

声子散射下碳纳米管场效应管建模方法研究*

赵晓辉^{1)†} 蔡理¹⁾ 张鹏²⁾

1) (空军工程大学理学院, 西安 710051)

2) (空军工程大学工程学院, 西安 710038)

(2012年12月15日收到; 2013年1月16日收到修改稿)

声子散射对碳纳米管场效应管 (carbon nanotube field effect transistor, CNTFET) 的特性有着不可忽略的影响. 传统研究方法基于弹道运输模型来分析发生声子散射时各参数对器件特性的影响, 进而建立 CNTFET 声子散射模型. 为了降低模型复杂度, 提高仿真计算的速度, 本文深入研究了 CNTFET 的声子散射影响, 对手性、温度和能量三个参数的变化进行了仿真, 分析了参数对器件特性的影响. 采用线性近似拟合的方式建立了一种新的 CNTFET 声子散射模型. 通过分析散射下电流的变化, 验证了该模型的正确性和有效性. 与半经典散射模型相比, 该模型由于不需要进行积分计算, 计算过程较为简单, 降低了运算量.

关键词: 碳纳米管场效应管, 声子散射模型, 线性近似拟合

PACS: 03.65.Nk, 05.60.Gg, 31.15.Gy

DOI: 10.7498/aps.62.100301

1 引言

1998年, Delft大学的Tans等^[1]利用半导体型的单壁碳纳米管得到了第一个在室温下工作的碳纳米管场效应管 (carbon nanotube field effect transistor, CNTFET), 与金属氧化物半导体场效应管相比, CNTFET尺寸更小, 承受的电流密度更大. 为了揭示CNTFET器件原理及其电路的工作方式, 很多学者在理论和实验上对CNTFET进行了深入研究, 涉及器件原理、电路性能以及碳纳米管的输运方程和散射机制等多个方面, 取得了一系列进展^[2-5].

声子是用来描述晶体原子热振动规律的一种能量量子, 其能量等于 $\hbar\omega$. 当载流子运动时, 会受到热振动原子的散射, 它们交换的能量以 $\hbar\omega$ 为单元进行, 这种作用就是声子散射. 室温下, 载流子输运会受到声子散射的影响^[6]. 低电压下, 载流子平均自由程约为0.6—1.5 μm , 此时散射主要是声学声子散射^[7,8] (acoustic phonon, AP). 对声子散射的影响, 建模常用的有蒙特卡罗半经典仿真和非平衡格

林函数法, 但它们求解过程复杂, 需要进行密集的数值计算. 如何在弹道运输模型的基础上, 考虑发生声子散射时的相关参数变化, 并近似求解电流是建立CNTFET声子散射模型的关键. 本文对声子散射影响进行了深入研究, 建立了CNTFET的声子散射模型, 分析了散射下的电流变化, 仿真验证了该模型的正确性.

2 声子散射的建模计算

以顶栅结构的类金属氧化物半导体型CNTFET为例, 结构如图1所示. 它有效地减小了绝

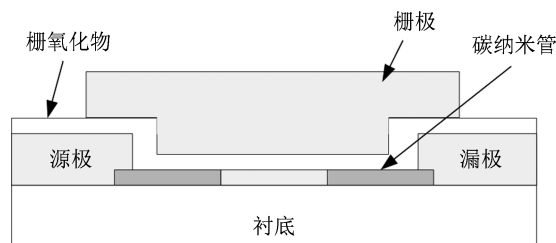


图1 顶栅结构 CNTFET

* 陕西省自然科学基金研究计划重点项目 (批准号: 2011JZ015) 和陕西省电子信息系统综合集成重点实验室基金 (批准号: 201115Y15) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: prayerhui@gmail.com

缘层厚度以提高栅压的控制作用, 采用了顶部接触的方式降低了接触电阻, 具有局部低栅压、开关速度快和集成度高等特点.

低能量下, 声学声子散射起着主导地位, 散射率与能量相关, 发生 AP 散射时的传输系数如下 [9]:

$$T_{AP}(E) = \frac{l_{AP}(E_{p,l})}{l_{AP}(E_{p,l}) + L}, \quad (1)$$

其中 L 为 CNTFET 沟道长度, $l_{AP}(E_{p,l})$ 为平均自由程, 其值为

$$l_{AP}(E_{p,l}) = \frac{\lambda_{AP}D_0}{D(E_{p,l})(1 - f(E))}, \quad (2)$$

其中, λ_{AP} 为载流子平均自由程, 其值依赖于 CNT 的手性和温度; 常态密度 $D_0 = 8/(3\pi V_{CC}a_{CC})$, 碳—碳键长 $a_{CC} = 1.42 \text{ \AA}$, 碳—碳键能量 V_{CC} 约为 3 eV ; $f(E)$ 为费米-狄拉克函数, $D(E_{p,l})$ 为态密度, 其中的 $E_{p,l}$ 为第 m 个子带、第 l 个状态的能量值.

$$D(E_{p,l}) = D_0(E/\sqrt{E^2 - E_{p,l}^2}). \quad (3)$$

对于 $E_{p,l} < V_{CC}$ 的情况, 有

$$E_{p,l} = \frac{a_{CC}V_{CC}}{2} \sqrt{k_p^2 + k_l^2}, \quad (4)$$

其中 k_p 和 k_l 是波数, 其值分别是

$$k_p = \begin{cases} \frac{[6p - 3 - (-1)^p]}{6d}, & \text{mod}(n - m, 3) \neq 0 \\ 2p/d, & \text{mod}(n - m, 3) = 0 \end{cases}, \quad (5)$$

$$k_l = \frac{2\pi}{L}l, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6)$$

(5) 式中 d 为 CNT 的直径, 对于手性为 (n, m) 的 CNT, 其直径等于

$$d = \frac{\sqrt{3}a_{CC}}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + mn}. \quad (7)$$

通过 (1)—(7) 式, 可计算 $T_{AP}(E)$ 的值. AP 散射下的电流 I_{AP} 可表达为传输函数 T_{AP} 在整个能级上的积分, 即

$$I_{AP} = \frac{4e}{h} \sum_{p=1, l=0}^{\infty} \int_{E_{p,l}}^{\infty} T_{AP}(E)f(E, V_{GS}, V_{DS})dE, \quad (8)$$

式中 V_{GS} 和 V_{DS} 分别为栅极和漏极电压.

3 声子散射下传输函数的求解

传输函数 $T_{AP}(E)$ 无法直接计算积分的数值解, 为得出其近似解, 需要对 $T_{AP}(E)$ 的变化进行分析. 由于温度对声子散射起着主要作用, 同时根据 (7)

式, CNT 的手性影响着直径大小, 直径又反映出能量的变化 (4)—(6) 式, 因此分别对手性和能量 $E_{p,l}$ 两个参数的影响进行研究, 以声子散射电流与弹道运输电流之比作为目标函数, 即

$$\Gamma(E') = \frac{\int_{E_{p,l}}^{E'} T_{AP}(E)f(E, V_{GS}, V_{DS})dE}{\int_{E_{p,l}}^{E'} f(E, V_{GS}, V_{DS})dE}. \quad (9)$$

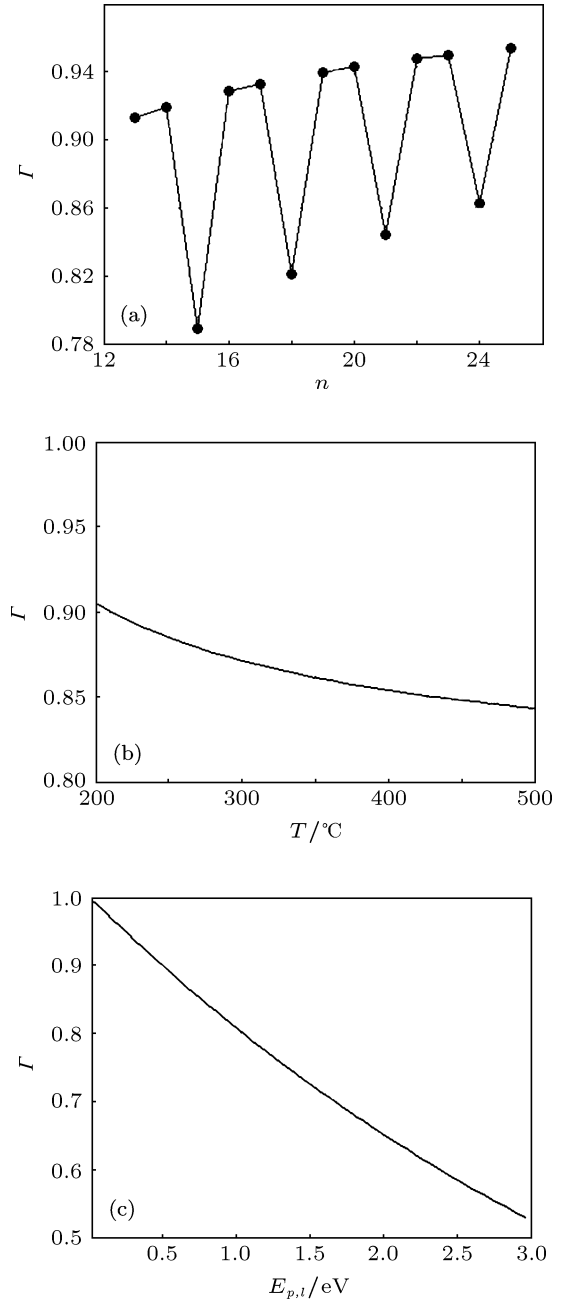


图 2 Γ 随参数的变化情况 (a) 手性; (b) 温度; (c) 能量

图 2 为不同温度、手性与能量下 AP 散射电流与弹道运输电流比值 Γ 的变化. 可见随着温度升

高, 声子散射增强, 传输函数减小, 从而导致电流减小; 而能量增大使 Γ 递减. 根据仿真结果, Γ 与温度和能量接近于线性关系, 可将 T_{AP} 近似表达为关于温度 T 与能量 $E_{p,l}$ 的函数.

对于 $T_{AP} = \Gamma(T, E_{p,l})$, 选取 $T \in [200, 500]$ 的 30 个点, 手性从 (13, 0)—(25, 0), 采集 390 个数据点进行线性拟合. 经化简, 其近似表达式为

$$T_{AP} = \Gamma(T, E_{p,l}) = 0.9142 + 2.5253 \times 10^{-4} \times T - 0.1736 \times \frac{E_{p,l}}{q}. \quad (10)$$

用拟合值代替原积分方程的传输系数 $T_{AP}(E)$, 将电流公式改写如下:

$$I_{AP} = \frac{4e}{h} \sum_{p=1, l=0}^{\infty} \Gamma(T, E_{p,l}) \times \int_{E_{p,l}}^{\infty} f(E, V_{GS}, V_{DS}) dE, \quad (11)$$

其中的费米 - 狄拉克积分可近似计算, 因此公式中的积分不再涉及传输系数, 可直接求解电流.

4 电流的仿真分析

首先根据弹道输运理论计算出未发生散射下的电流, 再结合 (10) 和 (11) 式, 根据 T_{AP} 的近似值可直接求出散射电流. 为验证本文所提建模方法的有效性与可行性, 将弹道输运模型、传统半经典散射模型^[10]和本文散射模型进行对比分析. CNTFET 的参数设置为: 温度 $T = 300$ K, 费米能级 $E_F = -0.32$ eV, 手性为 (16, 0), 栅极氧化层厚度 $t_{ox} = 1.5 \times 10^{-9}$ m, CNT 长度 $L = 30$ nm, CNT 直径 $d = 1$ nm. 三种模型的电流仿真结果如图 3 所示.

图 3 中蓝色实线为弹道输运模型的电流特性, 红色虚线为传统半经典散射模型的电流特性, 红色圆圈为本文散射模型的电流特性. 从图 3 可以看出, 本文散射模型与弹道输运模型相比其电流有所降低, 这是由于 AP 散射作用使得载流子传输受到影响而导致, 可见本文散射模型能够反映出声子散射对器件电流的影响; 而与传统半经典散射模型相比,

仿真曲线基本一致, 整体电流误差不超过 2%, 表明本文散射模型的精度较高.

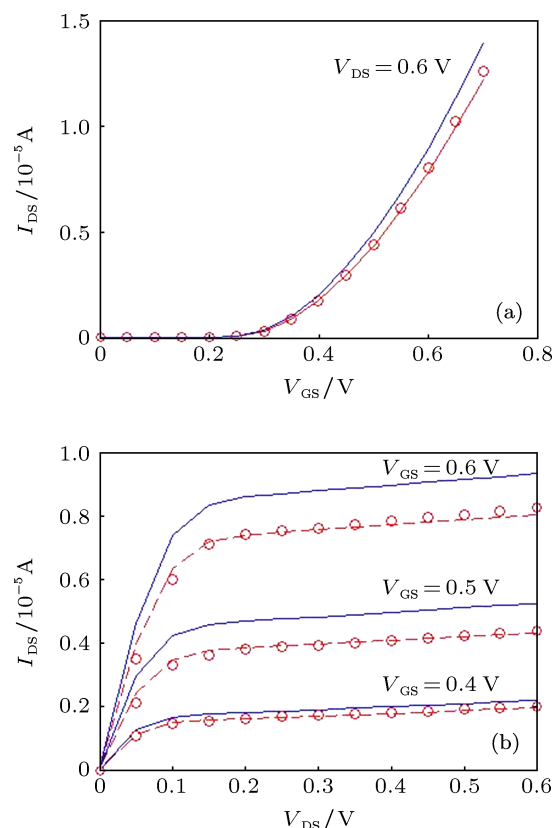


图 3 输出电流仿真结果 (a) 电流与栅极电压关系; (b) 电流与漏极电压关系

5 结论

声子散射影响的传统建模方法主要有蒙特卡罗半经典仿真和非平衡格林函数法, 但它们都存在计算量大、计算方式复杂等问题. 本文对声子散射下 CNTFET 半经典建模方法进行了研究, 通过研究手性、温度和能量对器件特性的影响, 将传输函数近似看作关于温度与能量的函数, 建立一种线性近似数学模型. 通过对电流的仿真计算, 发现该模型可以有效反映声子散射的影响. 由于该模型不包含积分公式, 计算较为简单, 为 CNTFET 建模仿真提供了一种新的快速建模的方法, 具有重要的指导意义.

[1] Tans S J, Verschueren A R M, Dekker C 1998 *Nature* **393** 49
 [2] Zhou H L, Chi Y Q, Zhang M X, Fang L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8104 (in Chinese) [周海亮, 池雅庆, 张民选, 方粮 2010 物理学报 **59** 8104]
 [3] Li P J, Zhang W J, Zhang Q F, Wu J L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1054

(in Chinese) [李萍剑, 张文静, 张琦锋, 吴锦雷 2007 物理学报 **56** 1054]
 [4] Deng J, Wong H S P 2007 *IEEE Trans. Electron Dev.* **54** 3186
 [5] Zhou X J, Park J Y, Huang S M, Liu J, McEuen P L 2005 *Phys. Rev.*

- Lett.* **95** 146805
- [6] Dresselhaus M S, Eklund P C 2000 *Adv. Phys.* **49** 705
- [7] Fregonese S, Goguet J, Maneux C, Zimmer T 2009 *IEEE Trans. Electron Dev.* **56** 1184
- [8] Guo J, Lundstrom M S 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 193103
- [9] Honinethun H C, Retailleau S G 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 1112
- [10] Koswatta S O, Hasan S, Lundstrom M S, Anantram M P, Nikonov D E 2007 *IEEE Trans. Electron Dev.* **54** 2339

Modeling of carbon nanotube field effect transistor with phonon scattering*

Zhao Xiao-Hui^{1)†} Cai Li¹⁾ Zhang Peng²⁾

1) (*The Sciences Institute of Air Force Engineering University, Xi'an 710051, China*)

2) (*The Engineering Institute of Air Force Engineering University, Xi'an 710038, China*)

(Received 15 December 2012; revised manuscript received 16 January 2013)

Abstract

Phonon scattering has a non-negligible influence on the characteristics of carbon nanotube field effect transistor (CNTFET). Using the ballistic transport model, the device parameters under phonon scattering are analyzed, and then the CNTFET phonon scattering model is established. To reduce the complexity of this model so that simulation speed can be improved, the effects of phonon scattering is studied through analyzing chirality, temperature and energy, and therefore a new CNTFET phonon scattering model is established with linear approximation. By analyzing the scattering current changes, correctness and validity of the model are demonstrated. The proposed model is easier for calculation and has less computational complexity compared with semi-classical scattering model.

Keywords: carbon nanotube field effect transistors, phonon scattering model, linear approximation

PACS: 03.65.Nk, 05.60.Gg, 31.15.Gy

DOI: 10.7498/aps.62.100301

* Project supported by the Key Program of Shaanxi Provincial Nature Science for Basic Research, China (Grant No. 2011JZ015) and Research Fund of Shaanxi Key Laboratory of Electronic Information System Integration, China (Grant No. 201115Y15).

† Corresponding author. E-mail: prayerhui@gmail.com