

KHẢO SÁT ẢNH HƯỞNG CỦA KÍCH THƯỚC ỐNG NANO CARBON LÊN ĐẶC TRƯNG CỦA TRANSISTOR ỐNG NANO CARBON ĐỒNG TRỤC

THE EFFECT OF CARBON NANOTUBE SIZE ON THE CHARACTERISTICS OF COAXIAL CARBON NANOTUBE FIELD- EFFECT TRANSISTORS

ThS. Nguyễn Thị Lương
ĐH Sư Phạm Kỹ Thuật P.HCM

TÓM TẮT

Đặc trưng I-V của transistor trường ống nano carbon đồng trục (CNTFET) phụ thuộc vào nhiều thông số khác nhau như: kim loại dùng làm điện cực nguồn-máng, vật liệu và bề dày lớp oxit điện môi, kích thước ống nano carbon, nhiệt độ làm việc, ... Trong bài viết này tác giả dùng phương pháp hàm Green không cân bằng (NEGF) kết hợp với Matlab để mô phỏng và khảo sát những tác động của đường kính và chiều dài ống nano carbon lên họ đặc trưng I-V của CNTFET đồng trục.

ABSTRACT

The I-V characteristics of coaxial CNTFETs depend on many parameters such as: the metal of Source-Drain, the gate materials and the gate thickness, the size of carbon nanotube, the temperature, ... In this paper, we used the non-equilibrium Green's function (NEGF) method to simulate and present the effects of the diameter and length of the CNT on the I-V characteristics of coaxial CNTFETs.

1. MỞ ĐẦU

Transistor trường ống Nano Carbon (Carbon Nanotube Field-Effect Transistor, CNTFET) là ứng viên đầy hứa hẹn để thay thế MOSFET trong tương lai gần. Linh kiện ba chân này bao gồm một ống Nano bán dẫn nối hai tiếp xúc nguồn và máng hoạt động như kênh dẫn mang phần tử tải điện được đóng mở bằng tính điện nhờ tiếp xúc thứ ba là cực cổng. Hiện nay có nhiều nhóm nghiên cứu đang theo đuổi việc chế tạo những linh kiện như thế theo các kiểu khác nhau nhằm nâng cao các giới hạn về đặc tính của linh kiện và cũng gặp những khó khăn thường có như đối với bất kỳ một công nghệ non trẻ nào.

Năm 2005 Jing Guo và các cộng sự đã khảo sát ảnh hưởng của tán xạ phonon lên đặc trưng I-V của CNTFET dùng phương pháp Monte Carlo, kết quả mô phỏng cho thấy dòng chuyển dời đạn đạo cao hơn dòng chuyển dời có tán xạ khoảng 25%. Năm 2007 một nhóm nghiên cứu khác do Siyuranga O. Koswatta

chủ trì cũng đã khảo sát ảnh hưởng của tán xạ phonon lên họ đặc trưng I-V của CNTFET đồng trục sử dụng phương pháp NEGF, kết quả mô phỏng cho thấy dòng I_d bão hòa của chuyển dời đạn đạo cao hơn chuyển dời có tán xạ khoảng 14%. Các nghiên cứu trên đều mô phỏng đặc trưng I-V của CNTFET kênh dài mà chưa khảo sát các hiệu ứng tán xạ trên kênh ngắn dưới 20nm.

Bài viết này xây dựng mô hình CNTFET cấu trúc đồng trục sử dụng ống nano cacbon đơn tường bán dẫn làm kênh dẫn cho CNTFET thay cho kênh dẫn silic của MOSFET truyền thống và sử dụng các kim loại quý: Au, Pt, Pd làm điện cực nguồn và máng, lớp oxit cách điện là những chất điện môi có hằng số điện môi cao như: Al_2O_3 , HfO_2 , TiO_2 , ZrO_2 , $SrTiO_3$. Sử dụng phương pháp hàm Green không cân bằng (NEGF) kết hợp mô phỏng trên Matlab để mô hình hóa và mô phỏng họ đặc tính dòng thế của CNTFET có xét đến tác

động của nhiều yếu tố như: Vật liệu kim loại dùng làm điện cực nguồn – máng, chiều dài kênh dẫn và đường kính của CNT tương đơn. Bên cạnh đó, tác giả khảo sát tác động của tán xạ phonon khi chiều dài kênh dẫn giảm xuống dưới 20nm.

2. MÔ HÌNH VÀ MÔ PHỎNG CNTFET

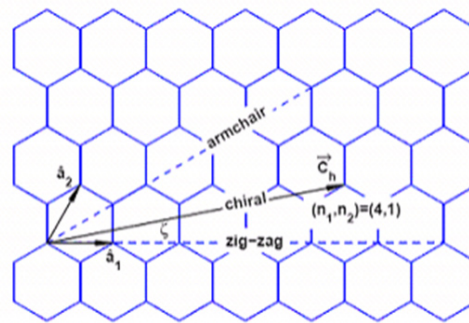
2.1. Tính chất của ống nano carbon

CNT có cấu tạo như một lá graphen cuộn tròn lại đường kính chỉ vào cỡ vài nanomet, dài đến vài micromet, gồm hai loại đơn tường và

đa tường. Mặt ngoài, cơ bản là các nguyên tử carbon liên kết với nhau rất chặt chẽ bằng liên kết đồng hoá trị. Mỗi nguyên tử carbon có ba mối liên kết nối với ba nguyên tử carbon khác, từ đó tạo ra các hình lục giác.

Ngoài ra, còn có liên kết π , trên và dưới mặt phẳng tạo thành một cấu trúc quỹ đạo lớn, xuyên suốt chiều dài dây phân tử. Nó cho phép các điện tử linh động di chuyển, cho nên dẫn điện được.

Về cấu trúc hình học, CNT được mô tả bởi vectơ Chi (Hình 1). Ta có:



Hình 1. Cấu trúc hình học của CNT. Các giá trị n_1, n_2 tương đương với số nguyên m, n ở công thức (1).

$$\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1)$$

với: \vec{a}_1, \vec{a}_2 là các vec tơ chỉ phương hướng. Khi $m = 0$, cấu trúc CNT là dạng Zigzag (bán dẫn. bán kính của CNT được tính bằng công thức:

$$R_t = |\vec{C}| / (2\pi) = a_{cc} \sqrt{3(n^2 + m^2 + mn)} / 2\pi \quad (2)$$

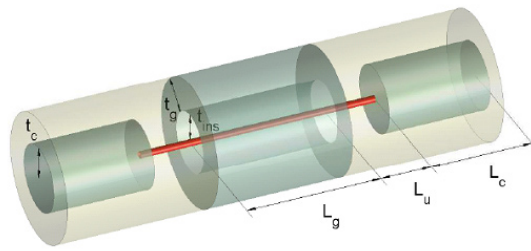
với $a_{cc} = 1.42 \cdot 10^{-10} m$ là khoảng cách của hai nguyên tử cacbon kề nhau. Hàm phân bố mật độ trạng thái (DOS) 1D trong CNT kim loại là hằng số và được tính:

$$D(E) = \frac{8}{3\pi a_{cc} |t|} = const \quad (3)$$

với $|t| = 3eV$ là năng lượng liên kết của các nguyên tử cacbon.

Năng lượng vùng cấm E_g được tính bằng:

$$E_g = \frac{a_{cc} |t|}{2R_t} = \frac{2a_{cc} |t|}{d} = \frac{0.8 eV}{d} \quad (4)$$



Hình 2. Mô hình CNTFET đồng trục kênh n [7]

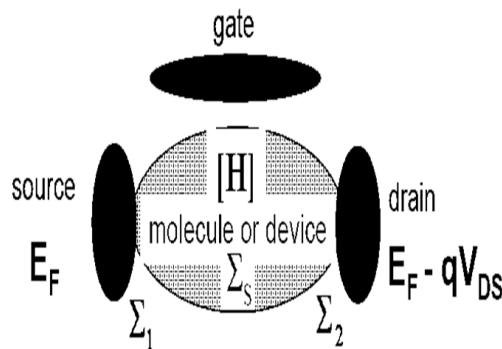
2.2. Mô hình CNTFET đồng trục

Mô hình CNTFET đồng trục được trình bày trên hình 2. Kim loại dùng làm điện cực nguồn-máng là: Au, Pd hoặc Pt. Cho chiều dài cổng oxit cách điện bằng với chiều dài kênh dẫn (ở đây là chiều dài CNT). Một lớp vật liệu như Al_2O_3 , ZrO_2 , HfO_2 ,

TiO_2 được phủ quanh CNT. Số liệu về CNTFET đã được công bố theo tài liệu.

Như vậy, điện dung cổng oxit của CNTFET sẽ được tính bằng:

$$C_g = \frac{2\pi k \epsilon_0 L}{\ln(2t_{ox}/r)} \quad (5)$$



Hình 3. Mô hình NEGF cho Transistor

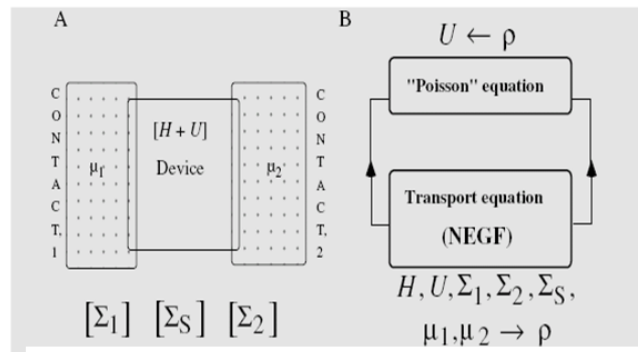
với L là độ dài của ống CNT, tương đương với độ dài cổng oxit, $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12}$ F/cm (hằng số điện môi trong chân không), k là hằng số điện môi tương đối của vật liệu cách điện. Bán kính ngoài của bản tụ sẽ bằng $(t_{ox} + r)$. Bán kính trong của bản tụ là bán kính r của CNT.

2.3. Thuật toán hàm Green không cân bằng

Có nhiều phương pháp để giải phương trình Schrodinger- Poisson. Một phương pháp mới, rất hữu hiệu bao hàm việc giải Schrodinger-

Poisson, với việc kết hợp tìm thế cho CNT. Sau đó, tìm mối liên quan đến xác suất truyền và tính được dòng qua nguồn-máng. Đó là thuật toán hàm Green không cân bằng NEGF (non-equilibrium Green function). Thuật toán này thường được áp dụng cho việc mô phỏng các linh kiện điện tử ở kích thước Nano.

Tuy nhiên, tùy linh kiện điện tử, chọn kênh dẫn khác nhau như: phân tử, CNT, khi mô phỏng sẽ có thay đổi về thông số. Vấn đề quan trọng là xây dựng toán tử Hamilton (H) cho phù hợp. Toán tử H suy ra từ phương trình Schrodinger, cho bài toán một chiều:



Hình 4. Mối quan hệ giữa các thông số và phương trình Poisson

Khi các tiếp xúc được kết nối, sẽ xuất hiện thế $U(r)$. Điều này, giúp tính các mức năng lượng tiếp xúc ở nguồn-máng (hình 4). $\Psi_\alpha(r)$ là hàm sóng tính từ phương trình Schrodinger. Ta có:

Hàm phân bố Fermi được xây dựng:

$$f_0(E - \mu) = (1 + \exp[(E - \mu) / k_B T])^{-1}$$

μ tương đương với mức năng lượng Fermi ở nguồn và máng là μ_1, μ_2

Có hai thuyết chuyển dời điện tử trong CNT: đạn đạo và tán xạ. Về ý nghĩa vật lí, điện tử chuyển dời đạn đạo nghĩa là di chuyển với đường đi vòng cung, ít va chạm với các nút mạng hay các điện tử khác, động năng của điện tử gần như được bảo toàn trong suốt quá trình di chuyển.

Hàm Green $G(E)$ trong thuyết đạn đạo được tính bằng:

$$[G(E)] = [(E + i0^+)I - H_L]^{-1} \quad (7)$$

Ở hai mức Fermi khác nhau:

$$G(E) = [(E + i0^+)I - H - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \quad (8)$$

Tán xạ về mặt vật lí, các điện tử tương tác với nhau, trao đổi cho nhau một năng lượng nào đó. Các điện tử chuyển dời không liên tục, chúng va chạm nhau tại các cực cổng, nguồn, máng (bao gồm va chạm đàn hồi và không đàn hồi). Hàm Green được mô tả cho tán xạ như sau:

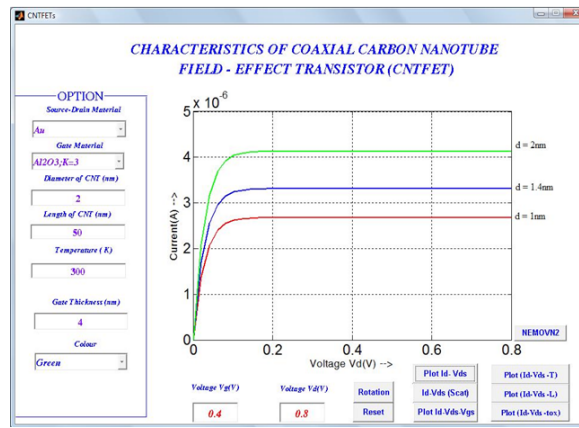
$$G(E) = [(E + i0^+)I - H - \Sigma_1 - \Sigma_2 - \Sigma_S]^{-1} \quad (9)$$

Trong đó Σ_s là ma trận tán xạ được mô tả như sau: $\Sigma_s(i \neq 1, j \neq 1) = 0$ và $\Sigma_s(1,1) = \alpha_{source} - \sqrt{\alpha_{source}^2 - t^2}$

Chúng tôi chọn thuyết chuyển dời đạn đạo để mô phỏng (độ dài CNT từ 20nm đến 300nm) nghĩa là cho $\Sigma_s = 0$ và chuyển dời có tính đến tán xạ khi chiều dài kênh dẫn dưới 20nm (Σ_s khác 0).

2.4. Mô phỏng đặc trưng dòng thế của CNTFET đồng trục

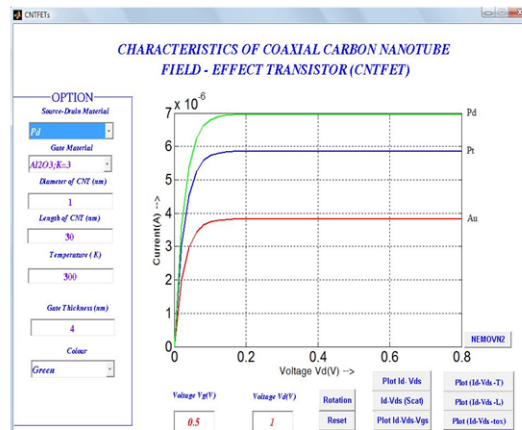
Bằng công cụ GUI của Matlab, kết hợp với thuật toán NEGF, chúng tôi đã mô phỏng đặc trưng I_d - V_d của CNTFET.



Hình 5. Khảo sát ảnh hưởng của đường kính ống

Hình 5 trình bày ảnh hưởng của đường kính ống nano carbon lên đặc trưng I_d-V_d của CNTFET đồng trực. Đường kính tăng thì E_{g} giảm nên điện tử di chuyển từ vùng hóa trị sang vùng dẫn sẽ nhiều hơn, mật độ dòng sẽ

lớn hơn. Kết quả mô phỏng cho thấy: dòng bão hòa ứng với $d=1\text{nm}$ là khoảng $2.7\mu\text{A}$, $d=1.4\text{nm}$ khoảng $3.3\mu\text{A}$ và $d=2\text{nm}$ là khoảng $4.1\mu\text{A}$. Kết quả mô phỏng này hoàn toàn phù hợp với các công trình đã công bố.

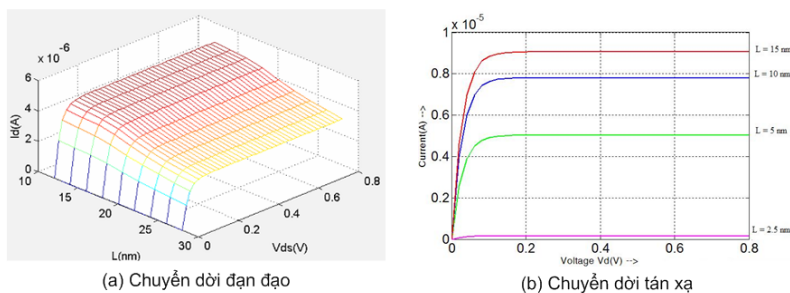


Hình 6. Khảo sát ảnh hưởng của kim loại điện cực

Hình 6 cho thấy dòng I_d bão hòa của kim loại Au là thấp nhất khoảng $3.8\mu\text{A}$, của Pt là khoảng $5.8\mu\text{A}$, và của Pd là khoảng $7\mu\text{A}$. So sánh 3 kết quả này, kết hợp với 3 loại vật liệu Au (1 0 0), Pt (1 0 0), Pd (1 0 0) tương ứng với 3 mức rào lần lượt là 0.42 eV , 0.29 eV và 0.15 eV tương ứng. Ta nhận thấy kết quả khá phù hợp.

Dòng I_d hoạt động của CNTFET ở mức vài micro Ampe (10^{-6} A). Thế chuyển của CNTFET là khoảng $0.18\text{ V} - 0.2\text{ V}$. Từ 0.2 V trở đi, CNTFET ở trạng thái dẫn ổn định và đạt đến trạng thái bão hòa.

Hình 7 trình bày sự phụ thuộc đặc trưng dòng thế vào độ dài kênh



Hình 7. Sự phụ thuộc của đặc trưng dòng thế vào độ dài kênh

Trong mô phỏng chuyển dời đạn đạo, khi chiều dài kênh dẫn tăng thì dòng điện bão hòa sẽ giảm vì trong quá trình di chuyển năng lượng của điện tử bị suy giảm, một số bị tái hợp không còn khả năng tải dòng do đó dòng điện cũng giảm dần.

Trong trường hợp mô phỏng có xét đến tán xạ phonon trong kênh dẫn, dòng điện bão hòa giảm rất mạnh khi chiều dài kênh dẫn giảm từ 15nm xuống 2.5nm. Đây là kết quả khá bất ngờ, khi kênh dẫn rút ngắn, điện trở kênh tăng cao và dòng bão hòa giảm mạnh. Khi thiết kế mô hình CNTFET cần phải tính đến chiều dài kênh dẫn sao cho đảm bảo được độ lớn dòng điện chạy qua linh kiện.

3. KẾT LUẬN

Với công cụ GUI của Matlab, kết hợp thuật toán mới là NEGF, tác giả đã mô phỏng đặc trưng I-V của linh kiện CNTFET đồng trục. Kết quả mô phỏng cho thấy dòng điện chạy qua kênh dẫn tăng khi tăng đường kính ống nano carbon. Khi xét trong giới hạn chuyển dời đạn đạo, khi tăng chiều dài kênh dẫn thì dòng điện I_d bão hòa sẽ giảm dần. Tuy nhiên, khi xét chuyển dời có tính đến tán xạ phonon với chiều dài kênh dẫn dưới 20nm thì dòng I_d bão hòa giảm rất nhanh khi ta giảm chiều dài kênh dẫn. Các đường đặc trưng I-V mô phỏng được cho phép khẳng định hoạt động của CNTFET hoàn toàn tương thích với quy luật của MOSFET truyền thống. Với kích thước nhỏ, khả năng đáp ứng dòng cao nên CNTFET có khả năng thay thế cho MOSFET trong công nghệ chế tạo vi mạch.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- A. Javey, H. Kim, M. Brink, Q. Wang, A. Ural, J. Guo, P. McIntyre, P. McEuen, M. Lundstrom, and H. J. Dai, "High-K Dielectrics for Advanced Carbon Nanotube Transistors and Logic Gates," *Nature Materials*, vol. 1 (2002).
- Đinh Sỹ Hiền, *Điện tử Nano: Linh kiện và công nghệ*, NXB ĐHQG Tp. Hồ Chí Minh, (2005)
- Jing Guo, "Carbon Nanotube: Modeling, Physics and Applications," PhD. Thesis, Purdue University, (2004).
- Jing Guo, Muhammad A. Alam, *Role of Phonon Scattering in Carbon Nanotube Field-Effect Transistors*, Physics Letters, vol 87, (2005).
- Leonardo de Camargo e Castro, "Modeling of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors," PhD. Thesis, The University of British Columbia (2006).
- Siyuranga O. Koswatta, "Nonequilibrium Green's Function Treatment of Phonon Scattering in Carbon Nanotube Transistors," *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol.54. No.9, September, (2007).
- Supriyo Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge, U.K: Cambridge Univ. Press (2005).
- T. Brintlinger, B.M. Kim, E. Cobas, and M. S. Fuhrer, *Gate-Field-Induced Schottky Barrier Lowering in a Nanotube Field-Effect Transistor*, University of Maryland, College Park, MD 20742-4111, USA (2005).