

## 一种碳纳米管场效应管的 HSPICE 模型\*

赵晓辉<sup>1)†</sup> 蔡理<sup>1)</sup> 张鹏<sup>2)</sup>

1) (空军工程大学理学院, 西安 710051)

2) (空军工程大学工程学院控制科学与工程系, 西安 710038)

(2013 年 1 月 8 日收到; 2013 年 3 月 22 日收到修改稿)

为在 HSPICE 中建立一种计算简单且精度较高的碳纳米管场效应管 (carbon nanotube field effect transistor, CNTFET) 模型, 在 CNTFET 半经典建模方法的基础上, 分析了自洽电势与载流子密度之间的关系, 提出用线性近似进行拟合, 并推导了自洽电势的显式表达式, 从而避免了积分方程的迭代求解过程. 然后在 HSPICE 中建立了相应的 CNTFET 模型, 通过仿真比较, 结果表明该模型具有较高的精度, 用其构建的逻辑门电路能够实现相应逻辑功能, 且运算时间大为减少.

**关键词:** 碳纳米管场效应管, 半经典模型, 线性近似拟合, HSPICE 仿真

**PACS:** 05.60.Gg, 31.15.Gy, 72.10.Bg

**DOI:** 10.7498/aps.62.130506

## 1 引言

1998 年, Tans 等<sup>[1]</sup>, 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), 与硅基 MOS 管相比, CNTFET 具有更优越的器件性能及尺寸压缩前景<sup>[1]</sup>. 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, 涉及到器件原理、电路性能以及碳纳米管的输运方程和散射机理等多个方面, 取得了一系列进展<sup>[2-6]</sup>.

目前针对 CNTFET 建模主要有两种方法, 一是非平衡格林函数法<sup>[7-9]</sup> (nonequilibrium Green's function, NEGF), 二是基于弹道输运假设的半经典建模方法<sup>[10]</sup>. NEGF 建模法通过循环迭代求解薛定谔方程与泊松方程来模拟电子输运情况, 为量子器件的建模提供了一种科学有效的方法, 但它需要进行密集数值计算, 难以满足 SPICE 仿真的要求<sup>[11]</sup>. 当 CNT 的长度小于 10 nm 时, 载流子在沟

道传输中不产生声子散射, 该输运过程可视为弹道输运, 能够基于弹道输运理论对 CNTFET 电荷总数和载流子密度进行建模, 即半经典建模法<sup>[12]</sup>. 然而该模型的最大障碍在于如何准确计算电荷密度, 通常的求解过程需要进行多次迭代与积分计算, 运算量巨大, 对于大规模电路仿真十分不利<sup>[13]</sup>. 如何在遵循 CNT 的输运特性基础上, 有效减少建模时的运算量, 并保持较高的精度及通用性, 是当前 CNTFET 建模面临的一个难题.

在以前的工作中我们提出了一种基于支持向量机 (support vector regression, SVR) 的 CNTFET 半经典建模法<sup>[14]</sup>, 引入 SVR 近似表达自洽电势与载流子密度之间的关系, 不需要反复计算积分, 有效降低了运算量. 但该方法无法给出电流解析表达式, 导致不能直接应用于 SPICE. 本文在此基础上进行了深入研究, 提出采用线性近似拟合自洽电势与载流子密度之间的关系, 给出了自洽电势的显式表达式, 并在 HSPICE 中建立了 CNTFET 器件模型和基本逻辑门电路. 仿真实验表明该模型精度较高, 能够有效降低运算量.

\* 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

## 2 基于弹道运输的 CNTFET 半经典模型

以顶栅结构的类 MOS 型 CNTFET 为例, 其结构及电荷运输模型<sup>[15]</sup> 如图 1 所示. 它有效地减小了绝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、开关速度高和集成度高等特点.

引入自洽电势  $U_{SC}$ , 有

$$U_{SC} = q \left( -\frac{V_G C_G + V_D C_D + V_S C_S}{C_\Sigma} + \frac{\Delta Q}{C_\Sigma} \right), \quad (1)$$

式中  $C_\Sigma$  为总电容,  $\Delta Q$  为偏置引起的非平衡移动电荷, 有

$$\Delta Q = q(N_S + N_D - N_0), \quad (2)$$

式中载流子密度分别为

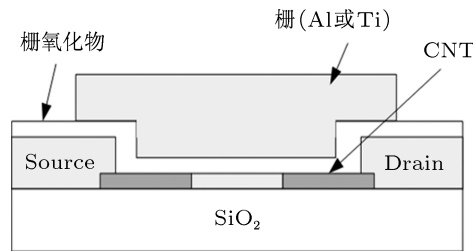
$$N_S = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) f(E - U_S) dE, \quad (3a)$$

$$N_D = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) f(E - U_D) dE, \quad (3b)$$

$$N_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) f(E - E_f) dE, \quad (3c)$$

式中  $E_f$  为费米能级,  $D(E)$  与  $U_S, U_D$  的定义如下:

$$D(E) = D_0 \frac{E}{\sqrt{E^2 - (E_g/2)^2}} \text{sgn}(E - E_g/2), \quad (4a)$$



$$U_S = E_f - U_{SC}, \quad (4b)$$

$$U_D = E_f - U_{SC} - qV_{DS}. \quad (4c)$$

将 (3) 代入 (1) 式, 通过求解积分方程, 可得到自洽电势  $U_{SC}$ , 然后代入下式可得电流<sup>[15]</sup>

$$I_{DS} = \frac{2qkT}{\pi\hbar} \left[ f \left( \frac{E_f - U_{SC}}{kT} \right) - f \left( \frac{E_f - U_{SC} - qV_{DS}}{kT} \right) \right]. \quad (5)$$

在之前的工作中, 基于支持向量机进行了简化计算, 将 (4b) 和 (4c) 式中  $U_i$  和  $N_i$  ( $i = S, D$ ) 之间的函数关系用 svrf 近似表达, 即

$$N_i = \text{svrf}(U_i), \quad i = S, D. \quad (6)$$

以  $\text{svrf}(U_i)$  替代  $N_i$ , 将原积分方程 (1) 转变为不包含积分的齐次非线性方程, 如下式:

$$\Gamma(U_S) = \frac{q^2}{C_\Sigma} [\text{svrf}(U_S) \text{svrf}(U_S - qV_{DS})] + U_S - \left( \frac{qQ_t + q^2 N_0}{C_\Sigma} + E_f \right) = 0. \quad (7)$$

由于 svrf 为单调递增非负函数, 故  $\Gamma(U_S)$  单调递增, 且只有唯一解. 此时的方程 (7) 相比原积分方程 (1) 在求解上要简便得多. 基于 SVR 拟合  $U_i-N_i$  的函数关系如图 2 所示.

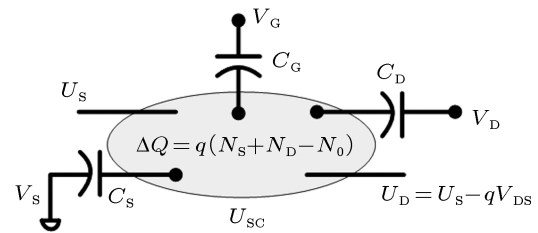


图 1 顶栅结构 CNTFET 电荷弹道运输模型

## 3 基于线性拟合的自洽电势求解方法

基于支持向量机的求解方法虽然不需要积分运算, 有效降低了计算量, 但仍需迭代求解方程 (7) 以得到自洽电压, 而无法直接给出电流解析表达式, 这导致在 HSPICE 等电路仿真软件中建立元件模型时存在困难. 进一步分析图 2 中  $U_i$  和  $N_i$  之间的函数关系, 发现该函数关系在  $U_i > 0$  时可近似看做一条直线,  $U_i < 0$  时可认为  $N_i = 0$ , 故考虑用线性拟合的方式简化计算.

假设  $U_i$  和  $N_i$  的函数关系为

$$N_i(U_i) = \begin{cases} a \times U_i + b, & U_i > 0, \\ 0, & U_i < 0, \end{cases} \quad (8)$$

$i = S, D,$

考虑到 (4b), (4c) 代入 (3) 式后, 有

$$\begin{aligned} \Delta Q &= q[a(E_f - U_{SC} + E_f - U_{SC} - qV_{DS} - E_f) + b] \\ &= q[a(E_f - 2U_{SC} - qV_{DS}) + b]. \end{aligned} \quad (9)$$

代入 (1) 式有

$$U_{SC} = q \left( \frac{q[a(E_f - 2U_{SC} - qV_{DS}) + b] - (V_G C_G + V_D C_D + V_S C_S)}{C_\Sigma} \right). \quad (10)$$

化简得

$$U_{SC} = q \frac{qa(E_f - qV_{DS}) + qb - (V_G C_G + V_D C_D + V_S C_S)}{C_\Sigma + 2q^2 a}. \quad (11)$$

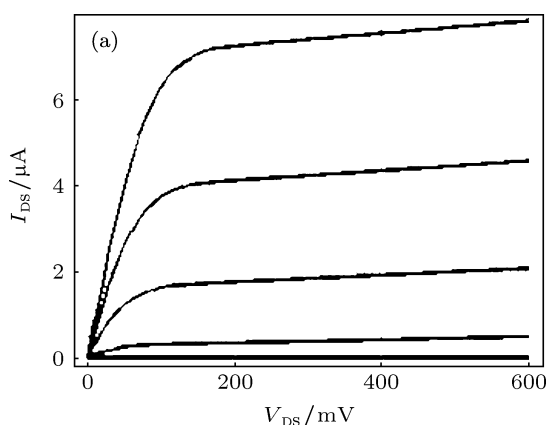
至此得到了  $U_{SC}$  的显式表达, 可直接代入 (5) 式求出电流.

将  $U_i$  和  $N_i$  的函数关系进行线性拟合后, 使得原本难以得出解析解的复杂非线性方程转变为显式表达式, 避免了繁琐的积分迭代过程, 进而能够在电路仿真中较为简便地建立器件模型.

### 4 电流的仿真分析

取 CNTFET 的参数为: 栅极氧化层厚度  $t_{ox} = 1.5 \times 10^{-9}$ , CNT 长度  $L = 30$  nm, 费米能级  $E_f = -0.32$  eV, CNT 直径  $d = 1$  nm, 温度  $T = 300$  K. 根据本文提出的方法, 在 HSPICE 中建立 n 型与 p 型 CNTFET 的器件模型, 其输出电流特性如图 3 所示.

为了验证该模型的正确性, 利用 Hspice



Toolbox<sup>[16]</sup> 将仿真结果导入 MATLAB, 与传统的半经典模型 FETTOY<sup>[17]</sup> 和基于 SVR 的模型对输出电流特性进行比较, 仿真结果如图 4 所示.

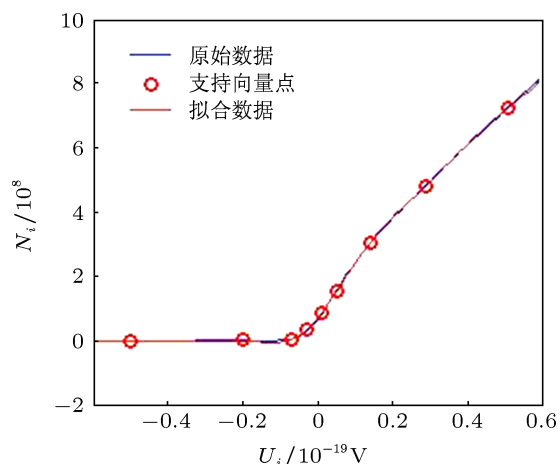


图 2 对  $U_i-N_i$  的函数关系用支持向量机拟合的效果

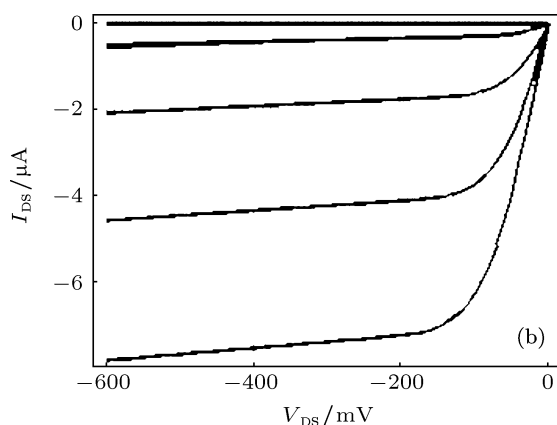


图 3 输出电流特性仿真结果 (a) n 型 CNTFET; (b) p 型 CNTFET

图 4 中, 实线为 FETTOY 模型仿真结果, 虚线为 SVR 模型仿真结果, 圆圈为本文所建模型仿真结果. 从图 4 中可以看出, 三种模型的仿真曲线基本一致, 以 FETTOY 模型为基准, 本文所建模型的误差与基于 SVR 的模型相比稍有增加, 约为 5%, 仍处于可接受范围内. 由于仿真结果的差别非常小,

可认为本文建立的模型可信度较高.

为验证本文所建模型在电路仿真中的性能, 在 HSPICE 中用其构建了互补结构的 CNTFET 逻辑门, 电路结构及相应的仿真结果如图 5 所示.

图 5 中上排为 CNTFET 逻辑门电路结构, 下排为相应的 HSPICE 仿真结果, 其中  $V_{IN1}, V_{IN2}$  为

两输入电压,  $V_{OUT}$  为输出电压. 从仿真结果可见基于本文模型建立的逻辑门电路能够实现相应的逻辑功能.

同时将本文模型与 Southampton 大学的模型 [18] 进行了比较, 运行时间和占用内存情况如表 1 所示.

从表 1 可见, 与 Southampton 大学的模型相比, 本文模型占用内存情况近似, 而在运算时间上降低了 3 个数量级. 这是由于传统半经典建模方法需迭代求解自洽电压, 计算量非常大, 而本文模型用线性拟合的方式得到自洽电压的显式表达, 避免了积分方程的迭代求解, 运行速度大大提高, 这对

CNTFET 的大规模集成电路仿真具有很大优势.

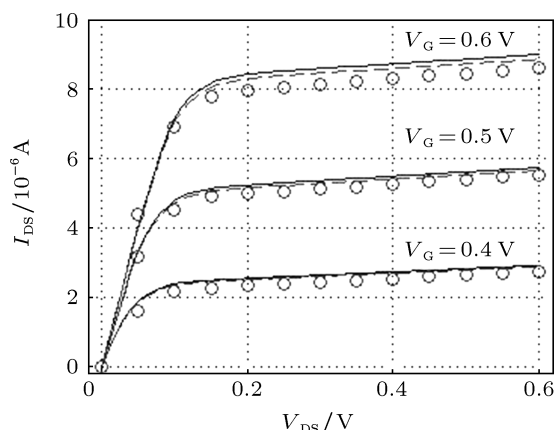


图 4 不同模型输出电流特性仿真结果

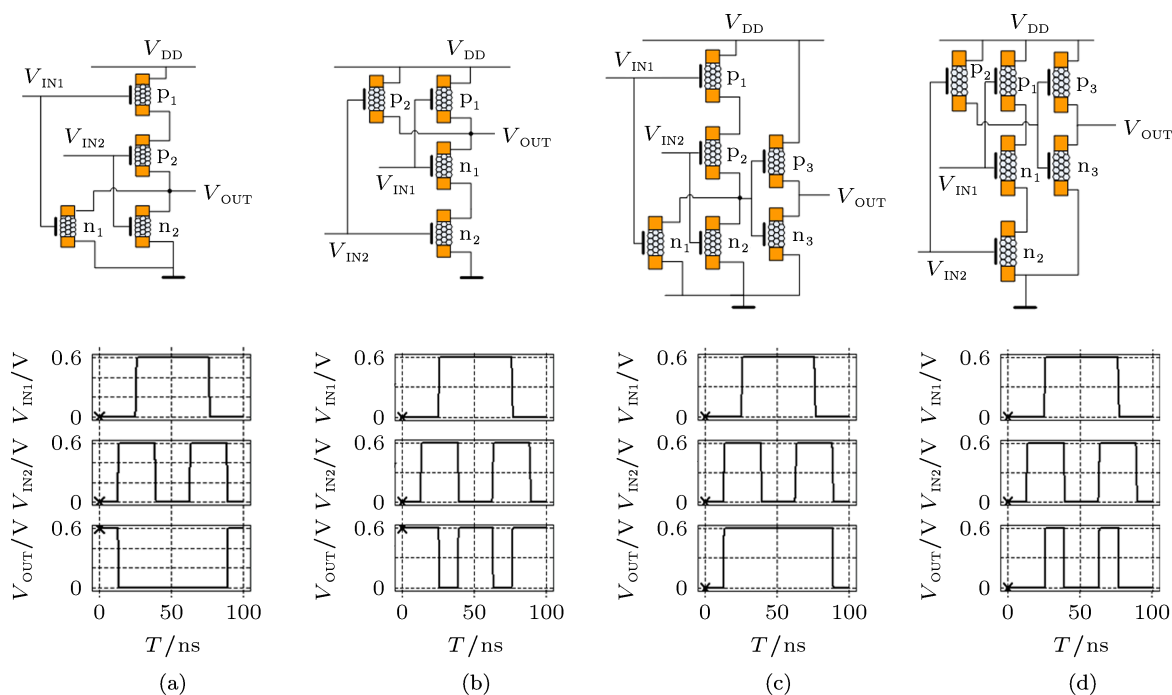


图 5 CNTFET 逻辑门电路结构及仿真结果 (a) 或非门; (b) 与非门; (c) 或门; (d) 与门

表 1 两种模型的运算时间及占用内存情况

仿真模型	测试项目	或非门	与非门	或门	与门
Southampton 模型	运行时间/s	16486.7	11312.57	27437.53	27057
	占用内存/kbit	1320	1320	1846	1846
本文模型	运行时间/s	12.62	10.92	17.9	22.49
	占用内存/kbit	1962	1963	2679	2681

## 5 结论

随着集成度的不断提高, 集成电路规模几何增

长, 电路形式日益复杂, CNTFET 要想用于大规模电路仿真, 在精度误差可接受范围内, 最大限度降低时间开销是当前面临的一个主要问题. 本文对

CNTFET 的半经典建模方法进行了深入研究, 分析了自洽电势与载流子密度之间的关系并提出用线性近似进行拟合, 推导了自洽电势的显式表达式, 从而避免了积分方程的迭代求解过程. 在此基础上首先在 HSPICE 中建立了相应的 CNTFET 模型, 通过与 FETTOY 模型和 SVR 模型进行比较, 验证了

本文模型的正确性; 其次构建了四个基本逻辑门电路, 仿真表明其能够实现相应逻辑功能, 其运算时间与 Southampton 大学的模型相比降低了 3 个数量级. 本研究对 CNTFET 的大规模集成电路仿真具有重要的指导意义.

- 
- [1] 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]
- [2] Raychowdhury A, Roy K 2006 *IEEE T. Comput.* **25** 58
- [3] Zhao P, Guo J 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 034503
- [4] Zhou X J, Park J Y, Huang S M, Liu J, McEuen P L 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146805
- [5] Fregonese S, Goguet J, Maneux C, Zimmer T 2009 *IEEE T. Electron. Dev.* **56** 1184
- [6] Alam K 2006 *Ph. D. Dissertation* (California: University of California, Riverside)
- [7] Guo J, Datta S, Lundstrom M 2004 *IEEE T. Electron. Dev.* **51** 172
- [8] Neophytou N, Ahmed S, Klimeck G 2007 *J. Comput. Elect.* **6** 317
- [9] Yamamoto T, Watanabe K 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 255503
- [10] Raychowdhury A, Mukhopadhyay S, Roy K 2004 *IEEE T. Comput.* **23** 1411
- [11] Liu X H, Zhang J S, Wang J W, Ao Q, Wang Z, Ma Y, Li X, Wang Z S, Wang R Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 384 (in Chinese) [刘兴辉, 张俊松, 王绩伟, 敖强, 王震, 马迎, 李新, 王振世, 王瑞玉 2002 物理学报 **51** 384]
- [12] Deng J, Wong H S P 2007 *IEEE T. Electron. Dev.* **54** 3186
- [13] Fregonese S, Cazin d'Honincthun H, Goguet J, Maneux C, Zimmer T, Bourgoin J P, Dollfus P, Galdin-Retailleau S 2008 *IEEE T. Electron. Dev.* **55** 1317
- [14] Zhao X H, CAI L, Zhang P 2012 *Jisuan Wuli* **29** 575
- [15] Rahman A, Guo J, Datta S, Lundstrom M 2003 *IEEE T Electron Dev.* **50** 1853
- [16] HSPICE Toolbox for MATLAB Perrott M <http://www-mtl.mit.edu/researchgroups/perrottgrouptools.html>
- [17] Fettoy 2.0 Rahman A, Wang J, Guo J <https://www.nanohub.org/resources/220> [2006-2]
- [18] Southampton CNT resources Zhou D F, Kazmierski T J, Hashimi B M A, Ashburn P <https://www.cnt.ecs.soton.ac.uk>

# A HSPICE model of carbon nanotube field effect transistor\*

Zhao Xiao-Hui<sup>1)†</sup> Cai Li<sup>1)</sup> Zhang Peng<sup>2)</sup>

1) (*The Sciences Institute, AFEU, Xian 710051, China*)

2) (*The Engineering Institute, AFEU, Xian 710038, China*)

(Received 8 January 2013; revised manuscript received 22 March 2013)

## Abstract

In order to apply carbon nanotube field effect transistor (CNTFET) to circuit simulation, maintaining an acceptable accuracy while minimizing computation time is a major problem. To establish a simple and high accuracy CNTFET model in HSPICE, based on the semi-classical model of CNTFET, the relationship between self-consistent electric potential and carrier density is analyzed, linear approximation is used for curve fitting, and explicit expression of self-consistent electric potential is deduced, so that the iterative solution of an integral equation is avoided. Then the CNTFET model in HSPICE is built. Simulation demonstrates that the proposed model can maintain high accuracy, and the logic functions can be realized in corresponding logic gates built with the proposed model, while the computation time is significantly reduced.

**Keywords:** carbon nanotube field effect transistors, semi-classical model, linear approximation fitting, HSPICE simulation

**PACS:** 05.60.Gg, 31.15.Gy, 72.10.Bg

**DOI:** 10.7498/aps.62.130506

---

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

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