur Erzeugung von Hamiltonmatrix  $\mathbf{H}$  und Überlappmatrix  $\mathbf{S}$ . Orbitale mit der Hauptquantenzahl  $n$ , der Drehimpulsquantenzahl  $l$  und der Magnetquantenzahl  $m$  werden hierfür als

$$\phi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\mathbf{r}) \quad (3.16)$$

formuliert. Die radialen Funktionen werden als Superposition von  $N_{orb}$  Slater-Orbitalen beschrieben<sup>4</sup>:

$$R_{nl}(r) = \frac{r^{n-1}}{\sqrt{(2n)!}} \sum_k^{N_{orb}} \left[ C_k (2\eta_k^{(nl)})^{n+1/2} \exp(-\eta_k^{(nl)} r) \right] \quad (3.17)$$

mit den Wichtungparametern  $C_k$  und den Slater-Koeffizienten  $\eta_k^{(nl)}$ .

<sup>4</sup>In der Praxis wird meist  $N_{orb} = 2$  gewählt, so auch in der vorliegenden Arbeit.

### 3. SIMULATIONSMETHODEN

Um die nachfolgenden Ausführungen zu erleichtern, werden ab jetzt  $n$ ,  $l$  und  $m$  zu einem einzigen Index ( $i$  oder  $j$ ) zusammengefasst. Somit bezeichnet  $\mathbf{r}_i$  und  $\mathbf{r}_j$  den Ort des  $i$ -ten beziehungsweise  $j$ -ten Orbitals. Die Einträge der Überlappmatrix  $\mathbf{S}$  ergeben sich im Rahmen der EHT als

$$S_{ij} = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{falls } \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j \\ \int d\mathbf{r}' \phi_i(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \phi_j^*(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) & \text{falls } \mathbf{r}_i \neq \mathbf{r}_j \end{cases} . \quad (3.18)$$

Die Einträge der Hamilton-Matrix  $\mathbf{H}$  sind

$$H_{ij} = \begin{cases} E_i^{\text{ion}} + \frac{1}{2} H_{\text{H}}^{(ij)} & \text{falls } i = j \\ H_{\text{w}}^{(ij)} S_{ij} + \frac{1}{2} H_{\text{H}}^{(ij)} S_{ij} & \text{falls } i \neq j \end{cases} \quad \text{mit} \quad H_{\text{H}}^{(ij)} = \frac{1}{2} [V_{\text{H}}(\mathbf{r}_i) + V_{\text{H}}(\mathbf{r}_j)] . \quad (3.19)$$

$H_{\text{w}}^{(ij)}$  dient der Wichtung, für welche in der Arbeit der Ansatz von M. WOLFSBERG und L. HELMHOLZ [76] mit  $H_{\text{w}}^{(ij)} = \frac{1}{4}(\beta_i + \beta_j)(E_i^{\text{ion}} + E_j^{\text{ion}})S_{ij}$  verwendet wird. Dabei sind  $E_i^{\text{ion}}$  und  $\beta_i$  Wichtungsparameter.  $H_{\text{H}}$  ist eine Erweiterung der eigentlichen EHT-Theorie durch K. STOKBRO ET AL. [49], implementiert in ATK, zur Berücksichtigung des induzierten Anteils des Hartree-Potentials im Rahmen der selbstkonsistenten Lösung (dadurch kann beispielsweise der Einfluss einer Gate-Elektrode untersucht werden). Für die Arbeit werden Parameter von A. ZIENERT ET AL. [75] verwendet, welche in Anh. B.2 zu finden sind. Diese wurden durch Fit an der mit DFT berechneten Bandstruktur eines metallischen (6,6)-CNTs bestimmt.

## 3.3. Quantentransport

Die Untersuchung elektronischen Transports (das heißt die gerichtete Bewegung elektrischer Ladungen) ist ein wesentlicher Bestandteil der modernen Physik und unerlässlich für die Beschreibung von elektronischen Bauteilen wie beispielsweise Transistoren. Elektronischer Transport ist somit auch für die vorliegende Arbeit von zentraler Bedeutung, weswegen er im folgenden Kapitel im Mittelpunkt steht. Nach einer allgemeinen Einführung (Kap. 3.3.1) wird auf zwei für die Arbeit wesentliche Formalismen, den LBF (Kap. 3.3.2) sowie den NEGF (Kap. 3.3.2), eingegangen. Weiterführende Informationen hierzu können zum Beispiel in Ref. [67] und [21] gefunden werden, welche den nachfolgenden Ausführungen als Grundlage dienen.

### 3.3.1. Streumechanismen und Transportregime

Elektronen, die sich durch ein Material bewegen, können auf unterschiedlicher Weise gestreut werden, was zu stark unterschiedlichem Verhalten des elektrischen Widerstandes  $R$  in Abhängigkeit der Systemlänge  $L$  führt.

Wird ein Elektron gestreut, ohne seine Energie zu ändern, so spricht man von *elastischer Streuung*. Die Entfernung, die ein Elektron im Mittel zurücklegt, bevor es elastisch gestreut wird, nennt man *mittlere freie Weglänge*  $\lambda_{\text{el}}$ . Inelastische Streuungen gehen mit einer Änderung der Phase des Elektrons einher, welches daher nicht mehr mit einem anderen Elektron interferieren kann, das vor dem Streuprozess die gleiche Phase besaß. Deshalb spricht man zum Beispiel bei Wechselwirkungen von Elektronen mit anderen Elektronen oder Phononen von *inkohärenter Streuung*. Ein Elektron bewegt sich im Mittel um die *Kohärenzlänge*  $\lambda_{\text{coh}}$ , bevor es zu einem inkohärenten Streuprozess kommt.

Für ein System, in welchem inkohärente Streuung eine wesentliche Rolle spielt, ist also  $L \gg \lambda_{\text{coh}} \gg \lambda_{\text{el}}$ .  $R$  ist in diesem Fall proportional zu  $L$  – es gilt das Ohmsche Gesetz<sup>5</sup>. Betrachtet man kürzere Systeme mit  $\lambda_{\text{coh}} \gg L \gg \lambda_{\text{el}}$ , spielen inkohärente Streuprozesse kaum eine Rolle. In diesem Fall spricht man vom Regime des *diffusiven Transports*, wobei  $R$  exponentiell mit  $L$  steigt. Ist schließlich  $\lambda_{\text{coh}} \gg \lambda_{\text{el}} \gg L$ , so findet keinerlei Streuung statt und man spricht von *ballistischem Transport*. Hier ist  $R$  unabhängig von  $L$ . Für noch kleinere Systemlängen, die im Bereich der Fermi-Wellenlänge  $\lambda_{\text{F}}$  liegen, ist das Energiespektrum nicht mehr kontinuierlich, sondern diskret. In diesem Fall sind Quanteneffekte wie resonantes Tunneln zu beobachten.

Für CNTs wurden bei kleinen Spannungen experimentell Werte im  $\mu\text{m}$ -Bereich für  $\lambda_{\text{el}}$  bestimmt [9–11]. Die im Rahmen der Arbeit untersuchten Transistoren mit Kanallängen um 10 nm arbeiten somit im ballistischen Regime. Bei experimentellen Untersuchungen wurde dies für derartig kurze CNTs bestätigt [12].

### 3.3.2. Landauer-Büttiker-Formalismus

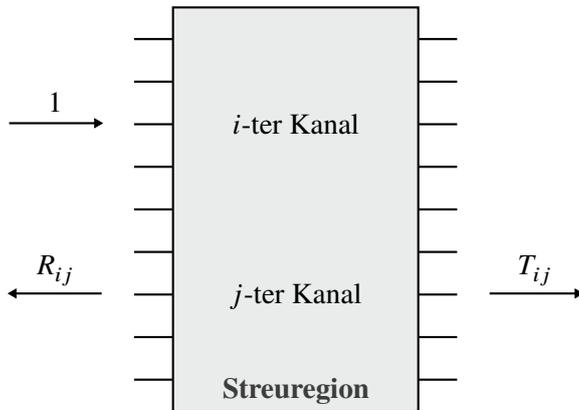
Der LBF [77] behandelt elektronischen Transport als ein Streuproblem. Ein Elektron wird die Streuregion mit der Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$  durchqueren oder mit der Reflexionswahrscheinlichkeit  $R = 1 - T$  zurückreflektiert. Da im Allgemeinen mehrere Kanäle für den Ladungstransport vorhanden sind, ergibt sich eine Transmissionsmatrix  $\mathbf{T}$  mit Einträgen  $T_{ij}$ , die die Transmission vom Eingang des  $i$ -ten Kanals zum Ausgang des  $j$ -ten Kanals angeben (siehe dazu auch Abb. 3.2). Es gilt  $T = \sum_i \sum_j \mathbf{T}_{ij}$ . Mit der Fermiverteilung  $f(E, E_{\text{F},d/s})$  von Gl. (3.7), wobei  $E_{\text{F},d/s}$  die Fermienergien der Kontakte sind, kann der Strom über die *Landauer-Büttiker-Formel* [77]

$$I_{\text{ds}}(E_{\text{F},s}, E_{\text{F},d}) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE T(E) [f(E, E_{\text{F},s}) - f(E, E_{\text{F},d})] \quad (3.20)$$

berechnet werden. Anlegen einer Spannung  $V_{\text{ds}}$  führt zu einer Differenz der Fermienergien. Für  $V_{\text{ds}} = 0$ , also  $E_{\text{F},s} = E_{\text{F},d}$ , lässt sich ein Zusammenhang zwischen Transmission und

<sup>5</sup>Das gilt solange die Zustände nicht lokalisiert sind. Lokalisierung tritt durch Unordnung auf, welche in der vorliegenden Arbeit nicht näher betrachtet wird.

### 3. SIMULATIONSMETHODEN



**Abb. 3.2.:**

Streuregion mit mehreren Transportkanälen. Ein Elektron am  $i$ -ten Kanal wird mit der Wahrscheinlichkeit  $T_{ij}$  durch den  $j$ -ten Kanal transmittiert und mit der Wahrscheinlichkeit  $R_{ij}$  durch den  $j$ -ten Kanal reflektiert.

Leitfähigkeit  $G$  finden [67]:

$$G = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE T(E) (-\partial f(E) / \partial E) \quad . \quad (3.21)$$

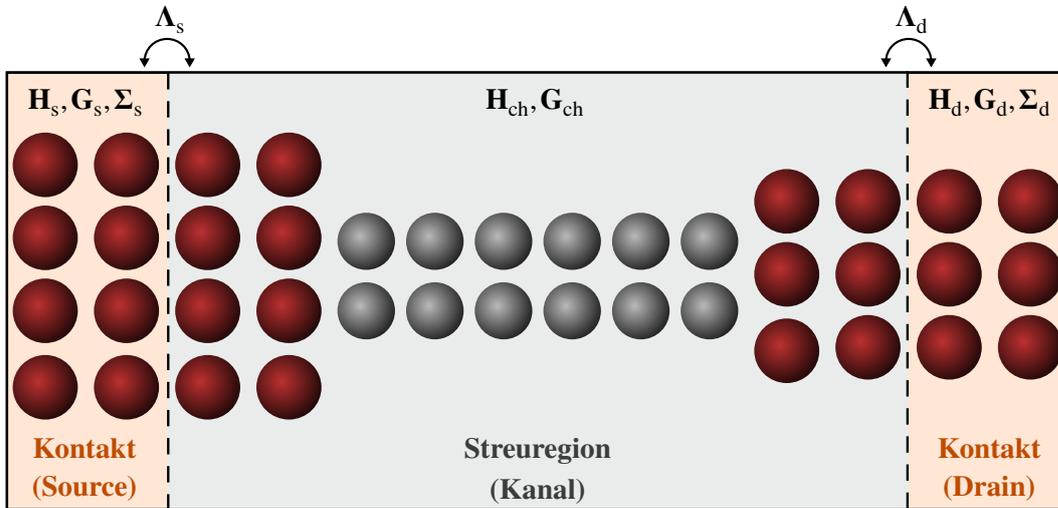
Für  $T_{el} = 0$  entspricht die Fermi-Verteilung einer Stufenfunktion, deren Ableitung die Delta-Distribution ist. Dadurch vereinfacht sich das Integral zu  $T(E_F)$ . In diesem Fall ist die Leitfähigkeit proportional zur Anzahl der Zustände bei  $E_F$ . Die maximale Leitfähigkeit eines einzelnen idealen Zustands (das heißt  $T(E_F) = 1$ ) ist das *Leitfähigkeitsquant*  $G_0 \equiv G = \frac{2e^2}{h}$ .

#### 3.3.3. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus

Der NEGF ermöglicht bei der Untersuchung des elektronischen Transports die Behandlung zahlreicher Effekte wie die Interaktion von Elektronen mit Phononen oder Photonen als auch die Berücksichtigung inkohärenter Streuprozesse. Die Untersuchungen der Arbeit beschränken sich jedoch auf das ballistische Regime, so auch die folgenden Diskussionen.

In Abb. 3.3 ist schematisch das Modell für Transportsimulationen dargestellt. Es besteht aus einer Streuregion, welche im Folgenden als Kanal bezeichnet wird (mit dem Index „ch“ gekennzeichnet). Diese ist mit zwei Kontakten verbunden, die halbunendlich ausgedehnt sind und als Elektronenreservoirs dienen. Die Kontakte werden, in Konsistenz zu den späteren Untersuchungen, als Source und Drain bezeichnet (mit Indizes „s“ und „d“). Damit die Ergebnisse der Berechnung nicht durch Artefakte aufgrund der Randbedingungen an den Kontakt-Grenzflächen beeinträchtigt werden, muss ein Teil der Elektrode zum Zentralbereich hinzugefügt werden. Gerade bei der Betrachtung von Metallkontakten erhöht dies die Atomanzahl im Zentralbereich nochmal deutlich.

Im Rahmen einer NEGF-Rechnung werden zu Beginn die Elektroden als isoliertes System betrachtet und eine Elektronenstrukturechnung zur Bestimmung der Hamilton-Matrix der



**Abb. 3.3.:** Aufbau eines Systems im Rahmen einer NEGF-Rechnung, bestehend aus Kanal und halbunendlich ausgedehnten Kontakten. Für die Berechnung wesentliche Größen sind eingezeichnet. Die Streuregion enthält eine Kopie der Elektroden.

Kontakte  $\mathbf{H}_{d/s}$  durchgeführt. Die Länge einer Elektrodeneinheit zelle muss bei dieser Berechnung ausreichend groß sein, so dass Atome nur mit Atomen der nächsten Zelle interagieren können. Hier zeigt sich auch die in Kap. 3.1.1 angesprochene Notwendigkeit lokalisierter Basisfunktionen, da nur so die Interaktion der Kontakte vernachlässigt werden kann (im Gegensatz zu ebenen Wellen). Die Einheit zelle im Rahmen einer Elektrodenrechnung muss außerdem ausreichend lang sein, so dass Atome nur mit Atomen der nächsten Zelle interagieren können. Ist sie zu kurz, so werden langreichweitige Wechselwirkungen vernachlässigt und der berechnete Wert der Fermienergie wird beeinflusst. Nach Zusammenbringen der Kontakte mit dem Kanal wird die Konvergenz der Rechnung erschwert oder gar die Ergebnisse beeinflusst.

Im Folgenden sollen wesentliche Größen des NEGF kurz eingeführt und der Ablauf einer Rechnung skizziert werden. Die Änderung der Elektronenstruktur des Kanals infolge der Kopplung mit den Kontakten wird durch *Selbstenergien*  $\Sigma_{d/s}$  beschrieben. Diese ergeben sich aus den *Kopplungsmatrizen*  $\Lambda_{d/s}$  zwischen Kanal und den Kontakten sowie den Green-Funktionen des jeweiligen Kontakts  $\mathbf{G}_{d/s}$ . Aufgrund der Selbstenergien kommt es zu einer Verbreiterung von Zuständen im Zentralbereich. Diese entspricht dem nichthermiteschen Anteil der Selbstenergie und wird als *Verbreiterungsmatrix*  $\Gamma_{d/s}$  bezeichnet. Darauf basierend muss die *Green-Funktion des Kanals*  $\mathbf{G}_{ch}$  selbstkonsistent bestimmt werden. Hier fließt über die Poisson-Gleichung das elektrostatische Potential ein. Als Randbedingung wird dabei an den Kanal-Kontakt-Grenzflächen das elektrostatische Potential aus den Elektrodenrech-

nungen verwendet. Senkrecht zum Transistor, am Rand der Simulationsbox, werden in der Arbeit Neumann-Randbedingungen verwendet (die Ableitung des Potentials muss Null sein). Auch das Gate fließt über die Poisson-Gleichung in die Rechnung ein, indem das Potential im metallischen Gate-Bereich auf einen festen Wert (das Gate-Potential) gezwungen wird.

Sobald  $\mathbf{G}_{\text{ch}}$  gefunden ist, kann die *Transmission*  $T(E)$  berechnet werden. Die Herleitung von  $T(E)$  würde den Rahmen der vorliegenden Arbeit sprengen und kann zum Beispiel in Ref. [67] oder Ref. [21] gefunden werden. Es gilt

$$T(E) = \text{Sp} \left[ \mathbf{G}_{\text{ch}} \mathbf{\Gamma}_{\text{s}} \mathbf{G}_{\text{ch}}^{\dagger} \mathbf{\Gamma}_{\text{d}} \right] \quad , \quad (3.22)$$

woraus sich über den LBF der Drain-Source-Strom ergibt (Gl. (3.20)).

### 3.4. Numerische Bauelementesimulation

Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Implementation zur NDS wurde von M. CLAUS ET AL. entwickelt [53–56]. Diese basiert auf der selbstkonsistenten Lösung der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung in effektiver-Massen-Näherung sowie der Poisson-Gleichung und ist in der Lage, einige der auftretenden Quanteneffekte zu beschreiben (zum Beispiel Tunnelströme). Wie der in den letzten Kapiteln vorgestellte atomistische Ansatz, ist auch das verwendete Modell der NDS im ballistischen Regime gültig. Dies ermöglicht einen sinnvollen Vergleich. In Abb. 3.4 ist der Aufbau des Systems dargestellt, anhand dessen das Modell im Folgenden vorgestellt wird.

#### 3.4.1. Schrödinger-Gleichung in effektiver-Massen-Näherung

Die Beschreibung des Transports basiert auf der Lösung der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung für effektive Massen  $m^*$ <sup>6</sup>:

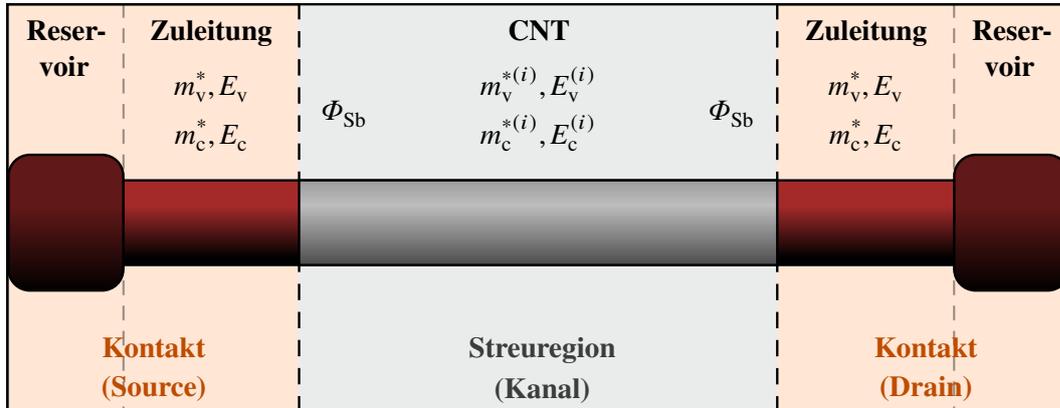
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_i(z) \right) \psi_i(z) = E \psi_i(z) \quad . \quad (3.23)$$

Der Index  $i$  kennzeichnet dabei die Teilbandkante, wobei es sich entweder um eine der Leitungs- oder Valenzbandkanten handelt<sup>7</sup>. Für das Potential  $V_i(z)$  gilt

$$V_i(z) = \begin{cases} E_c^{(i)} - e v(z) & \text{für Leitungsbänder} \\ E_v^{(i)} + e v(z) & \text{für Valenzbänder} \end{cases} \quad . \quad (3.24)$$

<sup>6</sup>Da nur zeitunabhängige Probleme im Rahmen der Arbeit betrachtet werden, beschränken sich die folgenden Untersuchungen auf diesen Fall. Zeitabhängige Untersuchungen sind mit diesem Ansatz aber auch möglich, siehe Ref. [53, 54].

<sup>7</sup>Der zusätzliche Index „c“ oder „v“ dient im Folgenden der Unterscheidung zwischen Leitungs- oder Valenzbandkante.



**Abb. 3.4.:** Schema des Modells der Bauelementesimulation, bestehend aus dem Kanal (das CNT) und zwei Kontakten (Source und Drain). Jeder dieser Kontakte besteht aus Zuleitung und Elektronenreservoir (diese werden während der Rechnung nicht mit berechnet und dienen nur der Formulierung der Theorie). Angegeben sind außerdem die externen Parameter.

Dabei ist  $E^{(i)}$  der Abstand zwischen Bandkante des  $i$ -ten Teilbandes zur Fermienergie  $E_F$  (diese liegt im Rahmen des Modells bei  $E = 0$ ) und  $v(z)$  ist das elektrostatische Potential.

### 3.4.2. Beschreibung der Kontakte

Für die Beschreibung der Kontakte (diese werden in Konsistenz mit den späteren Untersuchungen als Source und Drain bezeichnet) wird ein Modell verwendet, welches für die Simulation von Transistoren mit Metallkontakten gedacht ist. Es wird angenommen, dass im Kontaktbereich das CNT vollständig durch den Metallkontakt ummantelt ist. Da die korrekte Beschreibung der Physik in diesen Bereichen schwierig ist, erfolgt die Beschreibung durch *effektive Bandkanten*. Dabei ist  $E_v^{(d/s)}$  die Kontakt-Valenzbandkante und  $E_c^{(d/s)}$  die Kontakt-Leitungsbandkante, welche als freie Parameter zur Verfügung stehen. Im Fall von Metallkontakten resultiert dabei eine Verkleinerung der Bandlücke des zugrunde liegenden CNTs aufgrund von Hybridisierung [53]. Bei früheren Arbeiten des Autors der vorliegenden Arbeit wurde der Einfluss von Palladium-Adatomen auf ein halbleitendes (8,4)-CNT untersucht [23, 24]. Dabei zeigte sich eine Verkleinerung der Bandlücke in Abhängig vom Grad der Besetzung, was die Annahme des NDS-Modells bestätigt. In dieser Arbeit werden die Bandkanten so eingestellt, dass sie den Bandkanten des dotierten CNTs entsprechen.

Die elektronische Struktur, das heißt die Lage der Bandkanten, zwischen Kontakt und Kanal ist im Allgemeinen unterschiedlich, weshalb am Übergang eine Barriere existieren kann. Diese ist die Schottky-Barriere  $\Phi_{Sb}$  welche, wie in Kap. 2.3.1 diskutiert, bei der

### 3. SIMULATIONSMETHODEN

Untersuchung von Metallkontakten auftritt. Die Schottky-Barriere ist in dem verwendeten NDS-Modell ein weiterer Fitparameter. In dieser Arbeit wird sie zur Modellierung von Ohmschen Kontakten so eingestellt, dass die Bandkanten im Kanal und an den Kontakten einander berühren.

Zur Beschreibung des ballistischen Transports wird angenommen, dass das CNT mit *Zuleitungen* kontaktiert ist, welche wiederum mit Elektronenreservoirs verbunden sind (vergleiche Abb. 3.4). Innerhalb dieser Zuleitungen sind Potential und Fermienergie räumlich konstant. Die Fermienergien in beiden Zuleitungen unterscheiden sich entsprechend der angelegten Spannung. Ladungsträger können nun aus den Kontakten in den Kanal eingespeist werden, wobei die verfügbaren Energien in der *Injektionsbandbreite*  $\mathcal{E}$  zusammengefasst sind. Alle dazugehörigen Impulse  $k$  mit zugehöriger Dispersionsrelation  $E(k)$  werden in  $\Omega$  zusammengefasst, das heißt

$$\Omega = \{k : E(k) \in \mathcal{E}\} \quad . \quad (3.25)$$

Diese Formulierung wird in Gl. (3.29) zur Berechnung der Ladungsträgerdichte verwendet. Für die Dispersionsrelation  $E(k)$  nutzt das verwendete Modell eine parabolische Näherung mit

$$E(k) = E_{c/v} + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \quad , \quad (3.26)$$

welche für die Beschreibung von CNTFETs gute Ergebnisse liefert [78].

#### 3.4.3. Lösung der Poisson-Gleichung

Die im Rahmen der Arbeit untersuchten Transistoren mit zylindrischem Gate (siehe Kap. 2.3.2) ermöglichen die Anwendung der Poisson-Gleichung in Zylinderkoordinaten:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \epsilon r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \epsilon \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{e}{\pi d_{\text{cnt}}} (n(z) + p(z)) \quad . \quad (3.27)$$

Dabei ist  $\epsilon$  die Permittivität,  $n(z)$  die Elektronendichte und  $p(z)$  die Dichte der Löcher. Der Vorfaktor  $(\pi d_{\text{cnt}})^{-1}$  auf der rechten Seite dient der Skalierung und ist notwendig, da nur ein Segment des CNTs in die Berechnung der zweidimensionalen Poisson-Gleichung eingeht.

#### 3.4.4. Selbstkonsistente Rechnung

Die Schrödinger Gleichung in effektiver-Massen-Näherung (3.23) und die Poisson-Gleichung (3.27) müssen nun selbstkonsistent gelöst werden, wobei die Elektronendichte  $n(z)$  über

$$n(z) = \sum_i n_i(z) \quad (3.28)$$

$$\text{mit } n_i(z) = \frac{4}{2\pi} \sum_{k \in \Omega} f(E(k)) \psi^*(z_{\text{contact}}) \psi(z_{\text{contact}}) \quad (3.29)$$

berechnet wird [53]. Es wird dabei über die Leitungsbänder summiert (die Berechnung der Dichte der Löcher  $p(z)$  erfolgt analog, wobei über die Valenzbänder summiert wird).  $\psi(z_{\text{contact}})$  bedeutet, dass die Wellenfunktion an einer der Grenzen zwischen Kontakt und Kanal ausgewertet wird, was aufgrund des ballistischen Transports möglich ist. Anschließend kann die Transmission des  $i$ -ten Teilbands  $T_i$  über

$$T_i(E) = \frac{m_s^* k_d(E)}{m_d^* k_s(E)} \psi^*(z_{\text{contact}}) \psi(z_{\text{contact}}) \quad (3.30)$$

berechnet werden [53]. Hierbei sind  $k_s(E)$  und  $k_d(E)$  die Impulse der von Source- beziehungsweise Drain-Kontakt in den Kanal injizierten Ladungsträger. Der Drain-Source-Strom  $I_{\text{ds}}$  ergibt sich aus den Beiträgen des Stroms der einzelnen Teilbänder  $I_{\text{ds}} = \sum_i I_{\text{ds},i}$ , wobei der LBF von Kap. 3.3.2 zur Berechnung der Teilströme verwendet wird.



## 4. Entwicklung des Modellsystems

Das gesamte Modellsystem, welches den Ergebnissen dieser Arbeit zugrunde liegt, ist in Abb. 4.1 dargestellt. Die einzelnen Bestandteile werden nach dem folgenden Überblick in den nächsten Kapiteln detailliert vorgestellt.

Für den Kanal wird das halbleitende (7,0)-CNT verwendet, wobei die Kanallänge  $L_{\text{ch}} = 10.2$  nm beträgt (siehe Kap. 4.1). Die Bandlücke des CNTs wird durch die DFT mit  $E_{\text{gap}} = 0.5$  eV vorhergesagt (näheres dazu in Anh. A).

Es wird ein zylindrisches Gate der Länge  $L_{\text{g}} = 7.7$  nm untersucht. Entsprechend befinden sich sogenannte *Spacer* (Bereiche in denen das CNT frei liegt) der Länge  $L_{\text{spac}} = 1.3$  nm zwischen Gate und Kontakt. Zwischen CNT und Gate wird Vakuum als Dielektrikum verwendet. Weitere Details werden in Kap. 4.2 besprochen.

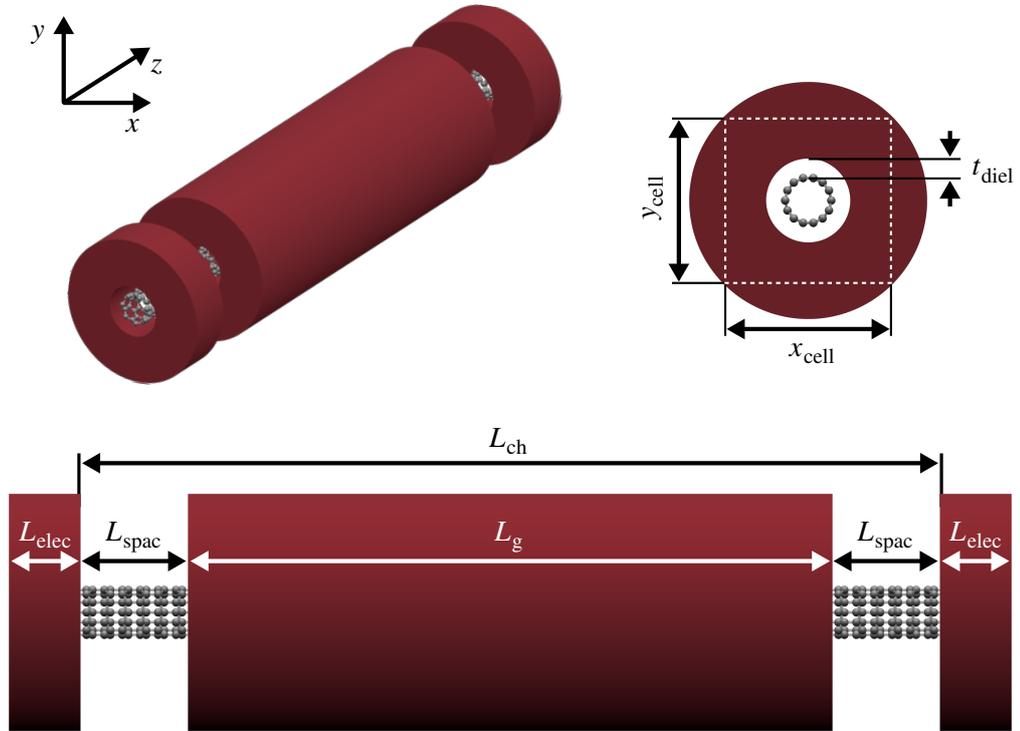
Bei den Kontakten handelt es sich um effektiv dotierte (7,0)-CNTs, was in Kap. 4.3 diskutiert wird. Sie sind im Rahmen der NEGF-Rechnung (Kap. 3.3.3) halbunendlich ausgedehnt. Die Einheitszelle, die für die Elektronenstrukturechnung der Kontakte benötigt wird, ist  $L_{\text{elec}} = 0.85$  nm lang. Zur Abschirmung langreichweitiger elektrostatischer Effekte werden die Kontakte mit *Hilfselektroden*, deren Potential mit den Kontakten stets übereinstimmt, ummantelt (siehe hierzu ebenfalls Kap. 4.3). Die untersuchte Drain-Source-Spannung ist in dieser Arbeit ausschließlich  $V_{\text{ds}} = 0.1$  V.

Der Simulationsraum bei atomistischen Rechnungen ist senkrecht zum Kanal quadratisch mit Seitenlängen  $x_{\text{cell}} = y_{\text{cell}} = 2$  nm. Im Rahmen des NDS-Modells ist die Simulationsbox zylindersymmetrisch und der Abstand von Mitte des CNTs bis zum Rand der Simulationsbox wird auf 25 nm gesetzt (da hier, im Gegensatz zu ATK, ein adaptives Verfahren bei der Lösung der Poisson-Gleichung verwendet wird, ist das ohne großen Speicheraufwand möglich). Einen Überblick über die vorgestellten Größen gibt Tab. 4.1.

### 4.1. Beschaffenheit des Kanals

In aktuellen experimentellen Untersuchungen konnten CNTFETs mit Kanallängen  $L_{\text{ch}}$  von unter 10 nm erfolgreich hergestellt werden [13]. Auch die Arbeit soll sich auf einen Transistor vergleichbarer Länge konzentrieren. Die Simulationmethoden der Arbeit sind im ballistischen Regime gültig, weshalb bei deutlichen längeren Transistoren (im Bereich von circa 100 nm) auf andere Ansätze zurückgegriffen werden muss [57]. Auch die verfügbaren Rechenressourcen begrenzen die Anzahl der Atome in der Simulation und damit die Transistorabmessungen. Neben  $L_{\text{ch}}$  ist hier auch die Wahl des CNTs von Bedeutung. Zwar sind in experimentellen Untersuchungen CNTs mit großen Durchmessern von über einem Nanometer aufgrund rela-

#### 4. ENTWICKLUNG DES MODELLSYSTEMS



**Abb. 4.1.:** Schematische Struktur des Modellsystems aus unterschiedlichen Blickwinkeln. Die eingezeichneten Größen werden im Text erklärt.

**Tab. 4.1.:** Übersicht der im Text vorgestellten räumlichen Parameter des Modellsystems.

Größe	Wert [nm] <sup>a</sup>	Größe	Wert [nm]
$L_{\text{ch}}$	10.230 (24)	$d_{\text{cnt}}$	0.548
$L_{\text{g}}$	7.673 (18)	$d_{\text{g}}$	1
$L_{\text{spac}} = \frac{1}{2} (L_{\text{ch}} - L_{\text{g}})$	1.279 (3)	$t_{\text{diel}} = \frac{1}{2} (d_{\text{g}} - d_{\text{cnt}})$	0.226 <sup>c</sup>
$L_{\text{elec}}$	0.853 (2) <sup>b</sup>	$x_{\text{cell}} = y_{\text{cell}}$	2

<sup>a</sup> Werte in Klammern sind die entsprechenden Längen in Einheitszellen des (7,0)-CNTs.

<sup>b</sup> Länge der Einheitszelle eines halbusendlich ausgedehnten Kontakts.

<sup>c</sup> Das Dielektrikum ist Vakuum ( $\epsilon_{\text{diel}} = 1$ ).

tiv einfacher Separationsmöglichkeiten in Verwendung [13], dies würde jedoch zu langen Rechenzeiten führen.

Aus der Vielzahl an CNTs wurde unter Berücksichtigung obiger Gesichtspunkte das (7,0)-CNT ausgewählt. Es ist halbleitend und besitzt 28 Atome pro Einheitszelle. Für die Untersuchungen in dieser Arbeit wird das durch ATK zur Verfügung gestellte CNT verwendet, bei welchem der Abstand benachbarter Kohlenstoffatome  $a_{c-c} = 1.42086$  nm beträgt. Es wird keine Geometrieoptimierung durchgeführt, wofür in Anh. A die Gründe diskutiert werden. Das CNT hat einen Durchmesser von rund 0.548 nm und die Einheitszelle ist 0.426 nm lang. Es werden 24 Einheitszellen für den Kanal verwendet, welcher dadurch eine Länge von  $L_{ch} \approx 10.2$  nm besitzt. Der Kanal besteht aus 672 Kohlenstoff-Atomen. Für Untersuchungen zum Einfluss der Kanallänge wird in Kap. 5.3 die Kanallänge zwischen 12 Einheitszellen (5.1 nm) und 48 Einheitszellen (20.5 nm) systematisch variiert.

## 4.2. Eigenschaften der Gate-Elektrode

ATK ermöglicht die Untersuchung unterschiedlicher Gate-Strukturen. Dabei basiert die Implementation auf einem homogenen Volumen, in welchem das Potential auf einen festen Wert  $V_g$  gesetzt wird. Dieses wird im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnung über die Poisson-Gleichung berücksichtigt, siehe hierzu Kap. 3.3.3. Für die Gate-Source-Spannung folgt  $V_{gs} = V_g - V_s$ , wobei  $V_s$  das Potential des Source-Kontakts ist.

Im Rahmen der Arbeit wird ein zylinderförmiges Gate betrachtet (siehe Kap. 2.3.2). Die Größe des Gates wird so gewählt, dass die quaderförmige Simulationsbox vollständig im metallischen Gate-Volumen enthalten ist. Der innere Durchmesser des Gates beträgt  $d_g = 1$  nm. Als Gate-Dielektrikum wird im Rahmen dieser Arbeit Vakuum gewählt (relative Permittivität  $\epsilon_{diel} = 1$ ). Da das (7,0)-CNT einen Durchmesser von  $d_{cnt} = 0.548$  nm besitzt, ist die Dicke des Dielektrikums somit  $t_{diel} = 0.226$  nm.

Entlang des CNTs bedeckt das Gate den Kanal nicht vollständig. Es werden sogenannte *Spacer* eingeführt, die eine Länge von  $L_{spac} = 1.279$  nm (drei CNT-Einheitszellen) besitzen. Die Idee dabei ist, an der Grenzfläche zwischen Kanal und Kontakt einen stetigen und möglichst auch differenzierbaren Übergang des Potentials zu ermöglichen und so die Qualität der Ergebnisse nicht durch die Randbedingungen zu beeinträchtigen. Testrechnungen mit Transistoren ohne Spacer zeigten jedoch keine Hinweise auf unphysikalisches Verhalten des Transistors und auch die Konvergenz der Rechnung verschlechterte sich nicht. Dennoch werden die Spacer im Rahmen der Arbeit beibehalten, da vergleichbare Geometrien auch bei experimentellen Untersuchungen anzutreffen sind [31]. Das Gate wird senkrecht zum CNT dabei bis zum Rand der Simulationsbox ausgedehnt. In Kap. 5.4 werden unterschiedliche Gate-Längen bei fester Kanallänge variiert und so der Einfluss der Gate-Größe untersucht (auch die Länge der Spacer ist dadurch unterschiedlich).

### 4.3. Eigenschaften der Source- und Drain-Elektroden

#### Dotierung

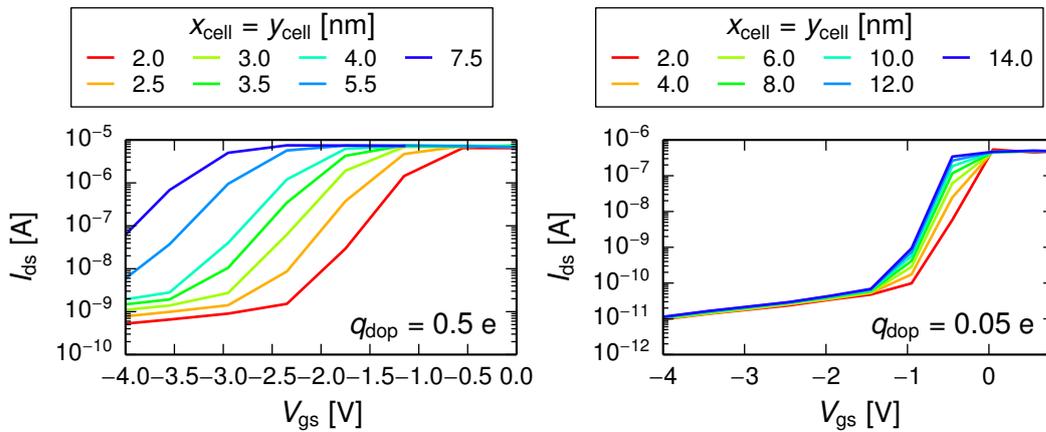
Auch für die Kontakte muss die Anzahl der Atome berücksichtigt werden. Zwar ist die Elektrodenzelle relativ klein im Vergleich zum Kanal, doch erfordert ATK jeweils eine identische Kopie der Elektrode als Teil des Zentralbereichs. Die Untersuchung von Metallkontakten würde somit auch die Anzahl der Atome im Zentralbereich stark erhöhen. Weniger rechenintensiv sind stattdessen Transistoren mit dotierten CNTs als Kontakte, die in Kap. 2.3 vorgestellt wurden und in dieser Arbeit verwendet werden.

ATK ermöglicht die Verwendung einer *effektiven Dotierung* [79], die für die atomistischen Rechnungen genutzt wird. Es werden in der Rechnung dabei zusätzlich Elektroden zu den Elektroden hinzugefügt oder entfernt, was bei der Elektrodenrechnung berücksichtigt wird. In der Arbeit wird eine n-Dotierung untersucht, entsprechend konzentrieren sich die folgenden Ausführungen auf diesen Fall. Nach Zusammenbringen der n-dotierten Kontakte mit dem undotierten Kanal ergibt sich so ein n-i-n-Transistor. Durch Ladungstransfer können jedoch auch Elektronen aus den Kontakten in den Kanal diffundieren und auch diesen dotieren. In Kap. 5.2.1 wird dieser Effekt beobachtet. Die verwendete Dotierung hat den Vorteil, dass niedrige Dotierungen mit kleinen Systemen realisiert werden können, denn die zugefügte Ladung kann unter einer Elementarladung sein. Wie bei einer Dotierung mit Atomen [27, 28, 30] resultiert aus der Dotierung eine Verschiebung der Fermienergie, wobei die Bänder außer dieser Verschiebung nicht beeinflusst werden.

Es stellt sich die Frage, wie realistisch eine solche Dotierung ist. Hierzu ist es hilfreich, sich ein mit einem Metall ummanteltes CNT vorzustellen. Ist die Austrittsarbeit des Metalls kleiner als die Elektronenaffinität des CNTs, so bewegen sich Elektronen aus dem Metall in das CNT. Dieses ist dadurch n-dotiert. Für den Grenzwert vernachlässigbarer Änderung der elektronischen Struktur (mit Ausnahme der Verschiebung) entspricht dieses Bild der in der Arbeit verwendeten Dotierung. Vergleichbare Dotierungen wurden zum Beispiel in Ref. [37] verwendet, um einen Transistor mit Palladium-Kontakten zu untersuchen.

Für die Höhe der Dotierung wird  $q_{\text{dop}} = 0.05 e$  gewählt (welche auch in Ref. [80] untersucht wurde). Das entspricht einer Dotierung von 0.001 Elektronen pro Kohlenstoffatom ( $\hat{=} 5.86 \times 10^{-9}$  Elektronen/cm). Die Fermienergie  $E_F$  wird dadurch knapp unter die Leitungsbandkante verschoben (siehe auch Kap. 5.1.2 oder 5.2.1). In Kap. 5.2.3 werden unterschiedliche Niveaus der Dotierung mit dem atomistischen Ansatz untersucht.

Für die Rechnungen mit NDS werden die Elektroden nicht explizit berechnet, sondern ergeben sich durch Festlegung effektiver Bandkanten und der effektiven Massen von Elektronen und Löchern (wie in Kap. 3.4 vorgestellt). Diese Parameter werden entsprechend der Bandstruktur des dotierten CNTs eingestellt (siehe Kap. 5.1).



**Abb. 4.2.:** Transfercharakteristiken für unterschiedliche Zellgrößen. Ergebnisse für Dotierungen von  $0.5 e$  (links) und  $0.05 e$  (rechts) sind dargestellt.

#### Abmessungen für die Elektrodenrechnung im atomistischen Ansatz

Der Kanal wird im Rahmen der atomistischen Simulation mit zwei halbumendlich ausgedehnten Elektroden kontaktiert, wofür in Abb. 4.1 jeweils eine Elektrodeneinheitszelle dargestellt ist. Bei der Elektrodenrechnung zur Bestimmung der Kontakt-Hamilton-Matrizen, zu Beginn einer jeden Transportrechnung, wird eine Elektronenstrukturechnung der Elektrodeneinheitszelle durchgeführt. Wie in Kap. 3.3.3 diskutiert, muss die Elektrodeneinheitszelle dabei eine Mindestlänge besitzen, weshalb eine Einheitszelle des (7,0)-CNTs als Kontakt nicht ausreicht und in der Arbeit stattdessen zwei Einheitszellen verwendet werden (hier zeigt sich ausreichende Konvergenz der Ergebnisse). Die Länge einer Elektrodeneinheitszelle ist somit  $L_{\text{elec}} = 0.82 \text{ nm}$ .

#### Langreichweitige elektrostatische Effekte im atomistischen Ansatz

Im Gegensatz zu einer Dotierung mit Atomen, fehlen bei der Dotierung mit Elektronen jedoch positiv geladene Atomrümpfe. Dadurch sind die Kontakte insgesamt geladen und es treten langreichweitige elektrostatische Effekte auf (Atomrümpfe würden die negativen Ladungen kompensieren).

Da infolge der verwendeten Neumann-Randbedingungen das elektrische Feld an den Grenzen des Simulationsraums auf Null gezwungen wird, hat die Größe der Simulationsbox Einfluss auf die Ergebnisse (die Simulationsbox ist in Abb. 4.1 markiert). Die Transfercharakteristik ist in Abb. 4.2 für unterschiedliche Ausdehnungen der Simulationsbox, senkrecht zum Transistor in  $x$ - beziehungsweise  $y$ -Richtung, dargestellt (die Eigenschaften der Transfercharakteristik des untersuchten Transistors werden in Kap. 5.1.3 und 5.2.2 ausführlich besprochen). Es zeigt sich eine Verschiebung der Transfercharakteristik hin zu niedrigen

#### 4. ENTWICKLUNG DES MODELLSYSTEMS

Gate-Source-Spannungen mit zunehmender Dotierung der Kontakte. Für die nachfolgenden Untersuchungen führen derartige Effekte zu Fehlern, so dass nach Lösungen gesucht werden muss.

Der triviale Ansatz ist die Vergrößerung der Simulationsbox, bis hinreichende Konvergenz erreicht ist. Infolge des größeren Simulationsraums steigt jedoch auch die Anzahl an Gitterpunkten, die zur Lösung der Poisson-Gleichung benötigt werden. Hier kommt man schnell an die Grenzen des verfügbaren Arbeitsspeichers. Notwendig wäre ein nichtäquidistantes Gitter, was in ATK jedoch nicht zur Verfügung steht.

Da der Effekt mit der Stärke der Dotierung sinkt, könnte auf kleinere Dotierungen zurückgegriffen werden. Allerdings verringert sich bei niedrigeren Dotierungen die Leitfähigkeit der Kontakte. Die in der Arbeit verwendete Dotierung ist bereits relativ niedrig, siehe dazu auch Kap. 5.2.3, in welchem der Einfluss der Dotierung mit dem atomistischen Ansatz untersucht wird.

Nur die Kontakte sind dotiert, weshalb auch nur diese Bereiche für die elektrostatischen Effekte verantwortlich sind. Aus diesem Grund werden sie in der vorliegenden Arbeit mit einer Region konstanten Potentials ummantelt. Diese werden als *Hilfselektroden* bezeichnet. Das Potential der Hilfselektroden ist identisch mit den jeweiligen Source- und Drain-Potentialen. Die Implementation dieser Regionen ist dabei identisch mit dem Gate im Kanal, nur werden sie im Rahmen der Elektrodenrechnungen berücksichtigt. Somit gelten effektiv Dirichlet-Randbedingungen senkrecht zum CNT (in den Kontaktbereichen) und die Simulationsbox ist dort quasi zylindersymmetrisch. Der Abstand von CNT zu den Hilfselektroden wird so gewählt, dass er gleich dem Abstand zwischen CNT und Gate im Zentralbereich ist ( $t_{\text{diel}} = 0.226 \text{ nm}$ ). Durch diesen Ansatz verschwindet die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Größe der Simulationsbox (die in Abb. 4.2 erkennbare Verschiebung tritt nicht mehr auf).

Diese verwendete Abschirmung der elektrostatischen Felder ist durchaus mit experimentellen Situationen vergleichbar. Bei der Dotierung von CNTs mit Adatomen befinden sich die Kompensationsladungen außerhalb des CNTs und neutralisieren so die negative Ladung der dotierten Regionen. Sind die CNTs in Metallkontakten eingebettet, so werden die elektrostatischen Effekte vollständig abgeschirmt.

## 5. Ergebnisse und Diskussion

### 5.1. Numerische Bauelementesimulation

#### 5.1.1. Extraktion der Parameter

Die für die Rechnungen notwendigen Parameter, deren Bedeutung in Kap. 3.4 vorgestellt wurde, werden aus der mit DFT berechneten Bandstruktur extrahiert. Neben dem Abstand zur Fermi-Energie gehört für jedes Teilband hierzu auch die effektive Masse  $m_i^*$ . Um diese zu bestimmen, wird die Dispersionsrelation als Parabel gefittet und darüber die Krümmung am  $\Gamma$ -Punkt bestimmt:

$$m_i^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E_i(k)}{dk^2} \right) . \quad (5.1)$$

Für die Rechnungen werden jeweils vier Valenz- und Leitungsbänder berücksichtigt, was sich bei Testrechnungen als ausreichend herausstellte. Der extrahierte Parametersatz ist in Tab. 5.1 eingetragen.

Das verwendete Modell für die NDS ermöglicht bisher nicht die Simulation von dotierten Kontakten, da es für die Untersuchung von Transistoren mit Schottky-Barrieren entwickelt wurde. Ein Transistor mit dotierten Kontakten wird jedoch in der Arbeit wegen der in Kap.

**Tab. 5.1.:** Parameter, die aus der mit DFT berechneten Bandstruktur extrahiert wurden und für die NDS Verwendung fanden.

$i$	Leitungsbänder		Valenzbänder	
	$m^*$ [ $m_e$ ]	$E_c$ [eV]	$m^*$ [ $m_e$ ]	$E_v$ [eV]
1	0.182 <sup>a</sup>	0.243	0.134 <sup>a</sup>	0.259
2	0.181	0.853	0.134	0.259
3	0.181	0.853	1.522	0.642
4	0.133	0.988	1.522	0.642

<sup>a</sup> Ebenfalls als effektive Masse für die durch die Kontakte injizierten Elektronen beziehungsweise Löcher verwendet.

4.3 angeführten Gründe untersucht. Die sich ergebenden Ohmschen Kontakte müssen daher im verwendeten Modell zur NDS mit den verfügbaren Parametern nachgebildet werden.

Wie in Kap. 3.4 vorgestellt wurde, erfolgt im Rahmen des NDS-Modells die Beschreibung der Kontaktphysik mit effektiven Bandkanten, deren Lage an Referenzwerte gefittet werden muss. Ladungsträger können von oberhalb der effektiven Leitungsbandkante und von unterhalb der effektiven Valenzbandkante aus in den Kanal injiziert werden. In der Arbeit werden die effektiven Bandkanten so eingestellt, dass sie mit dem ersten Teilband des dotierten CNTs übereinstimmen. Für die in den Kanal injizierten Ladungsträger wird die effektive Masse des ersten Leitungs- beziehungsweise Valenzbandes des CNTs gewählt (siehe Tab. 5.1). Das ist dadurch gerechtfertigt, dass die effektive Dotierung nur zu einer Verschiebung der Fermienergie in den Kontakten führt, sich die Krümmung der Bänder (und damit die effektive Masse) aber nicht ändert. Die Lage der Bandkanten des Zentralbereichs an der Kanal-Kontakt-Grenzfläche wird so eingestellt, dass diese mit den effektiven Bandkanten im Kontakt übereinstimmen. Dies geschieht über den Parameter der Schottky-Barriere, welcher auf 0.013 eV gesetzt wird.

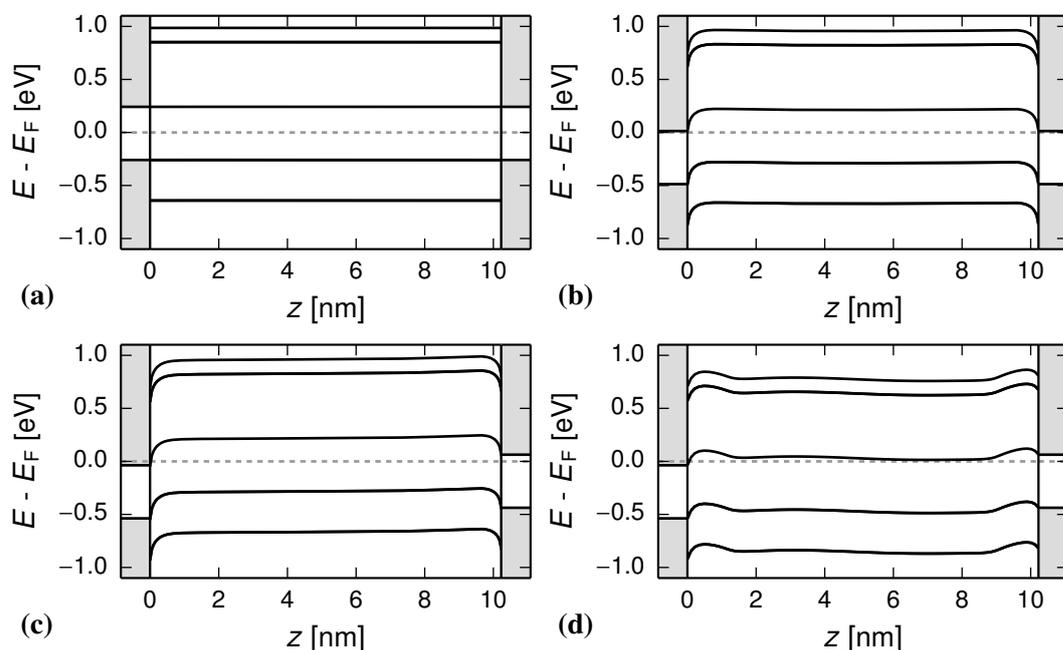
### 5.1.2. Einfluss verschiedener Faktoren auf das Kohlenstoffnanoröhrchen

Als Startpunkt für die späteren Diskussionen ist es hilfreich, zuerst den Einfluss unterschiedlicher Faktoren (Dotierung, Drain-Source-Spannung, Gate) auf das Verhalten des untersuchten CNTFETs zu untersuchen. In Abb. 5.1 sind die in den Rechnungen berücksichtigten Teilbänder (vier Valenz- und vier Leitungsbande) für unterschiedliche Systeme dargestellt. Außerdem eingezeichnet sind die effektiven Bandkanten zur Beschreibung der Kontaktphysik. Bereiche, aus denen Ladungsträger von den Kontakten in den Kanal injiziert werden können, sind markiert.

In Abb. 5.1a sind die Bandkanten eines Systems, dessen Kanal aus einem (7,0)-CNT besteht und wo die Parameter in den Kontakten ebenfalls entsprechend eines (7,0)-CNT eingestellt wurden, zu sehen (das System ist also ein ideales völlig undotiertes CNT). Die Länge des Kanals ist  $L_{\text{ch}} = 10.2$  nm. Es zeigt sich keine Verbiegung der Teilbänder, die Fermienergie liegt mittig der Bandlücke. Die Bandlücke ist dabei gut erkennbar und liegt zwischen  $-0.25$  eV und  $0.25$  eV.

Das System nach Dotierung der Kontakte ist in Abb. 5.1b zu sehen. Durch die Dotierung der Kontakte mit 0.05 Elementarladungen liegt die Fermienergie in diesen Bereichen näher an der Leitungsbandkante, da Zustände des Valenzbandes besetzt werden. Die Bandkanten im Kanal werden zur Modellierung der Ohmschen Kontakte an die effektiven Kontakt-Bandkanten fixiert (an der Kontakt-Kanal-Grenzfläche). Daraus resultiert eine Verbiegung der Bandkanten im Kanal nahe den Kontakten. Für Elektronen ergibt sich somit eine Barriere inmitten des Kanals, die in Abb. 5.1b gut erkennbar ist.

Durch Anlegen einer Potentialdifferenz  $V_{\text{ds}}$  zwischen den Kontakten (in der Arbeit wird eine Drain-Source-Spannung von  $V_{\text{ds}} = 0.1$  V verwendet), resultiert zwischen Source- und Drain-Elektrode eine Asymmetrie, die in Abb. 5.1c zu sehen ist. Da die Fermienergie in



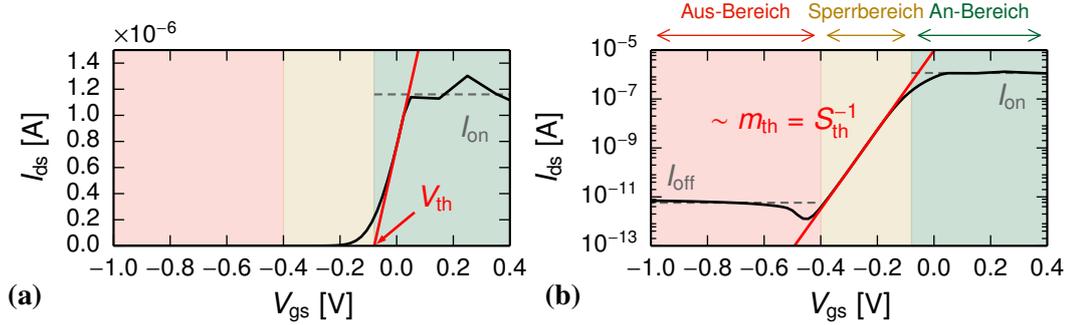
**Abb. 5.1.:** In der Rechnung berücksichtigte Teilbänder für unterschiedliche Systeme: das reine CNT (a), nach Dotierung der Kontakte (b), nach Anlegen einer Drain-Source-Spannung von 0.1 V (c) und nach Hinzufügen eines Gates mit  $V_{gs} = 0$  (d). Links und rechts ist jeweils Source- und Drain-Kontakt mit den effektiven Bandkanten angedeutet (Energiebereiche, in denen Ladungsträger aus den Kontakten in den Kanal injiziert werden können, sind grau hervorgehoben), dazwischen befindet sich der Kanalbereich. Eine grau gestrichelte Linie kennzeichnet die Fermienergie.

der Source-Elektrode näher an der Leitungsbandkante liegt als die Fermienergie der Drain-Elektrode, können Elektronen vom Source zum Drain-Kontakt fließen.

Schließlich zeigt Abb. 5.1d das System nach Hinzufügen eines Gates ( $L_g = 7.7$  nm,  $L_{spac} = 1.3$  nm) mit gleichem Potential wie dem Source-Kontakt ( $V_{gs} = 0$ ). Die Angleichung des Potentials im Kanal an den Source-Kontakt führt während der Selbstkonsistenzrechnung auch zu einer Angleichung der Elektronendichte im Kanal. Dadurch werden die Bandkanten im Kanal zu negativen Energien verschoben und die Leitungsbandkante befindet sich nahe der Fermienergie. Die Barriere inmitten des Kanals wird so reduziert. Zwei kleine Barrieren sind in Abb. 5.1d jeweils in der Nähe der Kontakte erkennbar. Dies sind genau die Bereiche, die nicht mit einem Gate ummantelt sind (also die Spacer-Bereiche).

Nachdem nun die unterschiedlichen Einflüsse auf das reine (7,0)-CNT vorgestellt wurden, stellt sich die Frage nach dem Verhalten des Transistors bei Variation der Gate-Source-Spannung  $V_{gs}$ . Der Einfluss der Gate-Source-Spannung wird im Folgenden untersucht.

## 5. ERGEBNISSE UND DISKUSSION



**Abb. 5.2.:** Transfercharakteristik des im Text besprochenen Transistors, bei welchen drei Regime gefunden werden können: Aus-Bereich (rot), Sperrbereich (gelb) und An-Bereich (grün). **a)**  $I_{ds}$  als lineare Skala. Über die Nullstelle der roten Gerade ist die Schwellspannung  $V_{th}$  definiert. **b)**  $I_{ds}$  logarithmisch aufgetragen. Der Anstieg der Gerade entspricht dem Subthreshold-Anstieg  $m_{th}$ , das Inverse ist der Subthreshold-Swing  $S_{th}$ .

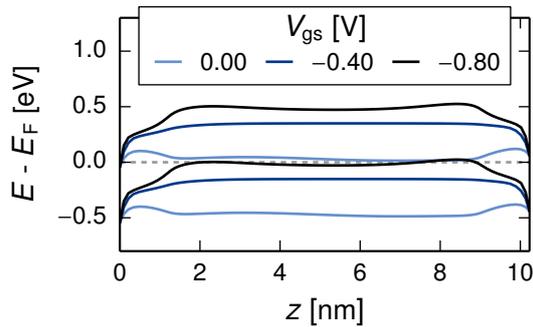
### 5.1.3. Transistorverhalten und Transistorregime

Abb. 5.2 zeigt die Transfercharakteristik eines Transistors mit  $L_{ch} = 10.2$  nm,  $L_g = 7.7$  nm und  $L_{spac} = 1.3$  nm. Es zeigen sich dabei die in Kap. 2.3 vorgestellten drei Regime (An-Bereich, Sperrbereich, Aus-Bereich), die im Folgenden systematisch untersucht werden.

#### An-Bereich

Die anhand der Transfercharakteristik in linearer Darstellung extrahierte Schwellspannung liegt bei  $V_{th} = -0.08$  V (vergleiche Abb.5.2a). Für größere Gate-Source-Spannungen ist der Transistor im An-Bereich und ein An-Strom von circa  $I_{on} = 1.2 \times 10^{-6}$  A fließt (eingezeichnet in Abb. 5.2). Dies resultiert aus der Leitungsbandkante, die sich, wie im letzten Kapitel diskutiert wurde, nahe der Fermienergie befindet und die Barriere im Kanal dadurch klein ist. Die zum An-Strom gehörende Leitfähigkeit  $G$  beträgt  $0.15 G_0$  und liegt somit deutlich unter der Leitfähigkeit eines einzelnen idealen Zustands. Ursache sind hierfür die Kontakte. In diesen wird durch die Dotierung die Fermienergie, wie zum Beispiel in Abb. 5.1d zu sehen ist, nur knapp unter die Leitungsbandkante verschoben. Eine höhere Dotierung der Kontakte vergrößert deren Leitfähigkeit und damit den An-Strom weiter, was in Kap. 5.2.3 mit atomistischen Rechnungen genauer untersucht wird.

Da durch den Zufluss der Elektronen aus den Kontakten auch der Kanal für  $V_{gs} = 0$  dotiert ist, ähnelt der untersuchte Transistor einem sogenannten n-n-n-Transistor stark. Ein solcher Transistor wurde zum Beispiel bei experimentellen Untersuchungen in Ref. [81] untersucht, der sich für  $V_{gs} = 0$  ebenfalls im An-Zustand befand.



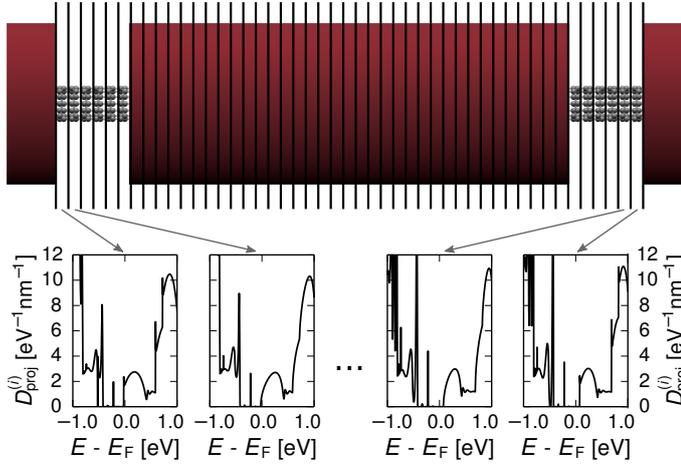
**Abb. 5.3.:** Leitungs- und Valenzbandkante für unterschiedliche Gate-Source-Spannungen  $V_{gs}$  des im Text besprochenen Transistors.

### Sperrbereich

Mit abnehmender Gate-Source-Spannung  $V_{gs}$  nimmt der Strom ab und der Transistor schaltet aus beziehungsweise der Stromfluss wird gesperrt. Um diesen Effekt zu verstehen, sind in Abb. 5.3 die Bandkanten des Systems für unterschiedliche Gate-Source-Spannungen dargestellt. Es zeigt sich, dass durch Anlegen einer negativen Spannung die Zustände im Kanal zu höheren Energien verschoben werden (in Übereinstimmung mit den Ausführungen in Kap. 2.3). Dadurch stehen nahe der Fermienergie weniger Zustände zur Verfügung, die Barriere für Elektronen wird also größer und der fließende Strom nimmt ab. Die Transfercharakteristik zeigt exponentielles Verhalten in diesem Bereich und kann, wie in Kap. 2.3 vorgestellt wurde, in logarithmischer Darstellung durch eine Gerade gut approximiert werden (eingezeichnet in Abb. 5.2). Der  $S_{th}$  beträgt hier  $S_{th} = 61$  mV/dec. Dieser liegt sehr nah bei  $\approx 60$  mV/dec, dem theoretischen Limit konventioneller MOSFETs bei Raumtemperatur (Kap. 2.3).

### Aus-Bereich

Der Transistor sperrt bis zu einer Gate-Source-Spannung von circa  $V_{gs} < -0.4$  V. Für größere negative Gate-Source-Spannungen ist der Transistor im Aus-Bereich. Er zeigt außerdem ein leicht ambipolares Verhalten. Betrachtet man exemplarisch die Valenz- und Leitungsbandkante für  $V_{gs} = -0.8$  V in Abb. 5.3, so zeigt sich, dass für diesen Fall die Valenzbandkante durch das Gate bis hin zur Fermienergie verschoben wird. Es steht somit für den Ladungstransport zur Verfügung und der in Kap. 2.3 vorgestellte Band-zu-Band-Tunnelstrom wird ermöglicht. Der durch die in Kap. 2.3.3 vorgestellte Mittelung berechnete Aus-Strom beträgt circa  $5.8 \times 10^{-12}$  A, woraus sich für den untersuchten Transistor ein An/Aus-Verhältnis von  $R_{on/off} = 2 \times 10^5$  ergibt.

**Abb. 5.4.:**

Schema zur Verwendung von  $D_{\text{proj}}$  für die Berechnung der orts aufgelösten Zustandsdichte. Der Transistor wird in  $2N_{\text{cnt}}$  Teilstücke unterteilt (oben) und anschließend wird für jedes Teilstück die projizierte Zustandsdichte  $D_{\text{proj}}^{(i)}$  berechnet (unten).

## 5.2. Atomistische Simulation

Die atomistischen Rechnungen wurden mithilfe des Programmpakets ATK [46–49] durchgeführt. Dieses bietet zahlreiche Methoden zur Elektronenstrukturrechnung und außerdem einen Transportformalismus auf Basis des NEGF. Für diese Arbeit wird, sofern nicht anders angegeben, die EHT zur Elektronenstrukturrechnung genutzt. In Anh. B können die wesentlichen Simulationsparameter gefunden werden. Ein Vergleich zwischen EHT und DFT wird in Anh. C gegeben.

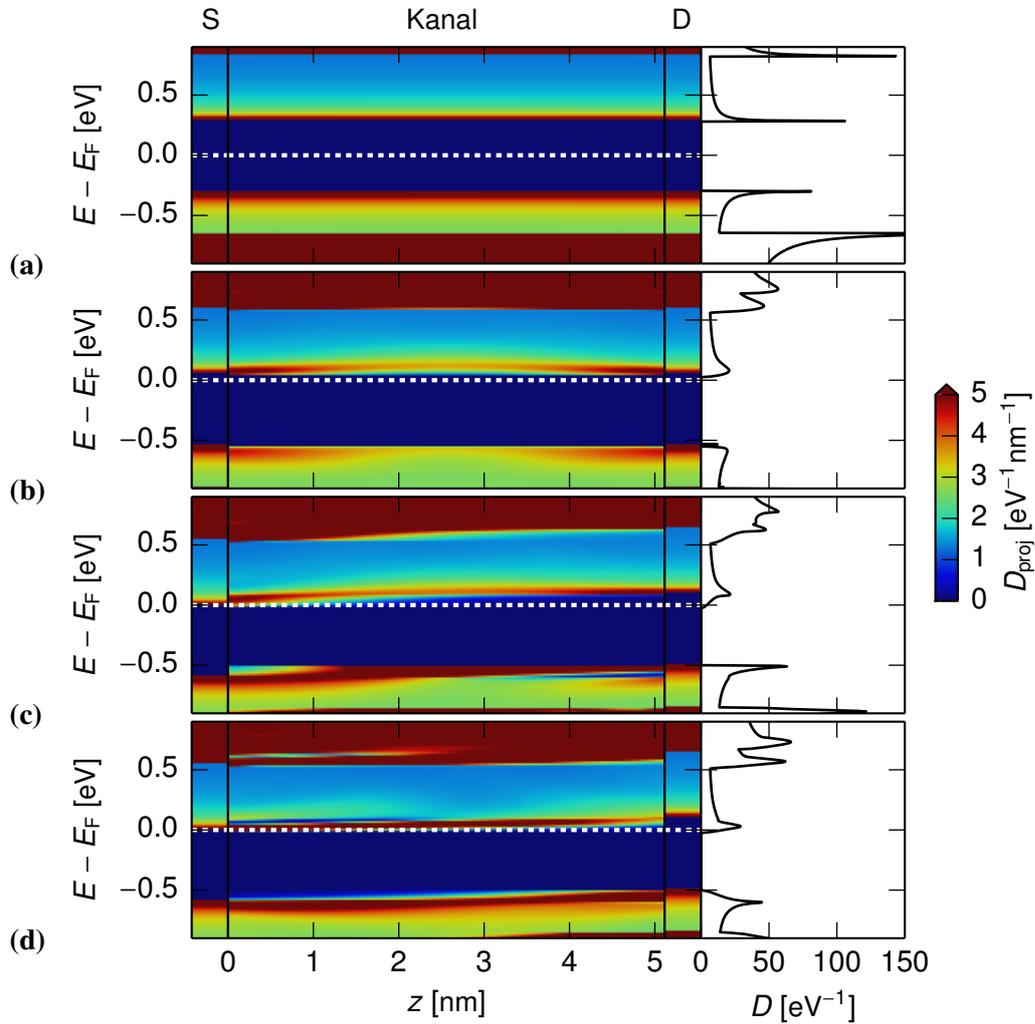
### 5.2.1. Einfluss verschiedener Faktoren auf das Kohlenstoffnanoröhrchen

Wie bei den Untersuchungen zur NDS im letzten Kapitel soll im Folgenden der Einfluss unterschiedlicher Faktoren (Dotierung, Drain-Source-Spannung, Gate) auf das Verhalten des CNTFETs untersucht werden. Zu diesem Zweck wird die in Kap. 3.1.3 vorgestellte projizierte Zustandsdichte  $D_{\text{proj}}$  verwendet. Der Transistor wird in  $z$ -Richtung in  $2N_{\text{cnt}}$  Abschnitte unterteilt, wobei  $N_{\text{cnt}}$  die Anzahl der CNT-Einheitszellen ist (siehe Abb. 5.4). Die projizierte Zustandsdichte des  $i$ -ten Teilstücks,  $D_{\text{proj}}^{(i)}$  entspricht somit der Zustandsdichte einer halben CNT-Einheitszelle.

Abb. 5.5 zeigt die so ermittelten  $D_{\text{proj}}^{(i)}$  als Funktion der Position entlang dem Transistor. Auch die gesamte Zustandsdichte  $D$ , für welche  $D = \sum_i D_{\text{proj}}^{(i)}$  gilt, ist gezeigt. Der hier untersuchte Transistor hat eine Kanallänge von 5.1 nm, die Ausführungen sind jedoch auch für andere Kanallängen gültig.

In Abb. 5.5a ist das ideale undotierte CNT zu sehen. Die für eindimensionale Systeme typischen Van-Hove-Singularitäten der Zustandsdichte sind gut erkennbar. Die Fermienergie liegt mittig der Bandlücke.

Die in Kap. 4.3 beschriebene effektive Dotierung fügt den Elektroden negative Ladung hinzu, wodurch unbesetzte Zustände in den Leitungsbändern besetzt werden. Dadurch verschiebt



**Abb. 5.5.:** Projizierte Zustandsdichte  $D_{\text{proj}}$  für unterschiedliche Systeme  $L_{\text{ch}} = 5.1 \text{ nm}$ : das reine CNT (a), nach Dotierung der Kontakte (b), nach Anlegen einer Drain-Source-Spannung von  $0.1 \text{ V}$  (c) und nach Hinzufügen eines Gates mit  $V_{\text{gs}} = 0$  (d). Links und rechts ist jeweils eine Einheitszelle der Source- und Drain-Elektrode zu sehen, dazwischen befindet sich der Kanalbereich. Die zugehörige Zustandsdichte  $D$  des Kanals ist rechts zu sehen. Eine weiß gestrichelte Linie kennzeichnet die Fermienergie  $E_{\text{F}}$ .

sich die Fermienergie in den Kontakten (Abb. 5.5b). Auch im Zentralbereich verschiebt sich die Fermienergie infolge von Ladungsträgern, die aus den Kontaktregionen in den Kanal diffundieren. Dieser Vorgang geht mit der Entstehung eines elektrischen Feldes einher, wodurch die Bewegung der Elektronen gestoppt wird. Inmitten des Kanals sind dadurch weniger Zustände als in den Kontakten besetzt, so dass eine Bandverbiegung des Leitungsbandes erkennbar ist. Das Valenzband wird auch beeinflusst, zeigt jedoch keine Verbiegung. Der Grund wird in Kap. 5.2.2 ausführlich besprochen.

Durch Anlegen einer Potentialdifferenz  $V_{ds}$  zwischen den Kontakten (in der Arbeit wird  $V_{ds} = 0.1$  V verwendet) resultiert zwischen Source und Drain eine Asymmetrie, zu sehen in Abb. 5.5c. Elektronen fließen in diesem Fall vom Source- zum Drain-Kontakt.

Schließlich zeigt Abb. 5.5d das System nach Hinzufügen eines Gates mit gleichem Potential wie dem Source-Kontakt ( $V_{gs} = 0$ ). Die Angleichung des Potentials im Kanal an den Source-Kontakt führt während der Selbstkonsistenzrechnung auch zu einer Angleichung der Elektronendichte in diesen Bereichen. Dadurch sind, wie im Source-Kontakt, nun Zustände nahe der Fermienergie und es kann ein Drain-Source-Strom  $I_{ds}$  fließen.

An der Grenzfläche zwischen Kanal und Kontakt ist die Zustandsdichte in allen Fällen stetig (die scheinbaren Sprünge in Abb. 5.5 haben numerische Ursachen und resultieren nur aus der groben Auflösung von  $D_{proj}$  im Zentralbereich), was somit auch für die Bandkanten gilt. Es bilden sich also keine Schottky-Barrieren, sondern es liegen ideale Ohmsche Kontakte vor.

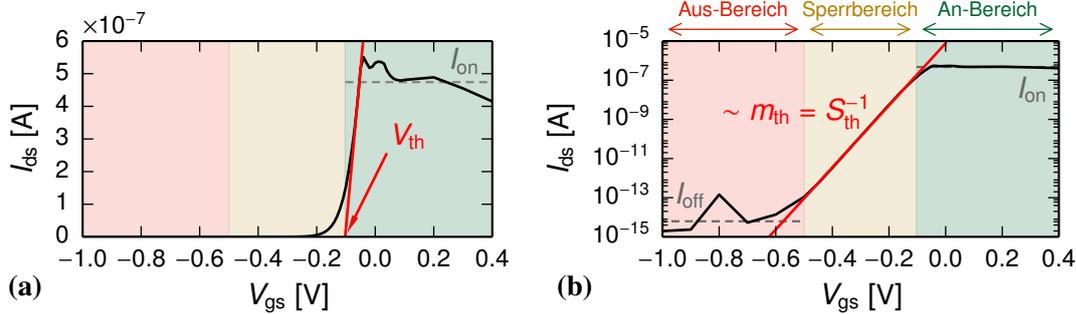
Der Vergleich zwischen Abb. 5.5d mit den zugehörigen Bandkanten aus der NDS (Abb. 5.1d) zeigt hinsichtlich der Lage von Leitungs- und Valenzbandkante gute Übereinstimmung, da in beiden Fällen durch das Gate die Leitungsbandkante im Kanal an den Source-Kontakt angeglichen wird. Als nächstes soll der Einfluss der Gate-Source-Spannung  $V_{gs}$  auf den Transistor mit dem atomistischen Ansatz untersucht werden.

### 5.2.2. Transistorverhalten und Transistorregime

Abb. 5.6 zeigt die Transfercharakteristik eines Transistors mit  $L_{ch} = 10.2$  nm,  $L_g = 7.7$  nm und  $L_{spac} = 1.3$  nm. Wie bei der Untersuchung zur NDS werden die drei Regime (An-Bereich, Sperrbereich, Aus-Bereich) im Folgenden systematisch untersucht.

#### An-Bereich

Die aus Abb. 5.6a über die in Kap. 2.3.3 vorgestellte Extrapolationsmethode extrahierte Schwellspannung beträgt  $-0.13$ . Oberhalb dieser befindet sich der Transistor im An-Bereich und ein An-Strom von circa  $I_{on} = 4.7 \times 10^{-7}$  A fließt. Wie in Kap. 5.2.1 diskutiert, sind für diesen Strom Zustände nahe der Fermienergie ursächlich, die einen Elektronentransport ermöglichen. Die zum An-Strom gehörende Leitfähigkeit  $G$  beträgt  $0.06 G_0$ , ist also wie bei der NDS deutlich unter einem Leitfähigkeitsquant. Durch Anlegen einer höheren Gate-Source-Spannung zeigt sich nur ein minimaler Rückgang des An-Stroms. Der Effekt ist



**Abb. 5.6.:** Wie Abb. 5.2, allerdings mit dem atomistischen Ansatz berechnet.

klein und für Anwendungen nicht relevant und muss an dieser Stelle nicht weiter untersucht werden.

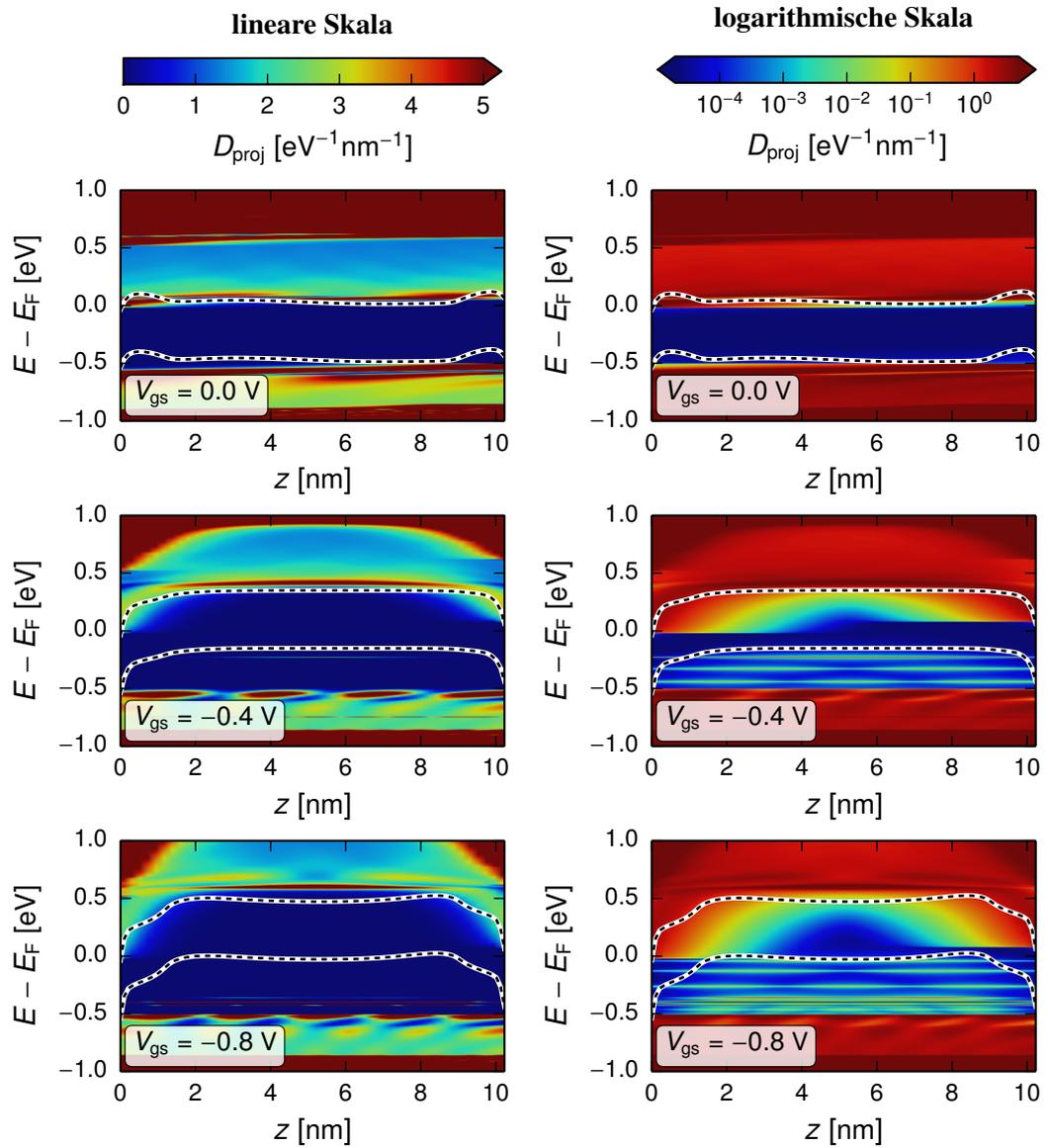
### Sperrbereich

Mit kleiner werdender Gate-Source-Spannung nimmt der Strom ab und der Transistor schaltet. In Abb. 5.7 links ist die projizierte Zustandsdichte für unterschiedliche Gate-Source-Spannung in linearer Skala aufgetragen. Es zeigt sich, dass durch Anlegen einer negativen Spannung die Zustände der Leitungsbandkante zu höheren Energien verschoben werden und somit nahe der Fermienergie weniger Zustände für den Transport zur Verfügung stehen. Die Transfercharakteristik kann in logarithmischer Darstellung in diesem Bereich wie bei der NDS-Untersuchung durch eine lineare Gerade gut approximiert werden (Abb. 5.6b). Daraus ergibt sich für den Subthreshold-Swing  $S_{th} = 62 \text{ mV/dec}$ . In Übereinstimmung mit den NDS-Rechnungen liegt dieser Wert sehr nah am fundamentalen Limit konventioneller MOSFETs bei Raumtemperatur ( $\approx 60 \text{ mV/dec}$ ).

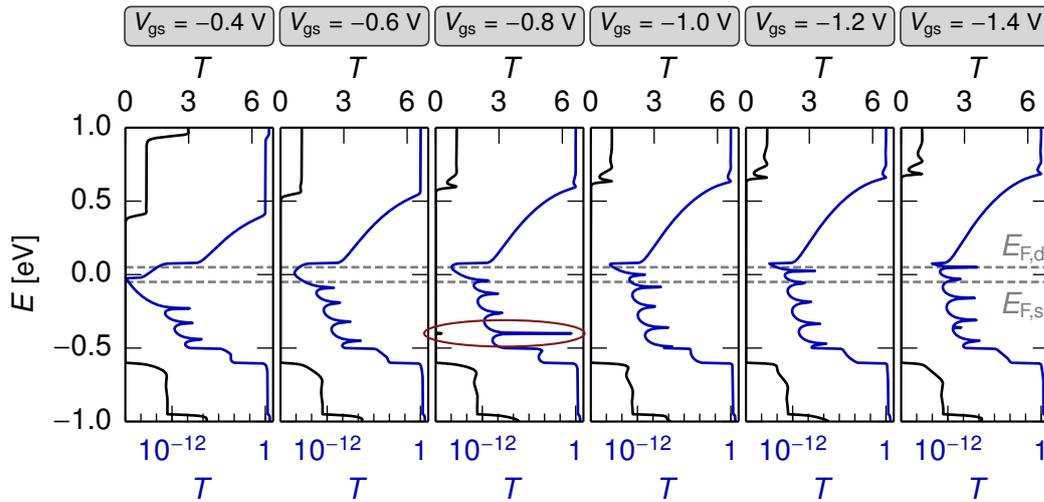
Hinsichtlich der Zustände des Valenzbandes zeigen sich in Abb. 5.7 links Resonanzeffekte, jedoch keine Verschiebung der Valenzbandkante (im Gegensatz zu den Ausführungen in Kap. 2.3 und 5.1). In Abb. 5.7 rechts ist die projizierte Zustandsdichte in logarithmischer Skala aufgetragen. Man erkennt, dass nur wenige Zustände in den Kanal verschoben werden. Dieser Effekt kann mittels dem Modell des Potentialtopfs erklärt werden, welcher sich aufgrund des Gates im Kanal befindet<sup>1</sup>. Es existieren dadurch nur einige *lokalisierte Zustände* innerhalb des Topfs, die für den Elektronentransport zur Verfügung stehen. Diese sind dabei außerdem

<sup>1</sup>Das einfachste analytische Modell für diesen Fall ist der eindimensionale Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden. Die diskreten Energieniveaus sind dabei gegeben durch  $E_n = \hbar^2 n^2 / (8m_e L_{\text{well}}^2)$ , wobei  $n$  die Quantenzahl und  $L_{\text{well}}$  die Breite des Topfes ist. Für einen Topf der Breite 3.5 nm sind die energetisch am niedrigsten liegenden Zustände ähnlich weit voneinander entfernt wie die in Abb. 5.7rechts erkennbaren quantisierten Zustände. Dieser Wert unterscheidet sich natürlich von der Länge des Gates ( $L_g = 7.7 \text{ nm}$ ) aufgrund der weitaus komplexeren Form des Potentialtopfs im Transistorkanal, liegt aber doch in der gleichen Größenordnung. Das unterstreicht nochmals das Bild des Potentialtopfs.

## 5. ERGEBNISSE UND DISKUSSION



**Abb. 5.7.:** Projizierte Zustandsdichte  $D_{\text{proj}}$  des Transistors in Abb. 5.6 für drei unterschiedliche Gate-Source-Spannungen  $V_{\text{gs}}$  (oben nach unten). Jeweils dargestellt ist  $D_{\text{proj}}$  des Kanals in linearer (links) und logarithmischer Skala (rechts). Die weiß-schwarzen Linien sind die Valenz- und Leitungsbandkanten, berechnet mit NDS (siehe Kap. 5.1).



**Abb. 5.8.:** Transmissionsfunktionen für den Aus-Zustand des Transistors von Abb. 5.6, jeweils in logarithmischer (blau) und linearer Skala (schwarz). Die Fermienergien von Source- und Drain-Kontakt ( $E_{F,s}$  sowie  $E_{F,d}$ ) sind als grau gestrichelte Linien eingezeichnet. Für  $V_{gs} = -0.8$  V ist die Spitze markiert, die aufgrund numerischer Artefakte zu einem Peak in der Transfercharakteristik führt (Abb. 5.2.2).

sehr schmal, da sie nicht mit Zuständen in den Kontakten koppeln können (dort befinden sich unterhalb der Fermienergie keine Zustände). Dieser Effekt kann durch das NDS-Modell nicht beschrieben werden, da dieses Modell auf Teilbändern basiert, die sich durch den Einfluss des Gates synchron verschieben. Ein detaillierter Vergleich zwischen NDS und EHT wird in Kap. 5.3 und 5.4 gegeben. Die Entstehung lokalisierter Zustände wurde auch von anderen Gruppen gezeigt [82–84], worauf in Kap. 5.5 nochmals eingegangen wird.

Für niedrige Gate-Source-Spannungen sind in Abb. 5.8 die Transmissionsspektren  $T(E)$  abgebildet. Da diese von der Anzahl der verfügbaren Zustände abhängen, zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie bei Betrachtung der Zustandsdichten. Dabei sind an den Positionen der diskreten Zustände (Abb. 5.7rechts) jeweils Transmissionsspitzen erkennbar. Zwar kann die Transmission an diesen Spitzen hoch sein (siehe zum Beispiel  $V_{gs} = -0.8$  in Abb. 5.8), doch aufgrund ihrer geringen Breite ist der Einfluss auf den Drain-Source-Strom vernachlässigbar.

Aus numerischen Gesichtspunkten zeigt sich infolge der Spitzen ein Problem aufgrund der Diskretisierung der Energiewerte<sup>2</sup> bei der numerischen Auswertung des Integrals der Landauer-Büttiker-Formel (3.20). Wird bei der Berechnung der Transmission eine der Spitzen sehr genau getroffen, so ergibt sich ein hoher Wert für die Transmission. Dieser Wert wird

<sup>2</sup>Die Transmissionsspektren wurden für 801 Energiepunkte im Intervall von  $-2$  eV bis einschließlich  $2$  eV berechnet.

entsprechend Gl. (3.20) mit dem Abstand benachbarter Energiepunkte multipliziert. Da dieser Abstand jedoch deutlich größer als die Breite einer der Spitzen ist, wird der Beitrag der Spitze zur Transmission und damit zum Drain-Source-Strom deutlich überschätzt.

Gut erkennbar ist dieser Effekt in Abb. 5.8. Hier zeigt die Transmission für  $V_{gs} = -0.8$  bei  $E = -0.4$  eV eine solche Spitze, was sich auch deutlich auf die Transfercharakteristik niederschlägt (Abb. 5.6). Um solche Spitzen in der Transmission auflösen zu können, ist ein adaptives Verfahren notwendig, was jedoch im Rahmen des atomistischen Ansatzes nicht mit vertretbarem Rechenaufwand möglich ist. Aufgrund ihrer äußerst kleinen Breite kann jedoch davon ausgegangen werden, dass ihr Einfluss auf den Drain-Source-Strom vernachlässigbar ist und die Spitzen in der Transfercharakteristik somit nur ein numerisches Artefakt sind. Für die Bestimmung des Aus-Stroms in den folgenden Kapiteln werden die Spitzen daher nicht mit berücksichtigt.

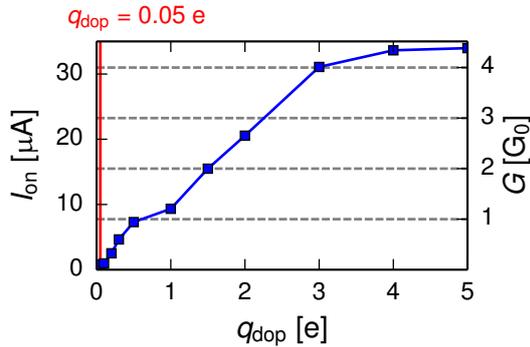
### Aus-Bereich

Ist  $V_{gs} < -0.5$  V so befindet sich der untersuchte Transistor im Aus-Bereich. Die Betrachtung der Transmissionsfunktionen in Abb. 5.8 zeigt für kleiner werdende Gate-Source-Spannungen einen Anstieg der Transmission nahe der Fermienergie. Dieser Effekt kompensiert die zunehmende Verschiebung der Leitungsbandkante zu höheren Energien und limitiert den Aus-Strom. Da entsprechend den obigen Ausführungen nur sehr wenige Zustände im Kanal vorhanden sind, spielt dieser Effekt nur bei vergleichsweise kleinen Gesamtströmen eine Rolle. Dadurch liegt der Wert des Aus-Stroms deutlich unter dem im Rahmen der NDS berechneten (Kap. 5.1.3), bei welcher mehr Zustände im Kanal zur Verfügung stehen (keine Beschreibung der lokalisierten Zustände bei NDS möglich) und dort daher der Band-zu-Band-Tunnelstrom den Drain-Source-Strom stärker limitiert (siehe das auch das folgende Kap. 5.3).

Der Aus-Strom beträgt  $6.2 \times 10^{-15}$  A, was ein An/Aus-Verhältnis von  $R_{on/off} = 7.5 \times 10^7$  ergibt. Experimentelle Untersuchungen liegen deutlich niedriger (in Ref. [14] wurde ein CNTFET mit  $L_{ch} = 20$  nm mit zylindrischem Gate untersucht, dieser ergab  $R_{on/off} = 10^4$ ). Ursächlich ist hier unter anderem ein Leckstrom vom Gate zum Drain-Kontakt. Diese können in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt werden, da ATK nur ein System mit zwei Kontakten ermöglicht und das Gate über Regelung des Potentials modelliert wird.

### 5.2.3. Einfluss der Dotierung

Wie in Kap. 4.3 diskutiert, werden die Kontakte in der Arbeit jeweils mit 0.05 Elektronen dotiert, wodurch die Fermienergie knapp unter die Leitungsbandkante verschoben wird. Die Rechnungen werden an einem Testsystem mit Kanallänge 4.2 nm und Spacern der Länge 0.8 nm durchgeführt. Hohe Dotierungen erschweren die Konvergenz der Rechnung, weshalb ein kleineres System für die Untersuchung der Dotierung genutzt wird. Entsprechend den späteren Ausführungen in Kap. 5.3 hat die Kanallänge hauptsächlich Einfluss auf den Aus-



**Abb. 5.9.:** Die An-Ströme  $I_{\text{on}}$  sowie die Leitfähigkeit  $G$  für unterschiedlich stark dotierte Kontakte. Vielfache des Leitfähigkeitsquants  $G_0$  sind grau gestrichelt markiert. Die rote Linie gibt die verwendete Dotierung in der Arbeit an. Der untersuchte Transistor hat eine Kanallänge von 4.2 nm und Spacer der Länge 0.8 nm.

Strom, nicht jedoch auf den An-Strom und die Ausführungen dieses Kapitels können daher auf längere Transistoren verallgemeinert werden.

Der An-Strom ist in Abb. 5.9 als Funktion der Dotierung, zusammen mit der Leitfähigkeit  $G$ , aufgetragen. Zu sehen ist ein Anstieg des An-Stroms beziehungsweise der Leitfähigkeit mit zunehmender Dotierung. Bei einer Dotierung von  $q_{\text{dop}} = 0.5 e$  wird dabei das Leitfähigkeitsquant  $G_0$  erreicht und durch noch höhere Dotierungen kann die Leitfähigkeit weiter gesteigert werden. Zu sehen ist außerdem, dass die in dieser Arbeit verwendete Dotierung von  $q_{\text{dop}} = 0.05 e$  vergleichsweise klein ist ( $G = 0.06 G_0$ ). Der An-Strom der in der Arbeit untersuchten Transistoren wird also durch die Dotierung der Kontakte limitiert und könnte für Anwendungen durch höhere Dotierungen gesteigert werden.

### 5.3. Variation der Kanallänge und Methodenvergleich

Ein Transistor mit Kanallänge  $L_{\text{ch}} = 10 \text{ nm}$  wurde in den letzten beiden Kapiteln mit dem Modell zur NDS und einem atomistischen Ansatz auf Basis des NEGF intensiv untersucht. In diesem Kapitel soll die Länge des Kanals, die ein wichtiger Parameter bei der Miniaturisierung der Transistoren ist, variiert und dabei die Unterschiede zwischen den Ergebnissen der EHT und der NDS diskutiert werden. Die Länge der Spacer ist konstant ( $L_{\text{spac}} = 1.279 \text{ nm}$ ) und die Gate-Länge somit unterschiedlich.

#### 5.3.1. Diskussion der Transfercharakteristiken

Abb. 5.10 zeigt die Transfercharakteristiken für unterschiedliche Kanallängen, wobei die Ergebnisse des atomistischen Ansatzes mit EHT und die Ergebnisse der NDS gegenübergestellt sind. Es können dabei in allen Fällen die in Kap. 2.3 vorgestellten Bereiche gefunden werden, welche nun schrittweise diskutiert werden.

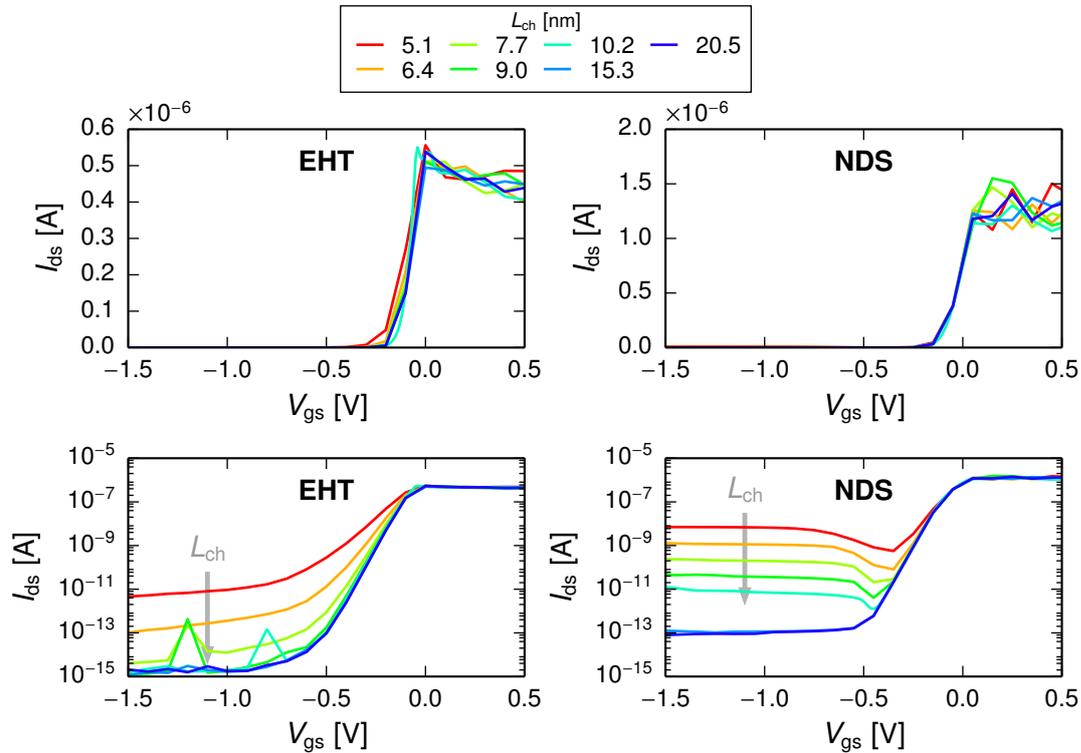
##### An-Bereich

Für den Bereich des An-Zustandes liegen die zugehörigen Ströme bei  $1.3 \times 10^{-6} \text{ A}$  (EHT) und  $4.8 \times 10^{-7} \text{ A}$  (NDS). Dieser Unterschied kann auf die unterschiedliche Modellierung der Kontakte zurückgeführt werden (beim atomistischen Ansatz werden die Elektroden im Rahmen einer Elektronenstrukturrechnung berechnet, bei NDS erfolgt die Beschreibung durch effektive Bandkanten). Da die Kontakte, wie in Kap. 5.2.3 diskutiert wurde, strombegrenzende Faktoren für den An-Zustand sind, könnte man für die NDS-Rechnungen die Parameter zur Beschreibung der Kontakte entsprechend einstellen um hier bessere Übereinstimmung zu erreichen. Für die nachfolgenden Untersuchungen ist dieser Unterschied im An-Strom jedoch unerheblich. Die An-Ströme sind für beide Methoden unabhängig von der Kanallänge, wie für ballistischen Transport auch zu erwarten ist.

##### Sperrbereich

Unabhängig von der Methode und Kanallänge, wird der Transistor bei Gate-Source-Spannungen unter Null ausgeschaltet. Für den Transistor mit Kanallänge  $L_{\text{ch}} = 10.2 \text{ nm}$  sind in Abb. 5.7 zu den mit EHT berechneten, projizierten Zustandsdichten noch die Valenz- und Leitungsbandkante, berechnet mit NDS, eingezeichnet (die NDS ermöglicht keine Berechnung der Zustandsdichte, da diese Methode auf Teilbändern basiert). Dabei zeigt die Leitungsbandkante der NDS-Rechnung wie auch die Leitungsbandkante im Fall atomistischer Rechnungen eine Verschiebung hin zu höheren Energien. Entsprechend nimmt die Transmission in den Bereichen nahe der Fermienergie ab und der Drain-Source-Strom sinkt.

Bezüglich der Valenzbandkante zeigen sich jedoch gravierende Unterschiede. In der EHT, wie in Kap. 5.2.2 detailliert vorgestellt, bewegen sich nur einige wenige Zustände in den Kanal, da in diesem Bereich durch das Feld der Gate-Elektrode ein Potentialtopf ausgebildet



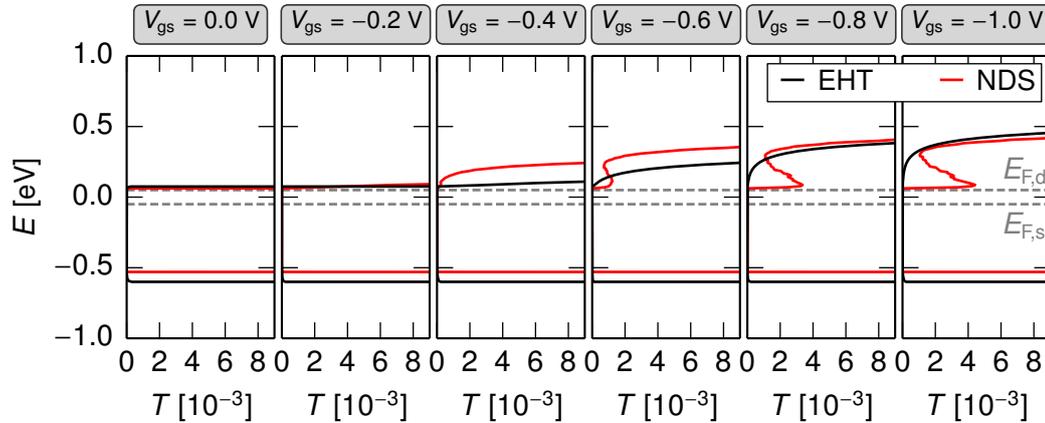
**Abb. 5.10.:** Transfercharakteristiken in Abhängigkeit der Kanallänge für den atomistischen Ansatz mit EHT (links) und die NDS (rechts). Oben in linearer Darstellung (die Achseneinteilungen links und rechts sind unterschiedlich aufgrund unterschiedlicher An-Ströme) und unten in logarithmischer Darstellung.

wird und in diesen nur wenige Zustände passen. Dieser Effekt kann im Rahmen der NDS nicht berücksichtigt werden, denn die effektive Beschreibung der CNT-Eigenschaften setzt eine sich nicht ändernde elektronischen Struktur entlang des CNTs voraus (vergleiche Kap. 5.1). Die NDS sagt also eine Verschiebung der Zustände der Valenzbandkante voraus, die aber aufgrund des Potentialtopfs im Kanal nicht möglich ist (da in den Potentialtopf nur wenige lokalisierte Zustände passen). Dieser Effekt kann nur mit dem atomistischen Ansatz beschrieben werden. Die Arbeiten anderer Gruppen unterstützen dabei die Ergebnisse der EHT-Rechnungen [82–84].

### Aus-Bereich

Für hohe negative Gate-Source-Spannungen zeigt sich in Abb. 5.10 bei NDS-Rechnungen ein Anstieg des Stroms (für EHT bleibt der Strom annähernd konstant). Das tritt dann ein, wenn die Zustände der Valenzbandkante die Fermienergie erreichen und so der Band-zu-Band-

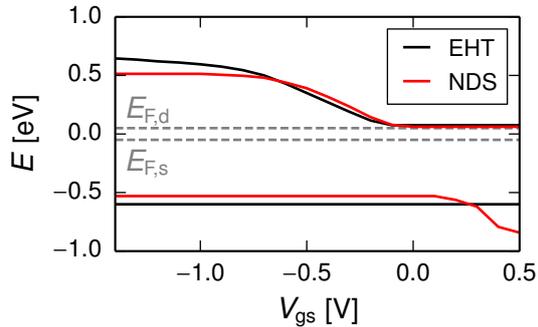
## 5. ERGEBNISSE UND DISKUSSION



**Abb. 5.11.:** Transmissionsfunktionen für verschiedene  $V_{gs}$ ,  $L_{ch} = 5.1$  nm, berechnet mit EHT (schwarz) und NDS (rot). Die Fermienergien der Kontakte sind eingezeichnet.

Tunneleffekt ermöglicht wird (vergleiche Kap. 5.1.3). Die Transmission für beide Ansätze ist in Abb. 5.11 dargestellt. Für  $V_{gs} > -0.4$  V zeigt sich ein Anstieg der Transmission im Bereich um 0.05 eV für NDS-Ergebnisse, welchen aus dem Band-zu-Band-Tunneleffekt resultiert. Atomistische Rechnungen mit EHT ergeben im Gegensatz, dass im Kanal keine Bänder, sondern nur sehr wenige diskrete Zustände für den Transport zur Verfügung stehen. Der Band-zu-Band-Tunneleffekt kann dadurch nicht stattfinden, weshalb sich auch in Abb. 5.11 keine Vergrößerung der Transmission im entsprechenden Bereich zeigt und somit in Abb. 5.10 der Drain-Source-Strom für negative Gate-Source-Spannung nicht erneut ansteigt.

Zusätzlich zum Auftreten des Band-zu-Band-Tunnelstroms zeigt der direkte Vergleich noch ein anderer Unterschied bei Betrachten der Transmission. Um die Verschiebung der Bandkanten (die sich in der Transmission widerspiegelt) zu quantifizieren, ist in Abb. 5.12 diejenige Energie als Funktion der Gate-Source-Spannung aufgetragen, bei welcher die Transmission erstmals einen Wert von 0.1 überschreitet (die zum Band-zu-Band-Tunneleffekt gehörende Transmission wird dadurch ausgeblendet). Diesbezüglich zeigt sich in Abb. 5.12 für  $V_{gs} < -0.8$  V bei den NDS-Ergebnissen kaum noch eine Änderung mit der Gate-Source-Spannung (die Bandkanten werden nicht weiter verschoben). Im Gegensatz dazu, verschiebt sich im Fall der EHT-Rechnungen die durch die Leitungsbandkante verursachte Transmission weiter zu höheren Energien. Erneut ist die Erklärung für diesen Unterschied in der Entstehung lokalisierter Zustände zu finden. Wenn im Fall der NDS die Valenzbandkante die Fermienergie erreicht wird eine weitere Verschiebung aufgrund der dadurch vorhandenen Zustände nahe der Fermienergie erschwert. Im Gegensatz dazu sind bei den EHT-Rechnungen aufgrund des Potentialtopfs nur wenige lokalisierte Zustände nahe der Fermienergie vorhanden und das Gate verschiebt daher die Zustände weiter zu höheren Energien. Aufgrund dieser beiden Effekte kommt es bei EHT-Ergebnissen im Vergleich zu NDS-Resultaten zu einer deutlicheren Reduzierung des Aus-Stroms und das sich ergebende An/Aus-Verhältnis ist besser.



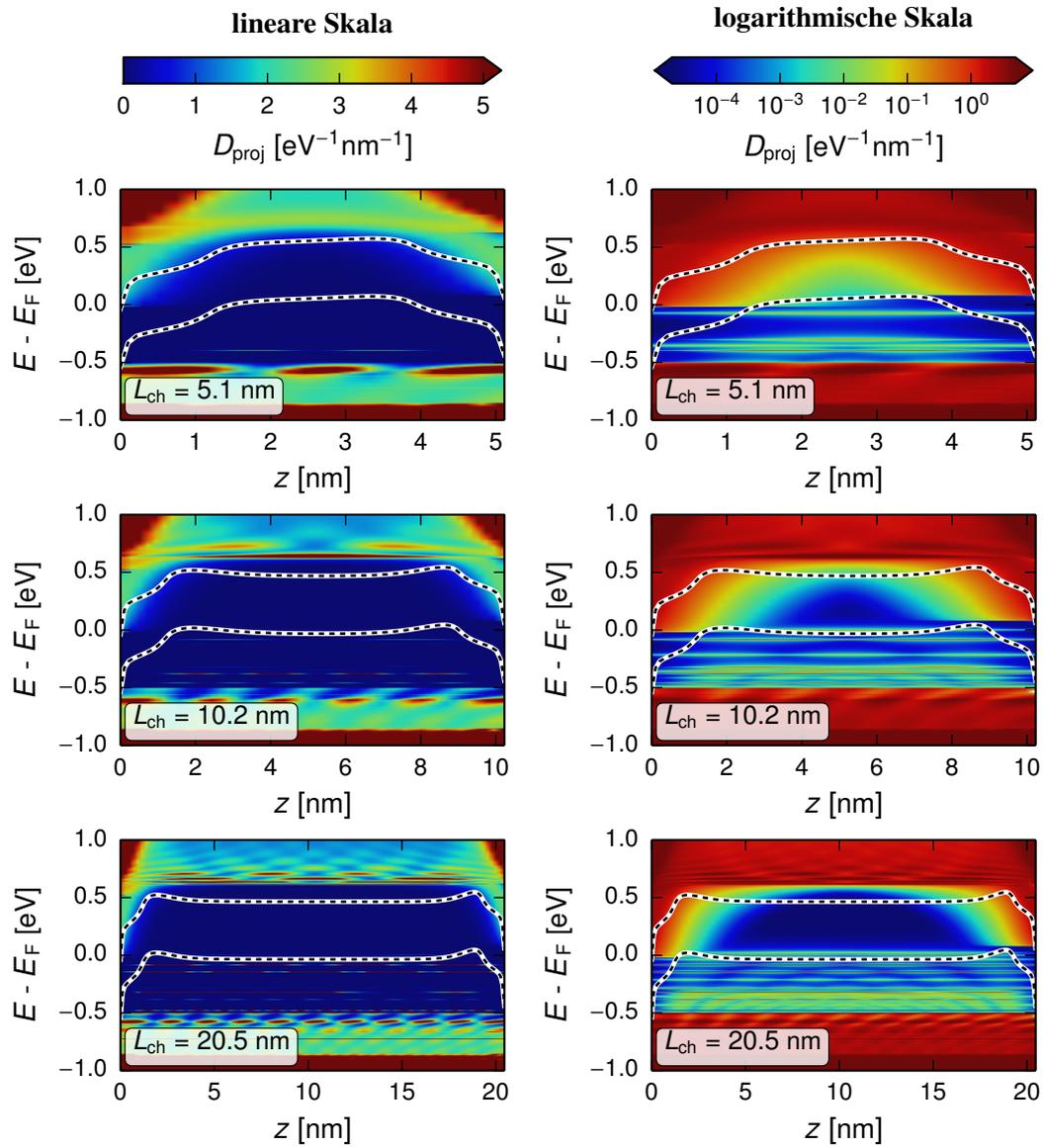
**Abb. 5.12.:** Energien, an welchen die Transmissionen erstmals einen Wert über 0.1 besitzen als Funktion von  $V_{gs}$  für den Transistor mit Länge  $L_{ch} = 5.1$  nm. Berechnet mit EHT (schwarz) und NDS (rot). Die Fermienergien der Kontakte sind eingezeichnet.

Vergleicht man die Transfercharakteristiken in Abb. 5.10 bei unterschiedlichen Kanallängen, so zeigen die Ergebnisse beider Methoden vergleichbare Trends. Bei NDS-Rechnungen nehmen sowohl die Beiträge des direkten Tunnelstroms und des Band-zu-Band-Tunnelstroms mit größer werdender Kanallänge ab und verschwinden ab einer Kanallänge oberhalb von 15.3 nm. Der Aus-Strom resultiert dann ausschließlich aus thermisch angeregtem Strom oberhalb der Barriere inmitten des Kanals. Da im ballistischen Regime der Widerstand unabhängig von der Länge ist, ist dieser Stromanteil für die untersuchten Transistoren gleich und die Aus-Ströme für Kanallängen größer 15.3 nm sind, aufgrund nicht vorhandener Tunnelströme, identisch.

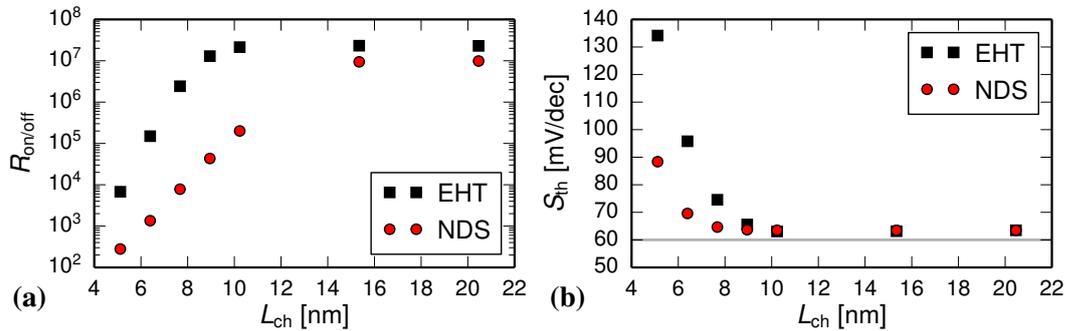
Auch im atomistischen Ansatz zeigt sich kein weiterer Rückgang des Aus-Stroms für Kanallängen oberhalb von 9 nm, da die Barriere im Kanal groß genug ist um ein Tunneln der Elektronen zu unterbinden (siehe Abb. 5.13). Für kürzer werdende Kanäle können zunehmend Elektronen diese Barriere durchtunneln und der Aus-Strom steigt an. Der Unterschied zwischen beiden Methoden hinsichtlich der Aus-Ströme für lange Transistoren, also der Anteil des thermisch angeregte Stroms, kann möglicherweise durch Einstellen der effektiven Bandkanten in den Kontakten im Rahmen des NDS-Modells reduziert werden (wie auch der An-Strom, wie weiter oben diskutiert wurde). Dies sollte in Zukunft auf Basis der Ergebnisse dieser Arbeit untersucht werden. Der aus dem Band-zu-Band-Tunneleffekt resultierende Unterschied zwischen beiden Methoden ist besonders für kurze Transistoren wesentlich. Deshalb weichen die Ergebnisse der NDS umso stärker vom atomistischen Ansatz ab, je kleiner der Transistor ist.

Schließlich hat die Kanallänge auch auf die lokalisierten Zustände im Kanal einen Einfluss. In Analogie zu einfachen Modellen wie dem Potentialtopf (eine vergleichende Rechnung am Beispiel des eindimensionalen Potentialtopfs ist in Kap. 5.2.2 zu finden) zeigt sich in Abb. 5.13 rechts, dass für kleine Kanallänge weniger Zustände in den Kanal passen. Diese liegen dabei weiter voneinander entfernt. Bei längeren Kanälen passen mehr Zustände in den Kanal, wie im Falle eines Transistors der Kanallänge 20.5 nm in Abb. 5.13 klar zu erkennen ist. Für noch größere Kanallängen gehen die diskreten Zustände im Kanal zunehmend in ein kontinuierliches Spektrum über.

## 5. ERGEBNISSE UND DISKUSSION



**Abb. 5.13.:** Projizierte Zustandsdichte  $D_{\text{proj}}$  für unterschiedliche Kanallängen (dadurch ist die Einteilung der  $z$ -Achse von oben nach unten unterschiedlich).  $V_{\text{gs}}$  beträgt in jedem Fall  $-1.0$  V. Die mit der EHT berechnete  $D_{\text{proj}}$  des Kanals ist farbig dargestellt. Die weiß-schwarzen Linien entsprechen Valenz- und Leitungsbandkante, berechnet mit NDS.



**Abb. 5.14.:** An/Aus-Verhältnis  $R_{on/off}$  und Subthreshold-Swing  $S_{th}$  in Abhängigkeit der Kanallänge  $L_{ch}$  für EHT- und NDS-Rechnungen. Das theoretische Limit von MOS-FETs ist rechts als graue Linie eingezeichnet.

### 5.3.2. Verhalten von An/Aus-Verhältnis und Subthreshold-Swing

Bisher wurde ein wesentlicher Einfluss der Kanallänge auf das Transistorverhalten und insbesondere den Aus-Strom beobachtet. Um das Verhalten zu quantifizieren, werden die in Kap. 2.3.3 eingeführten Kenngrößen nun genutzt.

Das An/Aus-Verhältnis ist als Funktion der Kanallänge in Abb. 5.14a dargestellt. Es wird dabei durch den Aus-Strom bestimmt, da der An-Strom aufgrund des ballistischen Transports nicht von der Kanallänge abhängt (bei beiden untersuchten Methoden). Da der Aus-Strom mit kleinerer Kanallänge ansteigt, wird das An/Aus-Verhältnis verringert. Beim Vergleich mit Experimenten [13, 14], bei welchen Werte um  $10^4$  erreicht wurden, zeigt der im Rahmen der Arbeit untersuchte Transistor ausgezeichnetes Transistorverhalten. Während die NDS bis zu  $L_{ch} = 8$  nm An/Aus-Verhältnisse über  $10^4$  zeigt, ist dies für EHT gar bis  $L_{ch} = 5$  nm der Fall. Ursache hierfür ist der in Kap. 5.1 diskutierte Band-zu-Band-Tunneleffekt, der im Rahmen der NDS-Rechnung den Aus-Strom stark beeinflusst. Die lokalisierten Zustände – wie durch die EHT korrekt vorhergesagt – verhindern diesen, da im Kanal kaum Zustände zur Verfügung stehen. Als Ergebnis zeigt der Transistor ein deutlich besseres An/Aus-Verhältnis als durch die NDS beschrieben wird.

Diese Ergebnisse lassen vermuten, dass ein dotierter Transistor für Anwendungen äußerst vielversprechend ist. Denn trotz der recht kurzen Kanallänge kann ein gutes An/Aus-Verhältnis erreicht werden. Um diese Annahme zu bestätigen, müssen in Zukunft weitere Untersuchungen durchgeführt werden. Einflüsse des Dielektrikums oder möglicher Dotierungsatome sind hier zum Beispiel interessant.

In Abb. 5.14b ist der Subthreshold-Swing als Funktion der Kanallänge aufgetragen. Der Transistor zeigt im Rahmen von EHT-Rechnungen bis circa 8 nm einen Subthreshold-Swing von unter 80 mV/dec, was im Vergleich zu experimentellen Ergebnissen sehr gut ist [13, 14]. Die NDS sagt sogar bis 7 nm einen Subthreshold-Swing von unter 80 mV/dec voraus. Für große Kanallängen liegen die Ergebnisse beider Methoden nahe bei 60 mV/dec, dem

theoretischen Limit klassischer MOSFETs (Kap. 2.3). Das kann auf die hervorragende elektrostatische Kontrolle des Kanals durch das zylindrische Gate zurückgeführt werden. Hinsichtlich des Schaltverhaltens zeigt sich zwischen NDS und EHT bei langen Kanälen außerdem eine gute Übereinstimmung.

### 5.4. Variation der Gate-Länge bei fester Kanallänge und Methodenvergleich

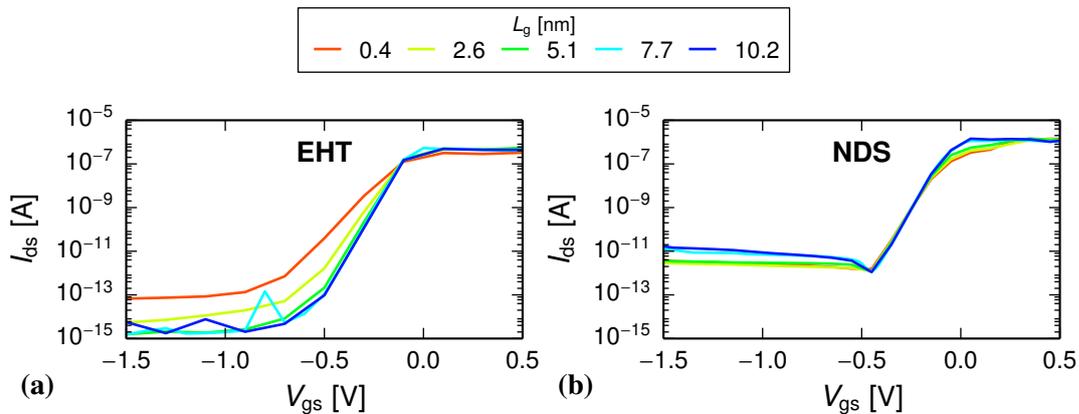
Im vorhergehenden Abschnitt wurde die Kanallänge variiert und dabei gleichzeitig auch die Gate-Länge angepasst. Um den Einfluss des Gates isoliert betrachten zu können, werden nun unterschiedliche Gate-Längen untersucht, wobei die Kanallänge  $L_{\text{ch}} = 10.2$  nm fest ist (die Länge der Spacer ist somit variabel).

Abb. 5.15a zeigt die Transfercharakteristiken, berechnet mit EHT, für unterschiedliche Gate-Längen. Die Ergebnisse zeigen einen Anstieg des Aus-Stroms mit kleiner werdender Gate-Länge. Der Grund ist in der in Abb. 5.16 links gezeigten projizierten Zustandsdichte für unterschiedliche Gate-Längen zu finden. Es zeigt sich, dass die Barriere inmitten des Kanals umso schmaler ist, desto kürzer das Gate ist (die Leitungsbandkante zeigt ein Abflachen nahe den Kontakten). Dies ist auf eine Reduzierung des Bereichs, in welchem das Gate den Kanal massiv beeinflusst, zurückzuführen. Als Resultat können für kurze Gate-Längen zusätzliche Elektronen die Barriere durchtunneln und der Aus-Strom steigt.

Eine Änderung der Gate-Länge hat bei EHT-Resultaten weitaus kleineren Einfluss auf den Aus-Strom als eine Änderung der Kanallänge (vergleiche Abb. 5.10 unten links und 5.15a). Selbst für ein sehr kurzes Gate der Länge 0.43 nm (eine Einheitszelle des (7,0)-CNTs) ist das An/Aus-Verhältnis mit  $4 \times 10^6$  noch sehr gut. Die im letzten Kapitel (5.3) beobachtete Änderung des Aus-Stroms resultiert also hauptsächlich aus der kürzeren Kanallänge. Eine weitere Änderung mit der Gate-Länge zeigt sich beim Subthreshold-Swing, der für kurze Gates eine Verringerung zeigt und das Schaltverhalten des Transistors somit schlechter wird. Für ein Gate der Länge 0.43 nm ist  $S_{\text{th}} = 90$  mV/dec. Dieser Effekt kann auf die reduzierte Kontrolle des Kanals durch das kleinere Gate zurückgeführt werden. Insgesamt legen die Ergebnisse aber nahe, dass auch mit extrem kurzem Gate noch immer eine relativ gute Kontrolle des Transistorkanals möglich ist.

In Abb. 5.16 rechts ist die projizierte Zustandsdichte in logarithmischer Darstellung aufgetragen. Betrachtet man die lokalisierten Zustände im Kanal, so zeigt sich ein Anstieg deren Anzahl für länger werdende Gates. Wie auch bei größeren Kanallängen (vergleiche Kap. 5.3) kann dieser Effekt auf einen breiteren Potentialtopf im Kanal zurückgeführt werden, in welchen mehr Zustände passen.

Die Ergebnisse der NDS unterscheiden sich in Abb. 5.15b von den EHT-Ergebnissen im Aus-Bereich drastisch (Abb. 5.15a), wo sich keine wesentliche Erhöhung des Aus-Stroms im Fall der NDS zeigt. Auch die Änderung des Subthreshold-Swings, wie im Falle der EHT-Rechnungen beobachtet, ist bei den NDS-Resultaten nicht vorhanden (vergleiche Abb. 5.15a



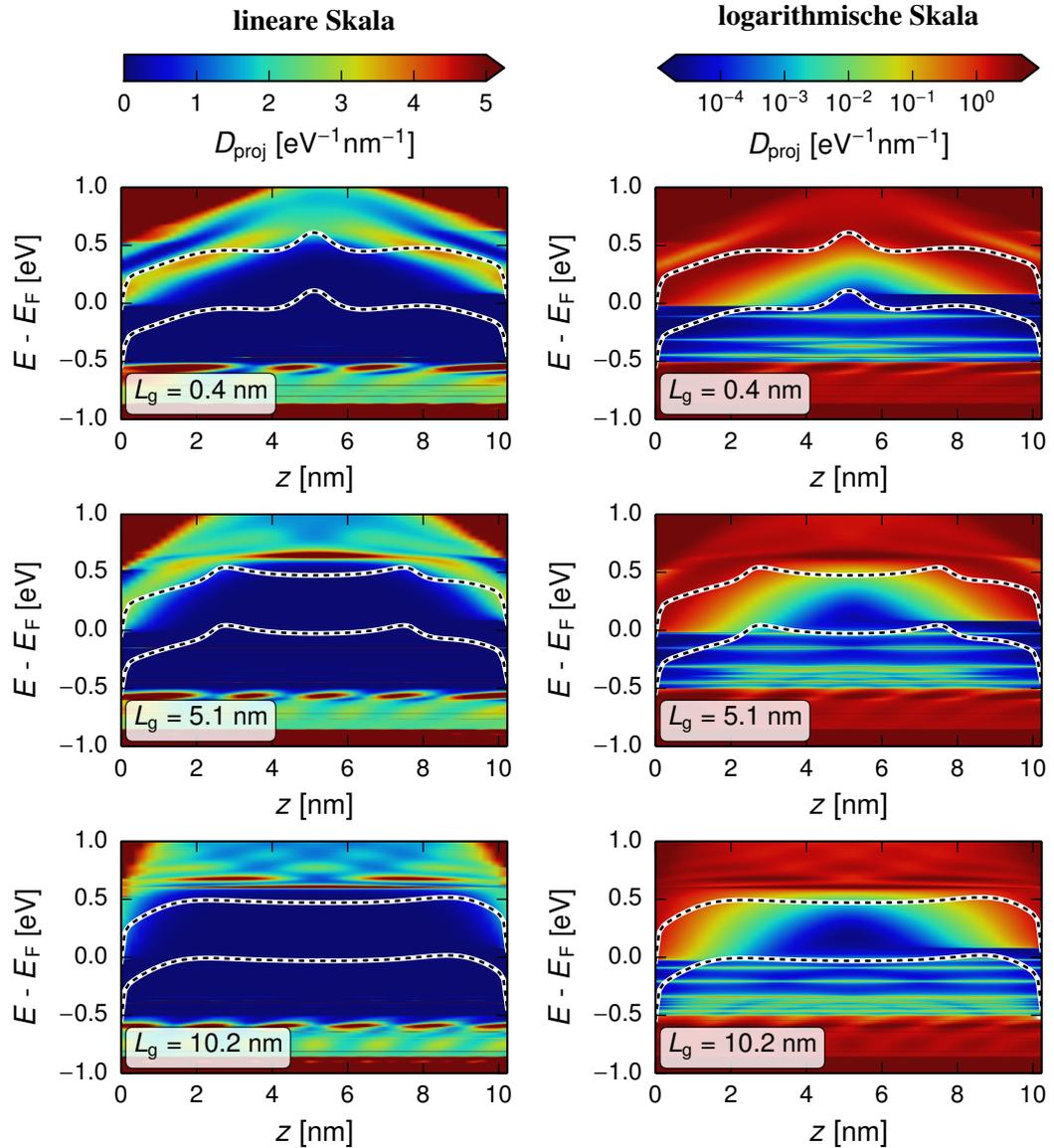
**Abb. 5.15.:** Transfercharakteristiken in Abhängigkeit der Gate-Länge für den atomistischen Ansatz mit EHT (a) und die NDS (b). Oben in linearer Darstellung (die Achseneinteilungen links und rechts sind unterschiedlich aufgrund unterschiedlicher An-Ströme) und unten in logarithmischer Darstellung.

und 5.15b). Um beides zu verstehen, sind in Abb. 5.16 zu den projizierten Zustandsdichten aus den EHT-Rechnungen die Bandkanten aus NDS-Rechnungen dargestellt. Betrachtet man bei den NDS-Bandkanten den Bereich nahe den Kontakten und vergleicht die Fälle für  $L_g = 5.1$  nm und  $L_g = 0.4$  nm miteinander, so unterscheiden sich die Bandkanten nicht wesentlich. Dies steht im Gegensatz zu den obigen Beobachtungen der projizierten Zustandsdichte aus atomistischen Rechnungen, wo die Bereiche nahe den Kontakten eine klare Abhängigkeit von der Gate-Länge – ein Abflachen der Leitungsbandkante für kurze Gates – zeigen (vergleiche Abb. 5.16). Im Rahmen der NDS-Rechnungen wird die Barriere inmitten des Kanals durch Variation der Gate-Länge kaum beeinflusst und die Transfercharakteristiken in Abb. 5.15b unterscheiden daher nur minimal voneinander.

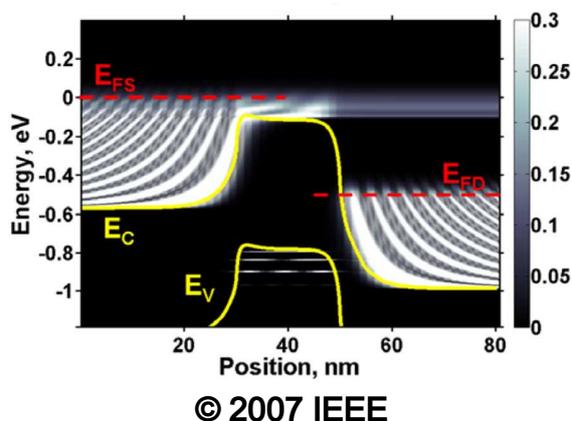
Das weist darauf hin, dass die Nachbildung der Ohmschen Kontakte durch einen für Transistoren mit Schottky-Barrieren entwickelten Modellansatz für ein System, in welchem die Änderung der elektronischen Struktur nahe den Kontakten für das Transportverhalten wesentlich ist, nicht ausreicht. Durch Erweiterung des NDS-Modells auf Ohmsche Kontakte könnte hier eine bessere Übereinstimmung ermöglicht werden. Da ein solches Modell zum Zeitpunkt der Arbeit nicht zur Verfügung stand, sind weitere Untersuchungen diesbezüglich in Zukunft notwendig.

Für lange Gates ist die Verbiegung der Leitungsbandkante aus NDS-Rechnungen mit der Leitungsbandkante aus atomistischen Rechnungen in guter Übereinstimmung (siehe zum Beispiel Abb. 5.16 für  $L_g = 10.2$  nm oder Abb. 5.7), woraus die gute Übereinstimmung in Kap. 5.3 folgt.

## 5. ERGEBNISSE UND DISKUSSION



**Abb. 5.16.:** Projizierte Zustandsdichte  $D_{\text{proj}}$  für unterschiedliche Gate-Längen. Die Gate-Source-Spannung beträgt in jedem Fall  $-0.9$  V. Die mit der EHT berechnete  $D_{\text{proj}}$  des Kanals ist farbig dargestellt. Die weiß-schwarzen Linien entsprechen Valenz- und Leitungsbandkante, berechnet mit der NDS.



**Abb. 5.17.:** Energieaufgelöste Elektronendichte, mit Erlaubnis aus KOSWATTA ET AL. [83] entnommen. Gut erkennbar sind lokalisierte Zustände im Kanal.

## 5.5. Abschließende Bemerkungen und Vergleich mit Literatur

Die atomistische Simulation zeigt die Entstehung diskreter Zustände im Kanal. Diese Beobachtung wurde dabei auch von anderen Gruppen bestätigt [82–84]. So untersuchten beispielsweise KOSWATTA ET AL. [83] ebenfalls einen CNTFET mithilfe des NEGF-Formalismus. Das untersuchte System hatte dabei eine Kanallänge von 20 nm und Kontakte der Länge 30 nm. Um ein derartig großes System zu untersuchen wurde die TBM als atomistischer Ansatz zur Elektronenstrukturrechnung verwendet. Auch hier wurden dotierte Kontakte untersucht, was einen Vergleich mit der vorliegenden Arbeit ermöglicht.

Die energieaufgelöste Elektronendichte für dieses System, mit Erlaubnis aus Ref. [83] entnommen, ist in Abb. 5.17 zu sehen. Bei den Untersuchungen von KOSWATTA ET AL. wurde eine deutlich höhere Drain-Source-Spannung von 0.5 V angelegt. Auch eine deutlich höhere Dotierung wurde verwendet, weshalb in Abb. 5.17 die Fermienergien der Kontakte weit oberhalb der Leitungsbandkanten liegen. Im Kanal ist die resultierende Barriere gut erkennbar. Die Valenzzustände sind in dieser Barriere lokalisiert, was sich mit den Beobachtungen der vorliegenden Arbeit deckt.

Das verwendete Modell zur NDS kann diesen Effekt nicht beschreiben, da eine konstante elektronische Struktur des CNTs entlang dem Transistor vorausgesetzt wird. Somit sind, im Vergleich zu den atomistischen Ergebnissen, deutlich mehr Zustände im Kanal vorhanden und ein Band-zu-Band-Tunneleffekt kann beobachtet werden. Es stellt sich die Frage, wann diese Annahme des NDS gültig ist. Für größer werdende Kanallänge nimmt die Anzahl der Zustände im Kanal zu, da der Potentialtopf breiter ist (wie in Kap. 5.3 beobachtet wurde). Im Grenzwert großer Transistoren, wo die Zustandsdichte im Kanal zunehmend kontinuierlich ist, ist eine effektive Beschreibung der Zustände, wie zum Beispiel im Rahmen der NDS in dieser Arbeit geschehen, ausreichend. Die Ergebnisse der Arbeit mit dem atomistischen Ansatz zeigen eine Unterdrückung des Band-zu-Band-Tunneleffekts infolge der Lokalisierung. Dadurch zeigte der Transistor ein deutlich besseres An/Aus-Verhältnis

## 5. ERGEBNISSE UND DISKUSSION

und das leicht ambipolare Verhalten, welches in Abb. 5.10 bei den mit NDS berechneten Transfercharakteristiken zu sehen ist, wird unterdrückt.

Im Gegensatz hierzu zeigten andere Arbeiten jedoch auftretende Band-zu-Band-Tunnelströme trotz lokalisierter Zustände im Kanal [45, 85]. Hier ist weiterer Forschungsbedarf gegeben, wobei zu klären ist, unter welchen Umständen diese Zustände Ladungstransport ermöglichen und dadurch der Band-zu-Band-Tunnelstrom anzutreffen ist. So zeigte sich in Ref. [45] eine starke Abhängigkeit von der Drain-Source-Spannung. Hier könnte auch ein Kombination mit anderen Faktoren wie der Länge der Spacer oder der Stärke der Dotierung wesentlich sein [80]. Weitere Untersuchungen zum Band-zu-Band-Tunneleffekt würden den Rahmen dieser Arbeit jedoch sprengen.

## 6. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

### Zusammenfassung der Ergebnisse

In der vorliegenden Arbeit wurde ein CNTFET mit dotierten Elektroden untersucht. Der untersuchte Transistor besitzt eine Länge von 10 nm, welche im Bereich aktueller experimenteller Forschungen liegt [13]. Es wurde ein zylindersymmetrisches Gate mit Vakuum als Dielektrikum verwendet. Für die Simulation wurden zwei unterschiedliche Ansätze untersucht: ein atomistischer Ansatz auf Basis des NEGF und ein Modell zur NDS auf Basis der Schrödinger-Gleichung in effektiver-Massen-Näherung.

Es wurde ein CNTFET mit dotierten Kontakten untersucht, da so die Anzahl der Atome im Vergleich zu Metallkontakten klein gehalten werden kann. Zur Realisierung der Dotierung wurde ein effektives Modell verwendet, welches die Untersuchung eines niedrigeren Dotierungsgrads ermöglicht. Es handelt sich dabei um n-dotierte Kontakte, wobei pro Kontakt 0.05 e hinzugefügt wurden. Dadurch befindet sich die Fermienergie knapp unterhalb der Leitungsbandkante. Der untersuchte Transistor besitzt an der Kanal-Kontakt-Grenzfläche dadurch Ohmsche Kontakte. Nach Hinzufügen eines Gates und für eine Gate-Source-Spannung von  $V_{gs} = 0$  diffundieren Elektronen aus den Elektroden in den Kanal und führen auch dort zu n-leitendem Verhalten. Es resultiert so ein n-n-n-Transistor, der sich bei  $V_{gs} = 0$  im An-Zustand befindet. Durch Anlegen einer negativen Gate-Source-Spannung werden die Zustände der Leitungsbandkante zu höheren Energien verschoben und der Transistor schaltet aus, da die Zustandsdichte an der Fermienergie sinkt.

Unter Verwendung des Programmpakets ATK wurden atomistische Untersuchungen auf Basis der EHT und des NEGF durchgeführt. Für die EHT wurden Parameter von ZIENERT ET AL. [75] verwendet. Die damit berechneten Ergebnissen zeigten gute Übereinstimmung mit DFT-Ergebnissen. Für die Interpretation des Transistorverhaltens wurde die projizierte Zustandsdichte verwendet, die sich hierfür als hervorragend geeignetes Werkzeug herausstellte. Darauf aufbauend wurde der untersuchte Transistor in einem Modell der NDS nachgebildet. Ausgehend von der DFT-Bandstruktur wurde ein Parametersatz für die kontinuierliche Beschreibung im Rahmen des NDS-Modells extrahiert. Da die verwendete Implementation für Transistoren mit Schottky-Barrieren entwickelt wurde, wurden die Ohmschen Kontakte durch Variation der verfügbaren Parameter (Höhe der Schottky-Barriere, Lage der Bandkanten in den Kontaktbereichen) nachgebildet. Dadurch ist ein systematischer Vergleich des NDS-Modells mit dem komplexeren NEGF-Ansatz möglich, da im Gegensatz zu experimentellen Referenzdaten interne Größen, wie beispielsweise die Transmission, verfügbar sind.

Der Vergleich der untersuchten Methoden erlaubt mehrere Schlussfolgerungen. In beiden Fällen ist der Transistor für Gate-Source-Spannungen von Null im An-Zustand und schaltet

für negative Gate-Source-Spannungen aus. Bei atomistischen Rechnungen zeigen sich für negative Gate-Source-Spannungen lokalisierte Zustände im Kanal, da sich durch das Feld der Gate-Elektrode ein Potentialtopf ausbildet. Diese Quanteneffekte können im Rahmen der NDS nicht beschrieben werden, denn hier wird die elektronische Struktur des CNTs durch das effektive Modell entlang des Transistors als konstant angenommen und bei Ladungstransfer kommt es so zu einer synchronen Verbiegung der Teilbänder. Als Folge sagen die NDS-Rechnungen einen Band-zu-Band-Tunnelstrom für große negative Gate-Source-Spannungen voraus, sobald die Valenzbandkante nahe der Fermienergie ist. Daraus resultiert ein höherer Aus-Strom sowie ein leicht ambipolares Verhalten. Allerdings stehen, wie sich im Rahmen der atomistischen Rechnungen in dieser Arbeit ergab, nur wenige lokalisierte Zustände im Kanal für der Transport zur Verfügung und der Band-zu-Band-Tunneleffekt wird so unterdrückt.

Das Verhalten der lokalisierten Zustände im Kanal wurde bei der Variation der Kanal- und Gate-Länge erstmalig systematisch untersucht. In beiden Fällen führt eine größere Länge zu einem Anstieg der Anzahl dieser lokalisierten Zustände im Kanal, was mit dem Modell des Potentialtopfs gut erklärt werden kann. Bei der Untersuchung der Kanallängenabhängigkeit des Transistors zeigte sich, wie für ballistischen Transport zu erwarten ist, bei beiden Methoden keine Abhängigkeit des An-Stroms von der Kanallänge. Durch Verkürzung des Kanals wird in beiden Fällen der Aus-Strom größer und das An/Aus-Verhältnis sinkt. Hier zeigt sich aufgrund der Unterdrückung des Band-zu-Band-Tunnelstroms infolge lokalisierter Zustände ein kleinerer Aus-Strom im Rahmen der EHT-Rechnungen, weshalb der Transistor bessere Eigenschaften zeigt als durch die NDS vorhergesagt wird. Bei der NDS ist der Band-zu-Band-Tunnelstrom aufgrund schmaler Barrieren an den Kontakten besonders bei kurzen Transistoren wesentlich, weshalb sich die Ergebnisse beider Methoden besonders bei diesen Transistoren stark unterscheiden.

Durch Variation der Gate-Länge bei festgehaltener Kanallänge wurde für kurze Gates mit dem atomistischen Ansatz ein leichter Anstieg des Aus-Stroms sowie eine Verschlechterung des Subthreshold-Swings infolge der geringeren elektrostatischen Kontrolle des Kanals beobachtet. Dies konnte durch die NDS nicht reproduziert werden. Das weist darauf hin, dass die Modellierung der Ohmschen Kontakte durch die verfügbaren Parameter (die für Transistoren mit Schottky-Barrieren gedacht sind) nicht ausreicht. Eine Erweiterung des Modells zur NDS auf Ohmsche Kontakte könnte hier bessere Übereinstimmung liefern.

Hinsichtlich des Schaltverhaltens sind die Ergebnisse beider Methoden, insbesondere für lange Transistoren, in guter Übereinstimmung. Für Routinerechnungen zum Schaltkreisentwurf kann die NDS zur Einschätzung des Schaltverhaltens gut verwendet werden. Unterschiede zwischen den Methoden zeigen sich beim An- beziehungsweise Aus-Strom, welche durch Änderung der Kontaktparameter möglicherweise reduziert werden können.

Im Vergleich zu aktuellen experimentellen Arbeiten zu CNTFETs [13, 14] hat der untersuchte Transistor hervorragende Eigenschaften. Für Kanallängen von circa 8 nm und länger liegt der Subthreshold-Swing unterhalb von 80 mV/dec und das An/Aus-Verhältnis über  $10^6$ . Zusätzlich zeigt sich kein ambipolares Verhalten, was den untersuchten Transistor für Anwendungen in digitalen Schaltkreisen attraktiv macht.

## Ausblick

Auf Basis der vorliegenden Arbeit sollte die Untersuchung der CNTFETs weiter ausgedehnt werden, wobei diverse Themengebiete interessant sind.

Die Untersuchung des Band-zu-Band-Tunneleffekts sollte ausgeweitet werden. Aufgrund lokalisierter Zustände ergab sich eine Unterdrückung dieses Tunnelstroms im Rahmen der atomistischen Rechnungen. Da Band-zu-Band-Tunnelströme in anderen Arbeiten dennoch beobachtet wurden, stellt sich die Frage, unter welchen Bedingungen der Band-zu-Band-Tunneleffekt eine Rolle spielt. So könnte es möglich sein, durch Variation der Transistorparameter die Lokalisierung der Zustände auszunutzen, um Transistoren mit möglichst großem An/Aus-Verhältnis zu produzieren. Auch andere eindimensionale Systeme, wie beispielsweise Silizium-Nanodrähte können auf diesen Effekt hin untersucht werden.

Aufbauend auf den Ergebnissen dieser Arbeit sollten weitere CNT-Transistoren untersucht werden. Von Interesse sind hier zum Beispiel CNTs mit größeren Radien, da diese in Experimenten bevorzugt verwendet werden [13, 14]. Auch weitere Gate-Strukturen, insbesondere planare Gates, sind von Bedeutung, wobei auch die Berücksichtigung praxisrelevanter Isolatorschichten interessant ist. Von besonderem Interesse ist die Untersuchung anderer Kontakte (insbesondere Metallkontakte), da dies ein wesentliches Thema der aktuellen Forschung ist. Ein direkter Vergleich des atomistischen Modells mit den experimentellen Ergebnissen wäre dann besser möglich.

Die verwendete Dotierung im atomistischen Ansatz führte zu einer Ladung der Elektroden und dadurch zu langreichweitigen Streufeldern. Neue Versionen von ATK (die zum Zeitpunkt der Arbeit nicht zur Verfügung standen) ermöglichen die Verwendung sogenannter Kompensationsladungen. Dabei werden positive Ladungen zu den Atomen hinzugefügt, die die Ladung der Elektroden kompensieren. In Zukunft sollte ein Vergleich dieser Methode mit der in der Arbeit verwendeten Methode erfolgen.

Da zum Zeitpunkt der Arbeit nur Kontakte mit Schottky-Barrieren in der NDS implementiert waren, mussten Ohmsche Kontakte nachgebildet werden. Hier wäre eine entsprechende Erweiterung des NDS-Modells interessant. Insbesondere bei der Variation der Gate-Länge aufgetretene Unterschiede können so möglicherweise gelöst werden. Zusätzlich können die Parameter zur Beschreibung der Kontakte in der NDS auf Basis der NEGF-Rechnungen angepasst werden und die in der Arbeit aufgetretenen Unterschiede im An- und Aus-Zustand verkleinert werden.

Die Bestimmung der Bandlücke ist eine zentrale Herausforderung bei der Verwendung der DFT (und damit auch dem EHT-Parametersatz, der an DFT-Daten gefittet wurde). In der Arbeit spielte dies keine Rolle, da das Ziel der Arbeit ein Methodenvergleich war und hier beide Methoden auf den gleichen DFT-Resultaten basieren. Für zukünftige Untersuchungen sollte diesbezüglich jedoch nach Lösungen gefunden werden. Möglich ist hier zum Beispiel die Verwendung komplexerer DFT-Funktionale oder aber die Entwicklung eines neuen Parametersatzes für die EHT (zum Beispiel auf Basis von GW-Rechnungen).



## Anhang A.

### Elektronische Struktur des (7,0)-Kohlenstoffnanoröhrchens

Die Beschreibung der elektronischen Struktur des CNTs – und insbesondere der Bandlücke – ist entscheidend für die Ergebnisse der Simulation. Für alle Berechnungen im Rahmen der Arbeit stellt die DFT die Basis dar (die Parameter der EHT als auch der NDS werden an DFT-Daten gefittet). Wie in Kap. 3.2.1 erwähnt wurde, ist die Vorhersage der Bandlücke mit DFT-Rechnungen jedoch schwierig.

Es wurden zu Beginn der Arbeit umfangreiche Testrechnungen mit denen in ATK verfügbaren LDA- und GGA-Funktionalen anhand des geometrieoptimierten<sup>1</sup> (7,0)-CNTs durchgeführt. Die Bandstrukturen, berechnet mit dem LDA-Funktional von J. P. PERDEW und A. ZUNGER [72] und GGA-Funktional von J. P. PERDEW, K. BURKE und M. ERNZERHOF [71], sind in Abb. A.1 dargestellt. Die berechneten Bandlücken liegen bei 0.15 eV (LDA) beziehungsweise 0.19 eV (GGA), in guter Übereinstimmung mit anderen Arbeiten [86, 87], die ebenfalls LDA-Funktionale verwenden.

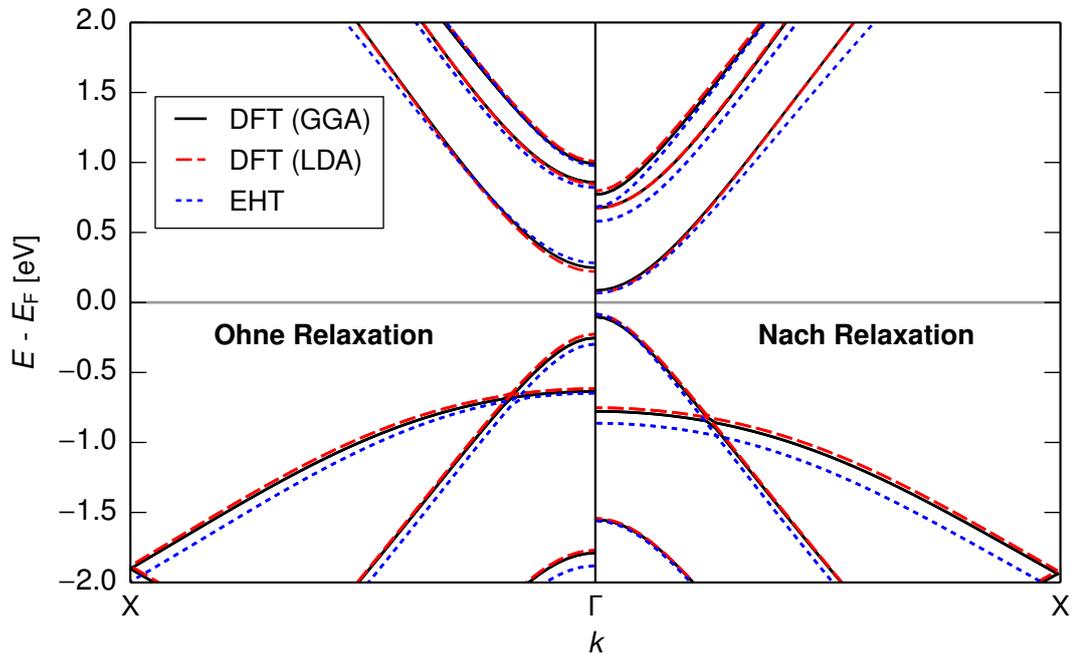
Experimentelle Messungen der Übergangsenergie des (7,0)-CNTs ergaben jedoch wesentlich höhere Bandlücken von circa 1.29 eV [88]. Vergleichbare Werte können nur mit wesentlich aufwändigeren GW-Rechnungen (1.22 eV [86]) oder unter Verwendung komplexerer DFT-Funktionale reproduziert werden (TPSS-Hybridfunktional [89]: 1.22 eV [90] oder B3LYP-Hybridfunktional [91]: 0.93 eV [92]).

Für die Rechnungen mit EHT (oder semiempirische Methoden im Allgemeinen) müssen die Parameter an derartige Referenzdaten gefittet werden. Die Findung eines neuen Parametersatzes für die EHT-Rechnungen auf Basis komplexer Methoden oder Funktionale ist jedoch nicht Ziel der vorliegenden Arbeit und sollte Bestandteil zukünftiger Untersuchungen sein (zum Beispiel auf Basis von GW-Rechnungen, die aktuell in der Arbeitsgruppe untersucht werden). Stattdessen wird in der Arbeit der Parametersatz von A. ZIENERT ET AL. [75] verwendet. Dieser wurde an die mit GGA-Funktional berechnete Bandstruktur eines metallischen (6,6)-CNTs gefittet und sagt für den unoptimierten Fall ebenfalls eine zu kleine Bandlücke von  $E_{\text{gap}} = 0.15$  eV voraus.

Um hier Abhilfe zu schaffen wird das *unoptimierte* (7,0)-CNT für die Untersuchungen der Arbeit genutzt, da für dieses das verwendete GGA-Funktional mit 0.5 eV eine höhere

---

<sup>1</sup>Für die Optimierung wurde das Quasi-Newton-Verfahren mit einem Abbruchkriterium von 0.01 eV/Å verwendet.



**Abb. A.1.:** Bandstruktur des (7,0)-CNTs vor (links) und nach der Geometrieoptimierung (rechts). Es sind Ergebnisse von DFT-Rechnungen mit LDA- und GGA-Funktional sowie von EHT-Rechnungen dargestellt.

Bandlücke ergibt (siehe Abb. A.1). Der verwendete EHT-Parametersatz von A. ZIENERT ET AL. liefert  $E_{\text{gap}} = 0.57$  eV für das unoptimierte CNT. Die Struktur des CNTs ist dabei die von ATK zur Verfügung gestellte, bei welcher der Abstand benachbarter Kohlenstoffatome  $a_{\text{c-c}} = 1.42086$  nm beträgt. Da der Vergleich zweier Methoden der Schwerpunkt der Arbeit ist und in beiden Fällen die Parameter auf der gleichen DFT-Bandstruktur basieren, beeinträchtigt die Verwendung des unoptimierten CNTs und die immer noch kleine Bandlücke in keiner Weise die Aussagen der Arbeit hinsichtlich des Methodenvergleichs. Zugleich befindet sich die Bandlücke damit in einem Bereich der den Bandlücken technologierelevanter CNTs ähnlich ist und eine Eignung als Halbleitermaterial ermöglicht.

## Anhang B.

### Simulationsparameter

#### B.1. Parameter für Rechnungen mit Dichtefunktionaltheorie

Die *Elektronentemperatur* beträgt für alle Rechnungen  $T_{\text{el}} = 300$  K und bestimmt die Verteilung der Elektronen. Sie wird bei der Fermiverteilung berücksichtigt.

Für das *Austausch- und Korrelationsfunktional* wird in der Arbeit das *GGA-Funktional* von J. P. PERDEW, K. BURKE und M. ERNZERHOF [71] verwendet. Die für die EHT-Rechnungen verwendeten Parameter (vergleiche Anh. B.2) wurden ebenfalls aus Fits an DFT-Rechnungen mit diesem Funktional bestimmt.

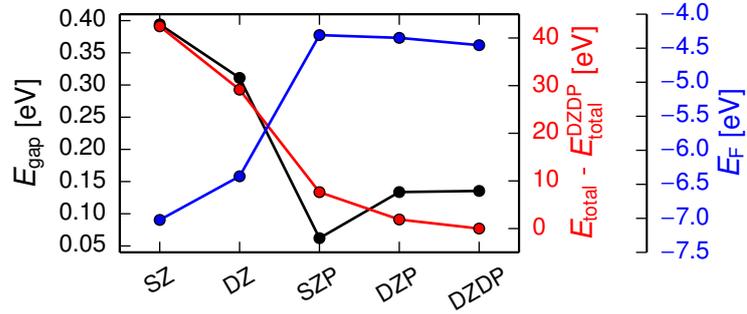
Es wird als Basis eine *DZP-Basis* gewählt. Abb. B.1 zeigt Bandlücke, Gesamtenergie und Fermi-Energie in Abhängigkeit der in ATK verfügbaren Basen. Im Vergleich zu weniger komplexen Basen (SZ, DZ, SZP) zeigen sich zur DZP-Basis noch große Schwankungen. Eine DZP-Basis ist hier also notwendig. Der Vergleich zwischen DZP- und DZDP-Basis zeigt keine wesentlichen Unterschiede hinsichtlich den Ergebnissen, so dass die DZP-Basis anstelle der komplexeren DZDP-Basis ausreichend gute Ergebnisse liefert. Die Aussagen werden dabei auch durch Ref. [93] bestätigt, die ebenfalls die Wahl einer DZP-Basis für Rechnungen mit CNTs empfehlen.

Als *Pseudopotentiale* werden die bereits durch ATK zur Verfügung gestellten verwendet. Diese wurden nach dem Troullier-Martens-Schema [94] erzeugt und sind normerhaltend. Normerhaltend bedeutet, dass das Integral über die Ladungsdichten innerhalb des Abschneideradius für das Pseudopotential mit dem realen System übereinstimmt [95].

Der sogenannte *Density-Mesh-Cutoff-Parameter*  $E_{\text{grid}}$  ist bestimmend für die Feinheit des Gitters beim Lösen der Poisson-Gleichung. Er wurde für die Rechnung auf  $75 E_{\text{H}}$  gesetzt ( $1 E_{\text{H}} \approx 27.211$  eV). Der Abstand zweier benachbarter Gitterpunkte  $\Delta x$  lässt sich daraus über

$$\Delta x = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{2m_e E_{\text{grid}}}} \quad (\text{B.1})$$

berechnen [79] und beträgt für die DFT-Rechnungen entsprechend  $\Delta x \approx 0.014$  nm. Für die Berechnung eines Transistors der Länge 10.2 nm und einer Einheitszelle der Breite und Höhe 20 nm ergeben sich 754 Gitterpunkte entlang des Transistors (in  $z$ -Richtung) und 147 Gitterpunkt senkrecht dazu (in  $x$ - beziehungsweise  $y$ -Richtung), insgesamt also  $\approx 16$  Millionen.



**Abb. B.1.:** Bandlücke  $E_{\text{gap}}$ , Gesamtenergie  $E_{\text{tot}}$  und Fermi-Energie  $E_{\text{F}}$  für die in ATK verfügbaren Basissätze. Die Werte für  $E_{\text{tot}}$  sind relativ zur berechneten Gesamtenergie mit DZDP-Basis  $E_{\text{tot}}^{\text{DZDP}}$ .

Die Anzahl der  $k$ -Punkte in CNT-Richtung unterscheidet sich von der Art der Rechnung. Für reine Elektronenstrukturrechnungen mit einer Einheitszelle, werden 50  $k$ -Punkte entlang des CNTs gewählt. Im Gegensatz dazu werden für die Elektrodenrechnungen (bei welchen zwei CNT-Einheitszellen betrachtet werden) 25 Punkte gewählt<sup>1</sup>. Für die Transportrechnungen wird auch für den Kanal ein  $k$ -Punkt verwendet. Da die verwendeten Elektroden aus zwei CNT-Einheitszellen bestehen, werden dort 25  $k$ -Punkte in  $z$ -Richtung genutzt. Bei der Berechnung des Kanals wird auch entlang des CNTs ein  $k$ -Punkt verwendet. Senkrecht zum Transistor wird jeweils ein  $k$ -Punkt verwendet. Für die Wahl der  $k$ -Punkte wird von ATK intern das Monkhorst-Pack-Schema [96] verwendet.

## B.2. Parameter für Rechnungen mit erweiterter Hückelmethode

Für die EHT-Rechnungen werden größtenteils die gleichen Parameter wie für die DFT-Rechnungen verwendet (sofern notwendig). Eine Ausnahme ist der Density-Mesh-Cutoff-Parameter, der auf  $10 E_{\text{H}}$  gesetzt wird. Das ergibt unter Verwendung von Gl. (B.1) einen Abstand benachbarter Gitterpunkte von 0.07 nm. Für die Berechnung eines Transistors der Länge 10.2 nm und einer Einheitszelle mit Breite und Höhe 20 nm ergeben sich dadurch 146 Gitterpunkte entlang des Transistors (in  $z$ -Richtung) und 28 Gitterpunkt senkrecht dazu (in  $x$ - und  $y$ -Richtung), insgesamt also  $\approx 114$  Tausend. Der Grund für das, im Vergleich zu DFT-Rechnungen, gröbere Gitter liegt in der Tatsache begründet, dass bei EHT-Rechnungen zur Bestimmung des Potentials der Atome Punktladungen verwendet werden. Dies ist bereits eine recht grobe Näherung, so dass ein feineres Gitter wenig Nutzen bringen würde. Bei

<sup>1</sup>Die Verwendung einer ungeraden Zahl an  $k$ -Punkten ist dabei zu empfehlen, da so der  $\Gamma$ -Punkte genau getroffen wird.

**Tab. B.1.:** Die im Rahmen der Arbeit verwendeten Parameter von ZIENERT ET AL. [75] für die Rechnungen mit EHT.

$n$	$l$	$E^{\text{ion}}$ [eV]	$C_1$ [ $a_0^{-3/2}$ ]	$C_2$ [ $a_0^{-3/2}$ ]	$\eta_1$ [ $a_0^{-1}$ ]	$\eta_2$ [ $a_0^{-1}$ ]
2	0	-21.6084	0.70777	-	2.01357	-
2	1	-14.2883	0.034603	0.382108	1.192	2.06477
3	2	-5.78956	0.382108	-	1.22177	-

$a_0$  ist der Bohrradius ( $\approx 0.0529$  nm). Alle Wichtungparameter  $\beta_i$  betragen 2.8. Das zu diesem Parametersatz gehörende Vakuumlevel liegt bei  $E_{\text{vak}} = -9.4392$  eV.

DFT-Rechnungen hingegen ist ein feineres Gitter aufgrund der Berücksichtigung der Orbitale sinnvoll.

Für die in Kap. 3.2.2 vorgestellten Parameter werden Werte aus Ref. [75] verwendet, welche in Tab. B.1 gezeigt sind. Dieser Parametersatz verwendet zwei Slater-Orbitale pro Atom, entsprechend ergeben sich fünf Parameter. Die sich für das (7,0)-CNT ergebenden Bandstrukturen aus EHT- und DFT-Rechnungen sind in Abb. A.1 zu finden.

### B.3. Verwendete Randbedingungen zur Lösung der Poisson-Gleichung

Bei Elektronenstrukturrechnungen werden für die Lösung der Poisson-Gleichung *periodische* Randbedingungen in alle drei Dimensionen verwendet. Dem gegenüber wird bei Transportrechnungen an der Kanal-Kontakt-Grenzfläche das im Rahmen der Elektronenstrukturrechnung der Kontakte berechnete Potential als Randbedingung verwendet (*Dirichlet*-Randbedingungen). Senkrecht zum CNT werden am Rand der Simulationsbox *Neumann*-Randbedingungen genutzt, an denen das elektrostatische Feld  $\nabla v$  verschwindet. Die Elektrodenstrukturrechnungen werden mit periodischen Randbedingungen entlang dem CNT durchgeführt. Senkrecht dazu werden Neumann-Randbedingungen genutzt.

## Anhang C.

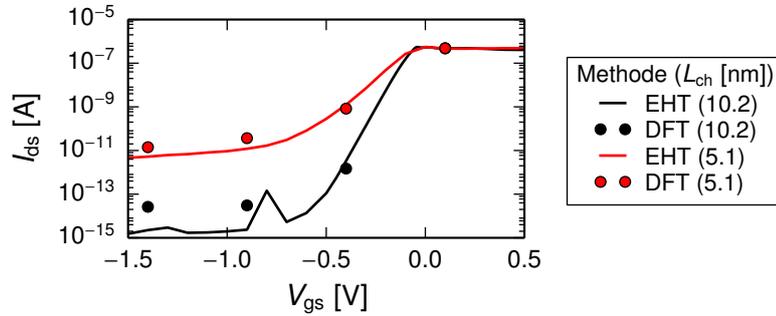
### Vergleich zwischen Dichtefunktionaltheorie und erweiterter Hückelmethode

#### C.1. Physikalische Betrachtung

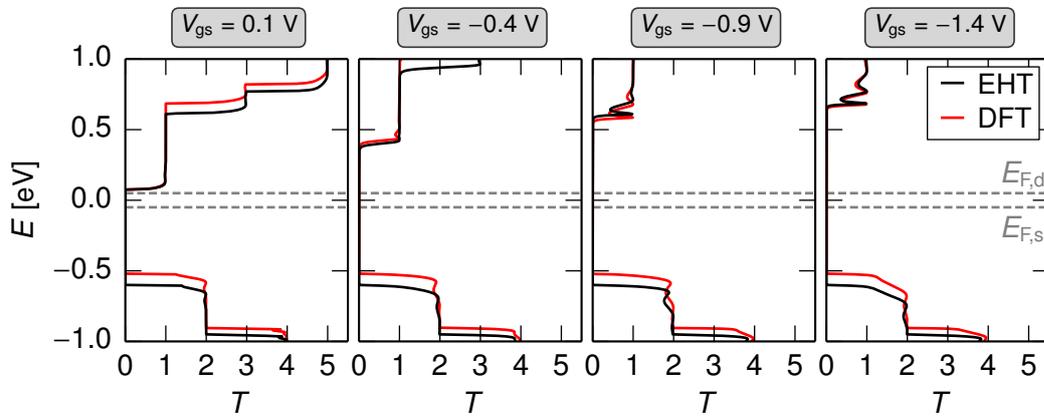
Für die Rechnungen der Arbeit kommt die EHT zum Einsatz, da die DFT für die Simulation längerer Transistoren sehr viel Rechenzeit benötigt (die Zentralregion eines Transistors der Länge 10.2 nm besteht aus 672 Atomen). Auch der Arbeitsspeicherverbrauch bei DFT-Rechnungen ist höher, da für genaue Ergebnisse ein feiner aufgelöstes Gitter als bei EHT zur Lösung der Poisson-Gleichung notwendig ist (siehe Anh. B.1). Dennoch wurden einige Datenpunkte zu Vergleichszwecken gerechnet. Ein Vergleich hinsichtlich Rechenzeit und Konvergenz kann weiter unten gefunden werden.

Abb. C.1a zeigt die Transfercharakteristik für Transistoren mit Kanallängen von 5.1 nm und 10.2 nm, jeweils mit EHT und DFT berechnet. Im An- und Sperrbereich sind die Unterschiede zwischen den beiden Methoden nur marginal. Ein Unterschied zeigt sich im Aus-Zustand, wo DFT-Rechnungen einen höheren Aus-Strom vorhersagen (um eine Größenordnung bei einem Transistor mit  $L_{\text{ch}} = 5.1$  nm). Zu erklären ist das mit der um 0.07 eV kleineren Bandlücke der EHT-Bandstruktur im Vergleich zur DFT-Bandstruktur (die Bandstrukturen sind in Abb. A.1 dargestellt). Bei Betrachtung der Transmissionsspektren, die in Abb. C.1b dargestellt sind, zeigt sich, dass die Valenzbandkante bei DFT-Rechnungen näher an der Fermienergie liegt. Das ist irrelevant solange die Leitungsbandkante für den Ladungstransport maßgebend ist. Doch für niedrige Gate-Source-Spannungen beeinflussen diese Zustände den ohnehin schon kleinen Aus-Strom.

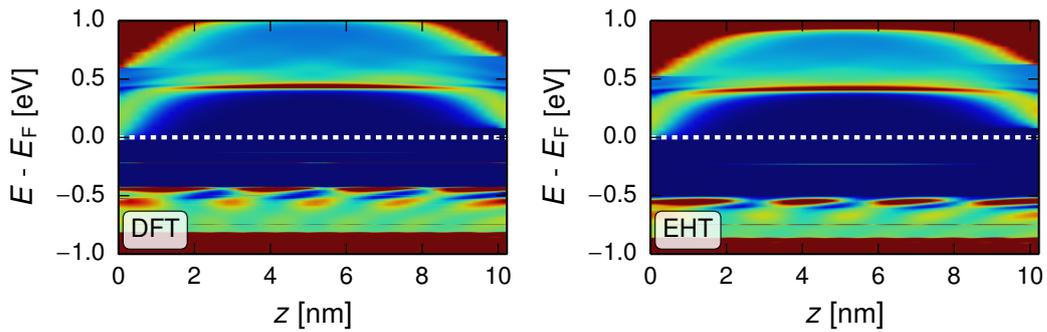
Da die projizierte Zustandsdichte ein wichtiges Werkzeug im Rahmen der Arbeit ist, ist auch hier ein Vergleich naheliegend. Für  $V_{\text{gs}} = -0.4$  V sind in Abb. C.1c die jeweiligen Ergebnisse aufgetragen. Mit Ausnahme der etwas höher liegenden Valenzbandkante sind die Ergebnisse in guter Übereinstimmung. Auch die diskreten Zustände innerhalb des Kanals sind bei DFT-Rechnungen vorhanden.



(a) Transfer characteristics for two different channel lengths  $L_{ch}$ .

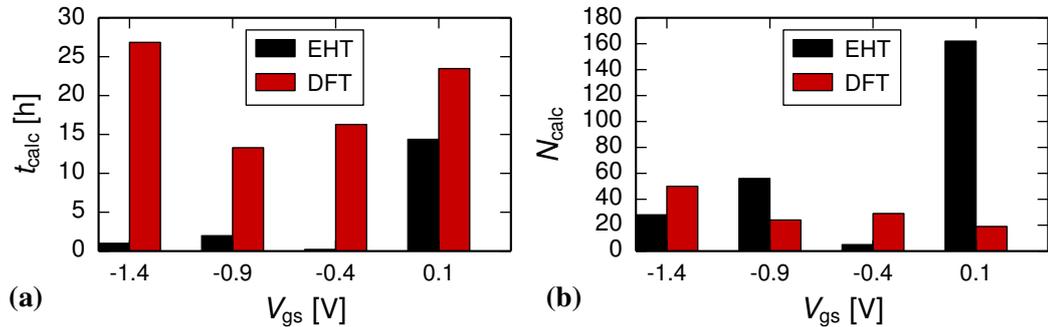


(b) Transmission spectra for four different values of  $V_{gs}$  ( $L_{ch} = 10.2$  nm). The Fermi energies of the contacts are gray dashed lines.



(c)  $D_{proj}$  for  $V_{gs} = -0.4$  V and  $L_{ch} = 10.2$  nm. The color scale corresponds to the one in Abb. 5.5.

**Abb. C.1.:** Vergleich der Ergebnisse zwischen DFT und EHT.



**Abb. C.2.:** Rechenzeit  $t_{calc}$  und Anzahl der Konvergenzschritte  $N_{calc}$  für verschiedene Gate-Source-Spannungen, jeweils für Rechnungen mit DFT und EHT. Die Kanallänge des Transistors ist  $L_{ch} = 10.2$  nm.

## C.2. Rechenzeit und Konvergenz

Abb. C.2a zeigt die Rechenzeit  $t_{calc}$  der Transportrechnungen für vier verschiedene Gate-Source-Spannungen. Der untersuchte Transistor hat eine Kanallänge von 10.2 nm (672 Atome). Wie zu erwarten ist, werden bei Verwendung der EHT stets kürzere Rechenzeiten als mit DFT benötigt. Während für die DFT Rechenzeiten zwischen 13 und 27 Stunden benötigt wurden, waren die Rechnungen mit EHT meist unter 2 Stunden beendet. Eine Ausnahme ist bei  $V_{gs} = 0.1$  V erkennbar, wo die durchgeführte EHT-Rechnung circa 14 Stunden lief. In Abb. C.2b ist die zugehörige Anzahl der Konvergenzschritte  $N_{calc}$  aufgezeigt. Es zeigt sich, dass die vergleichsweise lange Rechenzeit mit EHT für  $V_{gs} = 0.1$  V aus einer langsamen Konvergenz der Rechnung folgt. Ebenfalls schlechte Konvergenz wurde bei einigen anderen EHT-Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit beobachtet, doch stellt dies eher eine Ausnahme dar.

Berechnet man die Rechenzeit pro Selbstkonsistenz-Schritt  $t_{calc}/N_{calc}$ , so zeigt sich, dass die DFT-Rechnungen im Mittel 14-mal soviel Rechenzeit als die EHT-Rechnungen benötigen. Für zukünftige Untersuchungen größerer Transistoren ist die DFT somit nur bedingt geeignet. Zwar können einzelne Datenpunkte mit vertretbarem Rechenaufwand berechnet werden, doch bei umfangreichen Parametervariationen (zum Beispiel  $V_{gs}$  für Transfercharakteristiken) sind Alternativen wie die EHT für ein solch großes Systeme notwendig.

## Literaturverzeichnis

- [1] M. Riordan, L. Hoddeson und C. Herring: *The Invention of the Transistor*. More Things in Heaven and Earth. Springer, New York S. 563 (1999). ISBN: 978-1-4612-1512-7 (Zitiert auf S. 1).
- [2] R. ARNS: *The other transistor: early history of the metal-oxide semiconductor field-effect transistor*. Engineering Science and Education Journal **7**, S. 233 (1998). doi: [10.1049/esej:19980509](https://doi.org/10.1049/esej:19980509) (Zitiert auf S. 1).
- [3] D. VASILESKA, M. S. GOODNICK und G. KLIMECK: *Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation*. CRC Press, Boca Raton (2010). ISBN: 9781420064834 (Zitiert auf S. 1).
- [4] H. S. P. WONG: *Beyond the conventional transistor*. IBM Journal of Research and Development **46**, S. 133 (2002). doi: [10.1147/rd.462.0133](https://doi.org/10.1147/rd.462.0133) (Zitiert auf S. 1).
- [5] G. K. CELLER und S. CRISTOLOVEANU: *Frontiers of silicon-on-insulator*. Journal of Applied Physics **93**, S. 4955 (2003). doi: [10.1063/1.1558223](https://doi.org/10.1063/1.1558223) (Zitiert auf S. 1).
- [6] E. NOWAK, I. ALLER, T. LUDWIG, K. KIM, R. JOSHI, C.-T. CHUANG, K. BERNSTEIN und R. PURI: *Turning silicon on its edge [double gate CMOS/FinFET technology]*. IEEE Circuits and Devices Magazine **20**, S. 20 (2004). doi: [10.1109/MCD.2004.1263404](https://doi.org/10.1109/MCD.2004.1263404) (Zitiert auf S. 1).
- [7] J. GOLDBERGER, A. I. HOCHBAUM, R. FAN und P. YANG: *Silicon Vertically Integrated Nanowire Field Effect Transistors*. Nano Letters **6**, S. 973 (2006). doi: [10.1021/nl060166j](https://doi.org/10.1021/nl060166j) (Zitiert auf S. 1).
- [8] R. SAITO, G. DRESSELHAUS und M. S. DRESSELHAUS: *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College press, London (1998). ISBN: 978-1-86094-379-9 (Zitiert auf S. 1).
- [9] D. MANN, A. JAVEY, J. KONG, Q. WANG und H. DAI: *Ballistic Transport in Metallic Nanotubes with Reliable Pd Ohmic Contacts*. Nano Letters **3**, S. 1541 (2003). doi: [10.1021/nl034700o](https://doi.org/10.1021/nl034700o) (Zitiert auf S. 1, 25).
- [10] J.-Y. PARK, S. ROSENBLATT, Y. YAISH, V. SAZONOVA, H. ÜSTÜNEL, S. BRAIG, T. A. ARIAS, P. W. BROUWER und P. L. McEUEEN: *Electron-Phonon Scattering in Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes*. Nano Letters **4**, S. 517 (2004). doi: [10.1021/nl035258c](https://doi.org/10.1021/nl035258c) (Zitiert auf S. 1, 25).

- [11] T. DÜRKOP, S. A. GETTY, E. COBAS und M. S. FUHRER: *Extraordinary Mobility in Semiconducting Carbon Nanotubes*. Nano Letters **4**, S. 35 (2004). doi: [10.1021/nl034841q](https://doi.org/10.1021/nl034841q) (Zitiert auf S. 1, 25).
- [12] A. JAVEY, J. GUO, M. PAULSSON, Q. WANG, D. MANN, M. LUNDSTROM und H. DAI: *High-Field Quasiballistic Transport in Short Carbon Nanotubes*. Physical Review Letters **92**, S. 106804 (2004). doi: [10.1103/PhysRevLett.92.106804](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.106804) (Zitiert auf S. 1, 25).
- [13] A. D. FRANKLIN, M. LUISIER, S.-J. HAN, G. TULEVSKI, C. M. BRESLIN, L. GIGNAC, M. S. LUNDSTROM und W. HAENSCH: *Sub-10 nm Carbon Nanotube Transistor*. Nano Letters **12**, S. 758 (2012). doi: [10.1021/nl203701g](https://doi.org/10.1021/nl203701g) (Zitiert auf S. 1).
- [14] A. D. FRANKLIN, S. O. KOSWATTA, D. B. FARMER, J. T. SMITH, L. GIGNAC, C. M. BRESLIN, S.-J. HAN, G. S. TULEVSKI, H. MIYAZOE, W. HAENSCH und J. TERSOFF: *Carbon Nanotube Complementary Wrap-Gate Transistors*. Nano Letters **13**, S. 2490 (2013). doi: [10.1021/nl400544q](https://doi.org/10.1021/nl400544q) (Zitiert auf S. 1).
- [15] J. GUO, S. HASAN, A. JAVEY, G. BOSMAN und M. LUNDSTROM: *Assessment of high-frequency performance potential of carbon nanotube transistors*. IEEE Transactions on Nanotechnology **4**, S. 715 (2005). doi: [10.1109/TNANO.2005.858601](https://doi.org/10.1109/TNANO.2005.858601) (Zitiert auf S. 1).
- [16] J. TITTMANN, S. HERMANN, S. SCHULZ, A. PACHECO-SANCHEZ, M. CLAUS und M. SCHRÖTER: *Hysteresis-free carbon nanotube field-effect transistors without passivation*. 2014 IEEE/ACM International Symposium on Nanoscale Architectures (NANOARCH) S. 137 (2014). doi: [10.1109/NANOARCH.2014.6880499](https://doi.org/10.1109/NANOARCH.2014.6880499) (Zitiert auf S. 2).
- [17] H. YU, S. HERMANN, S. E. SCHULZ, T. GESSNER, Z. DONG und W. J. LI: *Optimizing sonication parameters for dispersion of single-walled carbon nanotubes*. Chemical Physics **408**, S. 11 (2012). doi: [10.1016/j.chemphys.2012.08.020](https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2012.08.020) (Zitiert auf S. 2).
- [18] H. YU, S. HERMANN, Z. DONG, J. MAI, W. J. LI und S. E. SCHULZ: *Controlling SWCNT assembling density by electrokinetics*. Sensors and Actuators A: Physical **201**, S. 36 (2013). doi: [10.1016/j.sna.2013.05.008](https://doi.org/10.1016/j.sna.2013.05.008) (Zitiert auf S. 2).
- [19] F. TEICHERT: *Elektronischer Transport in defektbehafteten quasi-eindimensionalen Systemen am Beispiel von Kohlenstoffnanoröhrchen*. Masterarbeit. Technische Universität Chemnitz, Chemnitz (2014). URL: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:ch1-qucosa-139650> (Zitiert auf S. 2, 12).
- [20] C. WAGNER, J. SCHUSTER und T. GESSNER: *DFT investigations of the piezoresistive effect of carbon nanotubes for sensor application*. physica status solidi (b) **249**, S. 2450 (2012). doi: [10.1002/pssb.201200113](https://doi.org/10.1002/pssb.201200113) (Zitiert auf S. 2).

- [21] A. ZIENERT: *Electronic Transport in Metallic Carbon Nanotubes with Metal Contacts*. Dissertation. Technische Universität Chemnitz, Chemnitz (2013). URL: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:ch1-qucosa-108205> (Zitiert auf S. 2).
- [22] A. ZIENERT, J. SCHUSTER und T. GESSNER: *Metallic carbon nanotubes with metal contacts: electronic structure and transport*. *Nanotechnology* **25**, S. 425203 (2014). DOI: [10.1088/0957-4484/25/42/425203](https://doi.org/10.1088/0957-4484/25/42/425203) (Zitiert auf S. 2, 13).
- [23] F. FUCHS: *Untersuchungen von metallbesetzten Kohlenstoffnanoröhrchen für Sensoren und Interconnectsysteme mit ab-initio Methoden*. Bachelorarbeit. Technische Universität Chemnitz, Chemnitz (2012). URL: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:ch1-qucosa-107379> (Zitiert auf S. 2, 29).
- [24] F. FUCHS, A. ZIENERT, C. WAGNER, J. SCHUSTER und S. E. SCHULZ: *Interaction Between Carbon Nanotubes and Metals: Electronic Properties, Stability, and Sensing*. *Microelectronic Engineering* (Eingereicht zur Veröffentlichung) (Zitiert auf S. 2, 29).
- [25] J. W. G. WILDER, L. C. VENEMA, A. G. RINZLER, R. E. SMALLEY und C. DEKKER: *Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes*. *Nature* **391**, S. 59 (1998). DOI: [10.1038/34139](https://doi.org/10.1038/34139) (Zitiert auf S. 7).
- [26] P. R. WALLACE: *The Band Theory of Graphite*. *Physical Review* **71**, S. 622 (1947). DOI: [10.1103/PhysRev.71.622](https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622) (Zitiert auf S. 8).
- [27] S. LATIL, S. ROCHE, D. MAYOU und J.-C. CHARLIER: *Mesoscopic Transport in Chemically Doped Carbon Nanotubes*. *Physical Review Letters* **92**, S. 256805 (2004). DOI: [10.1103/PhysRevLett.92.256805](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.256805) (Zitiert auf S. 11, 36).
- [28] T. KORETSUNE und S. SAITO: *Electronic structure of boron-doped carbon nanotubes*. *Physical Review B* **77**, S. 165417 (2008). DOI: [10.1103/PhysRevB.77.165417](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.165417) (Zitiert auf S. 11, 36).
- [29] C. S. YEUNG, Y. K. CHEN und Y. A. WANG: *Theoretical Studies of Substitutionally Doped Single-Walled Nanotubes*. *Journal of Nanotechnology* **2010**, S. e801789 (2010). DOI: [10.1155/2010/801789](https://doi.org/10.1155/2010/801789) (Zitiert auf S. 11).
- [30] R. CZERW, M. TERRONES, J.-C. CHARLIER, X. BLASE, B. FOLEY, R. KAMALAKARAN, N. GROBERT, H. TERRONES, D. TEKLEAB, P. M. AJAYAN, W. BLAU, M. RÜHLE und D. L. CARROLL: *Identification of Electron Donor States in N-Doped Carbon Nanotubes*. *Nano Letters* **1**, S. 457 (2001). DOI: [10.1021/nl015549q](https://doi.org/10.1021/nl015549q) (Zitiert auf S. 11, 36).
- [31] A. JAVEY, R. TU, D. B. FARMER, J. GUO, R. G. GORDON und H. DAI: *High Performance n-Type Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Chemically Doped Contacts*. *Nano Letters* **5**, S. 345 (2005). DOI: [10.1021/nl047931j](https://doi.org/10.1021/nl047931j) (Zitiert auf S. 12, 35).

- [32] R. T. TUNG: *Recent advances in Schottky barrier concepts*. Materials Science and Engineering: R: Reports **35**, S. 1 (2001). DOI: [10.1016/S0927-796X\(01\)00037-7](https://doi.org/10.1016/S0927-796X(01)00037-7) (Zitiert auf S. 13).
- [33] M. YANG, K. TEO, W. MILNE und D. HASKO: *Carbon nanotube Schottky diode and directionally dependent field-effect transistor using asymmetrical contacts*. Appl. Phys. Lett. **87**, S. 253116 (2005). DOI: [10.1063/1.2149991](https://doi.org/10.1063/1.2149991) (Zitiert auf S. 14).
- [34] A. JAVEY, J. GUO, Q. WANG, M. LUNDSTROM und H. DAI: *Ballistic carbon nanotube field-effect transistors*. Nature **424**, S. 654 (2003). DOI: [10.1038/nature01797](https://doi.org/10.1038/nature01797) (Zitiert auf S. 14).
- [35] Y. NOSHO, Y. OHNO, S. KISHIMOTO und T. MIZUTANI: *n-type carbon nanotube field-effect transistors fabricated by using Ca contact electrodes*. Applied Physics Letters **86**, S. 073105 (2005). DOI: [10.1063/1.1865343](https://doi.org/10.1063/1.1865343) (Zitiert auf S. 14).
- [36] Z. CHEN, J. APPENZELLER, J. KNOCH, Y.-M. LIN und P. AVOURIS: *The Role of Metal-Nanotube Contact in the Performance of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors*. Nano Letters **5**, S. 1497 (2005). DOI: [10.1021/nl0508624](https://doi.org/10.1021/nl0508624) (Zitiert auf S. 14).
- [37] F. LEONARD und D. A. STEWART: *Properties of short channel ballistic carbon nanotube transistors with ohmic contacts*. Nanotechnology **17**, S. 4699 (2006). DOI: [10.1088/0957-4484/17/18/029](https://doi.org/10.1088/0957-4484/17/18/029) (Zitiert auf S. 14, 36).
- [38] J. SVENSSON, A. A. SOURAB, Y. TARAKANOV, D. S. LEE, S. J. PARK, S. J. BAEK, Y. W. PARK und E. E. B. CAMPBELL: *The dependence of the Schottky barrier height on carbon nanotube diameter for Pd-carbon nanotube contacts*. Nanotechnology **20**, S. 175204 (2009). DOI: [10.1088/0957-4484/20/17/175204](https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/17/175204) (Zitiert auf S. 14).
- [39] A. ORTIZ-CONDE, F. J. GARCÍA SÁNCHEZ, J. J. LIOU, A. CERDEIRA, M. ESTRADA und Y. YUE: *A review of recent MOSFET threshold voltage extraction methods*. Microelectronics Reliability **42**, S. 583 (2002). DOI: [10.1016/S0026-2714\(02\)00027-6](https://doi.org/10.1016/S0026-2714(02)00027-6) (Zitiert auf S. 15).
- [40] A. LIN, N. PATIL, K. RYU, A. BADMAEV, L. DE ARCO, C. ZHOU, S. MITRA und H. S. P. WONG: *Threshold Voltage and On-Off Ratio Tuning for Multiple-Tube Carbon Nanotube FETs*. IEEE Transactions on Nanotechnology **8**, S. 4 (2009). DOI: [10.1109/TNANO.2008.2004706](https://doi.org/10.1109/TNANO.2008.2004706) (Zitiert auf S. 15, 16).
- [41] A. NADERI, S. M. NOORBAKHSH und H. ELAHIPANAH: *Temperature Dependence of Electrical Characteristics of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors: A Quantum Simulation Study*. Journal of Nanomaterials **2012**, S. e532625 (2012). DOI: [10.1155/2012/532625](https://doi.org/10.1155/2012/532625) (Zitiert auf S. 15, 16).

- [42] M. FEDAWY, W. FIKRY, A. ALHENAWY und H. HASSAN: *Temperature Effects on MOSFET-Like Carbon Nanotube Field Effect Transistors*. International Journal of Scientific & Engineering Research **4**, S. 1773 (2013). ISSN: 2229-5518 (Zitiert auf S. 15, 16).
- [43] S. Sze und K. K. Ng: *MOSFETs*. Physics of Semiconductor Devices. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken Bd. **1**, S. 293 (2006). ISBN: 9780470068328 (Zitiert auf S. 15, 16).
- [44] K. CHEUNG: *On the 60 mV/dec @300 K limit for MOSFET subthreshold swing*. 2010 International Symposium on VLSI Technology Systems and Applications (VLSI-TSA) S. 72 (2010). DOI: [10.1109/VTSA.2010.5488941](https://doi.org/10.1109/VTSA.2010.5488941) (Zitiert auf S. 16).
- [45] S. O. KOSWATTA, M. S. LUNDSTROM und D. E. NIKONOV: *Band-to-Band Tunneling in a Carbon Nanotube Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor Is Dominated by Phonon-Assisted Tunneling*. Nano Letters **7**, S. 1160 (2007). DOI: [10.1021/nl1062843f](https://doi.org/10.1021/nl1062843f) (Zitiert auf S. 16, 62).
- [46] *Atomistix ToolKit 12.8*. QuantumWise A/S, Kopenhagen. URL: [www.quantumwise.com](http://www.quantumwise.com) (Zitiert auf S. 19, 44).
- [47] M. BRANDBYGE, J.-L. MOZOS, P. ORDEJÓN, J. TAYLOR und K. STOKBRO: *Density-functional method for nonequilibrium electron transport*. Physical Review B **65**, S. 165401 (2002). DOI: [10.1103/PhysRevB.65.165401](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.165401) (Zitiert auf S. 19, 44).
- [48] J. M. SOLER, E. ARTACHO, J. D. GALE, A. GARCÍA, J. JUNQUERA, P. ORDEJÓN und D. SÁNCHEZ-PORTAL: *The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation*. Journal of Physics: Condensed Matter **14**, S. 2745 (2002). DOI: [10.1088/0953-8984/14/11/302](https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/302) (Zitiert auf S. 19, 44).
- [49] K. STOKBRO, D. E. PETERSEN, S. SMIDSTRUP, A. BLOM, M. IPSEN und K. KAASBJERG: *Semiempirical model for nanoscale device simulations*. Physical Review B **82**, S. 075420 (2010). DOI: [10.1103/PhysRevB.82.075420](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.075420) (Zitiert auf S. 19).
- [50] K. STOKBRO, J. TAYLOR, M. BRANDBYGE und P. ORDEJÓN: *TranSIESTA: A Spice for Molecular Electronics*. Annals of the New York Academy of Sciences **1006**, S. 212 (2003). DOI: [10.1196/annals.1292.014](https://doi.org/10.1196/annals.1292.014) (Zitiert auf S. 19).
- [51] G. KLIMECK und M. LUISIER: *Atomistic Modeling of Realistically Extended Semiconductor Devices with NEMO and OMEN*. Computing in Science & Engineering **12**, S. 28 (2010). DOI: [10.1109/MCSE.2010.32](https://doi.org/10.1109/MCSE.2010.32) (Zitiert auf S. 19).
- [52] J. FERRER, C. J. LAMBERT, V. M. GARCÍA-SUÁREZ, D. Z. MANRIQUE, D. VISONTAI, L. OROSZLANY, R. RODRÍGUEZ-FERRADÁS, I. GRACE, S. W. D. BAILEY, K. GILLEMOT, H. SADEGHI und L. A. ALGHARAGHOLY: *GOLLUM: a next-generation simulation tool for electron*,

- thermal and spin transport*. New Journal of Physics **16**, S. 093029 (2014). doi: [10.1088/1367-2630/16/9/093029](https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/9/093029) (Zitiert auf S. 19).
- [53] M. CLAUS: *Modeling of Ballistic Carbon Nanotube Transistors for Analog High-Frequency Applications*. Dissertation. Technische Universität Dresden, Dresden (2011). ISBN: 978-3942710237 (Zitiert auf S. 19).
- [54] M. CLAUS, S. BLAWID, S. MOTHEs und M. SCHRÖTER: *High-Frequency Ballistic Transport Phenomena in Schottky Barrier CNTFETs*. IEEE Transactions on Electron Devices **59**, S. 2610 (2012). doi: [10.1109/TED.2012.2207725](https://doi.org/10.1109/TED.2012.2207725) (Zitiert auf S. 19, 28).
- [55] M. CLAUS, S. BLAWID und M. SCHRÖTER: *Impact of near-contact barriers on the subthreshold slope of short-channel CNTFETs*. 2013 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD) S. 159 (2013). doi: [10.1109/SISPAD.2013.6650599](https://doi.org/10.1109/SISPAD.2013.6650599) (Zitiert auf S. 19, 28).
- [56] M. CLAUS, S. MOTHEs, S. BLAWID und M. SCHRÖTER: *COOS: a wave-function based Schrödinger–Poisson solver for ballistic nanotube transistors*. Journal of Computational Electronics S. 1 (2014). doi: [10.1007/s10825-014-0588-6](https://doi.org/10.1007/s10825-014-0588-6) (Zitiert auf S. 19, 28).
- [57] S. MOTHEs: *Semiklassische Modellierung und Analyse des elektrischen Verhaltens von Carbon Nanotube Transistoren*. Diplomarbeit. Technische Universität Dresden, Dresden (2012) (Zitiert auf S. 19, 33).
- [58] *Sentaurus TCAD*. Synopsys, Mountain View. URL: <http://www.synopsys.com> (Zitiert auf S. 19).
- [59] *TiberCAD*. OLAB, Rom. URL: <http://www.tibercad.org> (Zitiert auf S. 19).
- [60] H.-S. P. Wong, A. Lin, J. Deng, A. Hazeghi, T. Krishnamohan und G. Wan: *Carbon Nanotube Device Modeling and Circuit Simulation*. Carbon Nanotube Electronics. Springer US, S. 133 (2009). ISBN: 978-0-387-36833-7, 978-0-387-69285-2 (Zitiert auf S. 19).
- [61] J. LUO, L. WEI, C.-S. LEE, A. FRANKLIN, X. GUAN, E. POP, D. ANTONIADIS und H. WONG: *Compact Model for Carbon Nanotube Field-Effect Transistors Including Nonidealities and Calibrated With Experimental Data Down to 9-nm Gate Length*. IEEE Transactions on Electron Devices **60**, S. 1834 (2013). doi: [10.1109/TED.2013.2258023](https://doi.org/10.1109/TED.2013.2258023) (Zitiert auf S. 19).
- [62] B. SHEU, D. SCHARFETTER, P.-K. KO und M.-C. JENG: *BSIM: Berkeley short-channel IGFET model for MOS transistors*. IEEE Journal of Solid-State Circuits **22**, S. 558 (1987). doi: [10.1109/JSSC.1987.1052773](https://doi.org/10.1109/JSSC.1987.1052773) (Zitiert auf S. 19).

- [63] K. TAKEUCHI und M. HANE: *Statistical Compact Model Parameter Extraction by Direct Fitting to Variations*. IEEE Transactions on Electron Devices **55**, S. 1487 (2008). doi: [10.1109/TED.2008.922491](https://doi.org/10.1109/TED.2008.922491) (Zitiert auf S. 19).
- [64] M. HAYATI, A. REZAEI und M. SEIFI: *CNT-MOSFET modeling based on artificial neural network: Application to simulation of nanoscale circuits*. Solid-State Electronics **54**, S. 52 (2010). doi: [10.1016/j.sse.2009.09.027](https://doi.org/10.1016/j.sse.2009.09.027) (Zitiert auf S. 19).
- [65] L. W. NAGEL und D. PEDERSON: *SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis)*. Technischer Bericht UCB/ERL M382. EECS Department, University of California, Berkeley (1973). URL: <http://www.eecs.berkeley.edu/Pubs/TechRpts/1973/22871.html> (Zitiert auf S. 19).
- [66] E. SCHRÖDINGER: *Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung)*. Annalen der Physik **79**, S. 361 (1926). doi: [10.1002/andp.19263840404](https://doi.org/10.1002/andp.19263840404) (Zitiert auf S. 20).
- [67] S. DATA: *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, Cambridge (2005). ISBN: 9780521631457 (Zitiert auf S. 20).
- [68] K. CAPELLE: *A bird's-eye view of density-functional theory*. Brazilian journal of physics **36**, S. 1318 (2006). doi: [10.1590/S0103-97332006000700035](https://doi.org/10.1590/S0103-97332006000700035) (Zitiert auf S. 22, 23).
- [69] P. HOHENBERG und W. KOHN: *Inhomogeneous Electron Gas*. Physical Review **136**, S. B864 (1964). doi: [10.1103/PhysRev.136.B864](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864) (Zitiert auf S. 22).
- [70] W. KOHN und L. J. SHAM: *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*. Physical Review **140**, S. A1133 (1965). doi: [10.1103/PhysRev.140.A1133](https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133) (Zitiert auf S. 22).
- [71] J. P. PERDEW, K. BURKE und M. ERNZERHOF: *Generalized gradient approximation made simple*. Physical review letters **77**, S. 3865 (1996). doi: [10.1103/PhysRevLett.77.3865](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865) (Zitiert auf S. 23, 67, 69).
- [72] J. P. PERDEW und A. ZUNGER: *Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems*. Physical Review B **23**, S. 5048 (1981). doi: [10.1103/PhysRevB.23.5048](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.5048) (Zitiert auf S. 23, 67).
- [73] E. HÜCKEL: *Zur Quantentheorie der Doppelbindung*. Zeitschrift für Physik **60**, S. 423 (1930). doi: [10.1007/BF01341254](https://doi.org/10.1007/BF01341254) (Zitiert auf S. 23).
- [74] R. HOFFMANN: *An Extended Hückel Theory. I. Hydrocarbons*. The Journal of Chemical Physics **39**, S. 1397 (1963). doi: [10.1063/1.1734456](https://doi.org/10.1063/1.1734456) (Zitiert auf S. 23).

- [75] A. ZIENERT, J. SCHUSTER und T. GESSNER: *Extended Hückel Theory for Carbon Nanotubes: Band Structure and Transport Properties*. The Journal of Physical Chemistry A **117**, S. 3650 (2013). doi: [10.1021/jp312586j](https://doi.org/10.1021/jp312586j) (Zitiert auf S. 23).
- [76] M. WOLFSBERG und L. HELMHOLZ: *The Spectra and Electronic Structure of the Tetrahedral Ions  $MnO_4^-$ ,  $CrO_4^{2-}$ , and  $ClO_4^-$* . The Journal of Chemical Physics **20**, S. 837 (1952). doi: [10.1063/1.1700580](https://doi.org/10.1063/1.1700580) (Zitiert auf S. 24).
- [77] M. BÜTTIKER, Y. IMRY, R. LANDAUER und S. PINHAS: *Generalized many-channel conductance formula with application to small rings*. Physical Review B **31**, S. 6207 (1985). doi: [10.1103/PhysRevB.31.6207](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.6207) (Zitiert auf S. 25).
- [78] S. O. KOSWATTA, N. NEOPHYTOU, D. KIENLE, G. FIORI und M. S. CHOI: *Dependence of DC characteristics of CNT MOSFETs on bandstructure models*. IEEE Transactions on Nanotechnology **5**, S. 368 (2006). doi: [10.1109/TNANO.2006.876916](https://doi.org/10.1109/TNANO.2006.876916) (Zitiert auf S. 30).
- [79] *Handbuch Atomistix ToolKit 12.8*, (2012). URL: [www.quantumwise.com](http://www.quantumwise.com) (Zitiert auf S. 36, 69).
- [80] K. ALAM und R. LAKE: *Role of Doping in Carbon Nanotube Transistors With Source/Drain Underlaps*. IEEE Transactions on Nanotechnology **6**, S. 652 (2007). doi: [10.1109/TNANO.2007.908170](https://doi.org/10.1109/TNANO.2007.908170) (Zitiert auf S. 36, 62).
- [81] S. ILANI, L. A. K. DONEV, M. KINDERMANN und P. L. MCEUEN: *Measurement of the quantum capacitance of interacting electrons in carbon nanotubes*. Nature Physics **2**, S. 687 (2006). doi: [10.1038/nphys412](https://doi.org/10.1038/nphys412) (Zitiert auf S. 42).
- [82] J. GUO, S. DATTA, M. LUNDSTROM und M. P. ANANTAM: *Toward Multiscale Modeling of Carbon Nanotube Transistors*. International Journal for Multiscale Computational Engineering **2**, S. 257 (2004). doi: [10.1615/IntJMultCompEng.v2.i2.60](https://doi.org/10.1615/IntJMultCompEng.v2.i2.60) (Zitiert auf S. 49, 53, 61).
- [83] S. KOSWATTA, S. HASAN, M. LUNDSTROM, M. P. ANANTRAM und D. NIKONOV: *Nonequilibrium Green's Function Treatment of Phonon Scattering in Carbon-Nanotube Transistors*. IEEE T. Electron Dev. **54**, S. 2339 (2007). doi: [10.1109/TED.2007.902900](https://doi.org/10.1109/TED.2007.902900) (Zitiert auf S. 49, 53, 61).
- [84] S. G. SHIRAZI und S. MIRZAKUCHAKI: *High on/off current ratio in ballistic CNTFETs based on tuning the gate insulator parameters for different ambient temperatures*. Applied Physics A **113**, S. 447 (2013). doi: [10.1007/s00339-012-7543-9](https://doi.org/10.1007/s00339-012-7543-9) (Zitiert auf S. 49, 53, 61).

- [85] R. YOUSEFI, K. SAGHAFI und M. MORAVVEJ-FARSHI: *Numerical Study of Lightly Doped Drain and Source Carbon Nanotube Field Effect Transistors*. IEEE Transactions on Electron Devices **57**, S. 765 (2010). doi: [10.1109/TED.2010.2041282](https://doi.org/10.1109/TED.2010.2041282) (Zitiert auf S. 62).
- [86] S. TAIOLI, P. UMARI und M. M. DE SOUZA: *Electronic properties of extended graphene nanomaterials from GW calculations*. physica status solidi (b) **246**, S. 2572 (2009). doi: [10.1002/pssb.200982339](https://doi.org/10.1002/pssb.200982339) (Zitiert auf S. 67).
- [87] T. MIYAKE und S. SAITO: *Quasiparticle band structure of carbon nanotubes*. Physical Review B **68**, S. 155424 (2003). doi: [10.1103/PhysRevB.68.155424](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.155424) (Zitiert auf S. 67).
- [88] R. B. WEISMAN und S. M. BACHILO: *Dependence of Optical Transition Energies on Structure for Single-Walled Carbon Nanotubes in Aqueous Suspension: An Empirical Kataura Plot*. Nano Letters **3**, S. 1235 (2003). doi: [10.1021/nl034428i](https://doi.org/10.1021/nl034428i) (Zitiert auf S. 67).
- [89] V. N. STAROVEROV, G. E. SCUSERIA, J. TAO und J. P. PERDEW: *Comparative assessment of a new nonempirical density functional: Molecules and hydrogen-bonded complexes*. The Journal of Chemical Physics **119**, S. 12129 (2003). doi: [10.1063/1.1626543](https://doi.org/10.1063/1.1626543) (Zitiert auf S. 67).
- [90] V. BARONE, J. E. PERALTA, M. WERT, J. HEYD und G. E. SCUSERIA: *Density functional theory study of optical transitions in semiconducting single-walled carbon nanotubes*. Nano Letters **5**, S. 1621 (2005). doi: [10.1021/nl0506352](https://doi.org/10.1021/nl0506352) (Zitiert auf S. 67).
- [91] A. D. BECKE: *Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange*. The Journal of Chemical Physics **98**, S. 5648 (1993). doi: [10.1063/1.464913](https://doi.org/10.1063/1.464913) (Zitiert auf S. 67).
- [92] Y. MATSUDA, J. TAHIR-KHELI und W. A. GODDARD: *Definitive Band Gaps for Single-Wall Carbon Nanotubes*. The Journal of Physical Chemistry Letters **1**, S. 2946 (2010). doi: [10.1021/jz100889u](https://doi.org/10.1021/jz100889u) (Zitiert auf S. 67).
- [93] G. B. ABADIR, K. WALUS und D. L. PULFREY: *Basis-set choice for DFT/NEGF simulations of carbon nanotubes*. Journal of computational electronics **8**, S. 1 (2009). doi: [10.1007/s10825-009-0263-5](https://doi.org/10.1007/s10825-009-0263-5) (Zitiert auf S. 69).
- [94] N. TROULLIER und J. L. MARTINS: *Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*. Physical Review B **43**, S. 1993 (1991). doi: [10.1103/PhysRevB.43.1993](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.1993) (Zitiert auf S. 69).

## LITERATURVERZEICHNIS

- [95] D. R. HAMANN, M. SCHLÜTER und C. CHIANG: *Norm-Conserving Pseudopotentials*. Physical Review Letters **43**, S. 1494 (1979). doi: [10.1103/PhysRevLett.43.1494](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.43.1494) (Zitiert auf S. 69).
- [96] H. J. MONKHORST und J. D. PACK: *Special points for Brillouin-zone integrations*. Physical Review B (Solid State) **13**, S. 5188 (1976). doi: [10.1103/PhysRevB.13.5188](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188) (Zitiert auf S. 70).
- [97] J. D. HUNTER: *Matplotlib: A 2D Graphics Environment*. Computing in Science & Engineering **9**, S. 90 (2007). doi: [10.1109/MCSE.2007.55](https://doi.org/10.1109/MCSE.2007.55) (Zitiert auf S. 87).

# Abbildungsverzeichnis

1.1. Aufnahmen von CNTFETs, hergestellt am ZfM Chemnitz . . . . .	2
2.1. Graphenebene zur Herleitung der CNT-Struktur . . . . .	6
2.2. Einheitszellen des (7,0)- und (4,2)-CNTs . . . . .	6
2.3. Bandstruktur von Graphen . . . . .	9
2.4. Ableitung der CNT-Bandstruktur . . . . .	10
2.5. Idealisierte Transfercharakteristik und Bandkanten für einen CNTFET mit dotierten Kontakten . . . . .	12
2.6. CNTFETs mit unterschiedlicher Gate-Geometrie . . . . .	14
3.1. Illustration der Multiskalenmodellierung . . . . .	18
3.2. Schema zum LBF, Streuregion mit mehreren Transportkanälen . . . . .	26
3.3. Schema eines Systems im Rahmen einer NEGF-Rechnung . . . . .	27
3.4. Schema des Modells der verwendeten NDS-Implementation . . . . .	29
4.1. Schematische Struktur des Modellsystems . . . . .	34
4.2. Transfercharakteristiken zur Illustration langreichweitiger Elektrostatik . . . . .	37
5.1. Teilbänder zur Untersuchung verschiedener Einflüsse auf das (7,0)-CNT mit dem NDS-Modell . . . . .	41
5.2. Transfercharakteristik für einen Transistor mit NDS ( $L_{\text{ch}} = 10.2 \text{ nm}$ ) . . . . .	42
5.3. Bandkanten für unterschiedliche $V_{\text{gs}}$ aus NDS-Rechnungen . . . . .	43
5.4. Schema zur Verwendung von $D_{\text{proj}}$ für die Berechnung der orts aufgelösten Zustandsdichte in atomistischen Rechnungen . . . . .	44
5.5. $D_{\text{proj}}$ und $D$ zur Untersuchung verschiedener Einflüsse auf das (7,0)-CNT mit EHT . . . . .	45
5.6. Transfercharakteristik für einen Transistor mit EHT ( $L_{\text{ch}} = 10.2 \text{ nm}$ ) . . . . .	47
5.7. $D_{\text{proj}}$ und Bandkanten für unterschiedliche $V_{\text{gs}}$ aus EHT ( $L_{\text{ch}} = 10.2 \text{ nm}$ ) . . . . .	48
5.8. Transmissionsfunktionen für den Aus-Zustand mit EHT ( $L_{\text{ch}} = 10.2 \text{ nm}$ ) . . . . .	49
5.9. An-Strom für unterschiedliche Dotierungen der Kontakte . . . . .	51
5.10. Transfercharakteristiken in Abhängigkeit von $L_{\text{ch}}$ , $L_{\text{spac}} = 1.3 \text{ nm}$ . . . . .	53
5.11. Transmissionsfunktionen für verschiedene $V_{\text{gs}}$ , $L_{\text{ch}} = 5.1 \text{ nm}$ . . . . .	54
5.12. Verschiebung der Transmission als Funktion von $V_{\text{gs}}$ , $L_{\text{ch}} = 5.1 \text{ nm}$ . . . . .	55
5.13. $D_{\text{proj}}$ für unterschiedliche $L_{\text{ch}}$ , $V_{\text{gs}} = -1.0 \text{ V}$ . . . . .	56
5.14. $R_{\text{on/off}}$ und $S_{\text{th}}$ in Abhängigkeit der Kanallänge $L_{\text{ch}}$ . . . . .	57

5.15. Transfercharakteristiken in Abhängigkeit von $L_g$ , $L_{ch} = 10.2 \text{ nm}$ . . . . .	59
5.16. $D_{proj}$ und Bandkanten für unterschiedliche $L_g$ , $V_{gs} = -0.9 \text{ V}$ . . . . .	60
5.17. Energieaufgelöste Elektronendichte eines CNTFET mit dotierten Kontakten aus KOSWATTA ET AL. [83] . . . . .	61
A.1. Bandstruktur des (7,0)-CNTs, berechnet mit verschiedenen Methoden . . . .	68
B.1. Einfluss unterschiedlicher Basissätze auf $E_{gap}$ , $E_{tot}$ und $E_F$ eines (7,0)-CNTs	70
C.1. Transfercharakteristik, Transmission und $D_{proj}$ , berechnet mit DFT und EHT	73
C.2. Vergleich der Rechenzeit und Konvergenz von DFT und EHT . . . . .	74

## Tabellenverzeichnis

3.1. Überblick einiger Methoden zur Transistor- und Schaltkreisuntersuchung. . .	19
4.1. Räumliche Parameter des Modellsystems . . . . .	34
5.1. Parameter für die NDS-Rechnungen, extrahiert aus der mit DFT berechneten Bandstruktur . . . . .	39
B.1. Parametersatz für die Rechnungen mit EHT von ZIENERT ET AL. [75] . . . . .	71

## Danksagung

Für das Gelingen dieser Arbeit war eine Vielzahl an Personen wesentlich, bei denen ich mich abschließend bedanken möchte. Hierzu gehören:

- PROF. DR. STEFAN E. SCHULZ und PROF. DR. ANGELA THRÄNHARDT für die Übernahme der Gutachten;
- DR. JÖRG SCHUSTER für Ratschläge, das Korrekturlesen des Manuskripts und für organisatorische Tätigkeiten;
- DR. ANDREAS ZIENERT für zahllose Ratschläge, allzeit wissenswerte Informationen und die sorgfältige Korrektur dieser Arbeit;
- DR. MARTIN CLAUS und SVEN MOTHEs für die Entwicklung und Bereitstellung des Modells zur numerischen Bauelementesimulation und für die Unterstützung bei dessen Handhabung;
- CHRISTIAN WAGNER für hilfreiche Diskussionen und das Bereitstellen ausgereifter Funktionen zum Fit von Bandstrukturen;
- ERIK E. LORENZ für seine Funktion als Administrator des neuen Simulationsclusters und für Ratschläge zur virtuellen Welt;
- FABIAN TEICHERT für seine Unterstützung bei „interessanten Problemen“ bezüglich  $\LaTeX$  während der Erstellung dieser Arbeit;
- die CNT-Gruppe für Einblicke in die experimentelle Herangehensweise und aktuellen Herausforderungen;
- alle Mitglieder der Simulationsgruppe für ein ausgezeichnetes Arbeitsumfeld;
- meine Familie, ohne deren selbstlose Unterstützung diese Arbeit und das Studium in den letzten fünf Jahren unmöglich gewesen wäre;
- und schließlich die vielen ehrenamtlich tätigen Entwickler und Unterstützer zahlreicher freier Projekte, mit deren Unterstützung diese Arbeit entstand: Python und die Bibliothek Matplotlib [97] zur Darstellung der Diagramme, Inkscape und Blender zur Erzeugung der Schemata,  $\LaTeX$  und Texmaker zum Schreiben der vorliegenden Seiten und schließlich Git zur Versionsverwaltung.



## **Selbstständigkeitserklärung**

Ich erkläre gegenüber der Technischen Universität Chemnitz, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe.

Die vorliegende Arbeit ist frei von Plagiaten. Alle Ausführungen, die wörtlich oder inhaltlich aus anderen Schriften entnommen sind, habe ich als solche kenntlich gemacht.

Diese Arbeit wurde in gleicher oder ähnlicher Form noch bei keinem anderen Prüfer als Prüfungsleistung eingereicht und ist auch noch nicht veröffentlicht.

Chemnitz, den 20. November 2014

---

Florian Fuchs