

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Estudo computacional sobre a
caracterização de contatos
para transistores balísticos de nanotubos

Glenda Coimbra Santos

Brasília, dezembro de 2018

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA**

**ESTUDO COMPUTACIONAL SOBRE A
CARACTERIZAÇÃO DE CONTATOS PARA
TRANSISTORES BALÍSTICOS DE NANOTUBOS**

GLENDA COIMBRA SANTOS

ORIENTADOR: PROF. DR. STEFAN MICHAEL BLAWID, ENE/UnB

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM ENGENHARIA DE
SISTEMAS ELETRÔNICOS E DE AUTOMAÇÃO**

PUBLICAÇÃO: PGEA.DM – 710/2018

BRASÍLIA/DF: 13 DE DEZEMBRO DE 2018

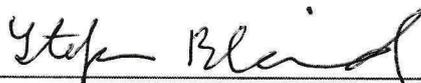
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA

ESTUDO COMPUTACIONAL SOBRE A CARACTERIZAÇÃO DE
CONTATOS PARA TRANSISTORES BALÍSTICOS DE NANOTUBOS

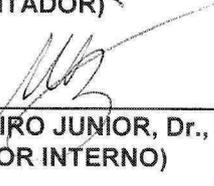
GLENDIA COIMBRA SANTOS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
ELÉTRICA DA FACULDADE DE TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA, COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE.

APROVADA POR:



STEFAN MICHAEL BLAWID, Dr., ENE/UNB
(ORIENTADOR)



LUIZ ANTONIO RIBEIRO JUNIOR, Dr., UNB
(EXAMINADOR INTERNO)



JANAÍNA GONÇALVES GUIMARÃES, Dra., UFSC
(EXAMINADORA EXTERNA)

Brasília, 13 de dezembro de 2018.

FICHA CATALOGRÁFICA

SANTOS, GLENDA COIMBRA

Estudo computacional sobre a caracterização de contatos para transistores balísticos de nanotubos [Distrito Federal] 2018.

x, 58p., 210 x 297 mm (ENE/FT/UnB, Mestre, Engenharia Elétrica, 2018).

Dissertação de Mestrado – Universidade de Brasília, Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Elétrica

1.CNTFET

2.Condução balística

3.Barreira de Schottky

4.Resistência de contato CNT-metal

I. ENE/FT/UnB

II. Título (série)

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

SANTOS, G. C. (2018). Estudo computacional sobre a caracterização de contatos para transistores balísticos de nanotubos. Dissertação de Mestrado em Engenharia Elétrica, Publicação PGEA.DM – 710/2018, Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 58p.

CESSÃO DE DIREITOS

AUTOR: Glenda Coimbra Santos.

TÍTULO: Estudo computacional sobre a caracterização de contatos para transistores balísticos de nanotubos.

GRAU: Mestre

ANO: 2018

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte dessa dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem autorização por escrito do autor.

Glenda Coimbra Santos

Campus Universitário Darcy Ribeiro, s/n – Asa Norte.

70.910-900 Brasília – DF – Brasil.

Dedicatória

Dedico esse trabalho aos professores. O mais sábio dos seres humanos só o é porque alguém o ensinou.

Glenda Coimbra Santos

Agradecimentos

Agradeço aos meu pais Ilmar e Francirene pelo apoio na minha construção e na minha caminhada. Ao meu irmão Mauro por ser sempre meu motivo de alegria. Ao meu orientador Stefan pela paciência, disponibilidade e por acreditar na minha força de vontade. Aos professores do PGEA por terem contribuído para a minha formação de mestre. Ao meu namorado Roberto pela paciência, compreensão e incentivo até nos momentos em que me acho perdida. À minha amiga Letícia, pela força e motivação. Aos colegas de curso, que me deram força para continuar e passar nas matérias. Vocês são fundamentais!

Glenda Coimbra Santos

RESUMO

A engenharia de contatos de nanotubos de carbono semicondutores requer a diminuição da barreira de potencial para a injeção de cargas pela escolha da função de trabalho do metal. Assim a extração precisa da barreira de potencial a partir das curvas de corrente-tensão dos transistores de efeito de campo de nanotubo (nanoFET) é uma técnica essencial de caracterização do transistor, especialmente para contatos que apresentam o efeito de *Fermi level Pinning*. A identificação da tensão de banda plana V_{FB} é uma maneira conhecida para determinar a altura de barreira de Schottky ϕ_{SB} . Baseados em simulações numéricas, resolvendo por método autoconsistente a equação de Poisson e a equação de Schrödinger de massa efetiva, mostramos os desafios de identificar corretamente V_{FB} para nanoFET balísticos, quando portadores de cargas atravessam um canal curto de transistor sem perda de energia e são injetados largamente por tunelamento. Apenas suprimindo a contribuição por tunelamento com nanoFETs assimétricos, V_{FB} pode ser determinada corretamente. Contudo, ruído e correntes ambipolares em baixas tensões de polarização podem ainda dificultar a aplicação do método de extração descrito em dispositivos experimentais. Como uma alternativa, sugerimos a parametrização da dependência entre a resistência de contato e a tensão da porta em baixas tensões de dreno, que surge do controle de corrente em nanoFETs balísticos. Além disso mostramos que essa dependência não é simples de ser calculada por causa de efeitos de interferência quântica. A interferência pode ser explorada para polarizar o nanoFET para diferentes frequências de corte.

ABSTRACT

The engineering of contacts to semiconducting carbon nanotubes still relies on minimizing the potential barrier for charge injection by carefully choosing the metal work function. Thus, precise barrier height extraction from current voltage curves of nanotube field-effect transistors (nanoFET) is an essential characterization technique, especially for contacts that present a pinned Fermi level. Identifying the flat band voltage V_{FB} is a known recipe to determine the Schottky barrier (SB) height. Based on numeric simulations solving the coupled nonlinear Poisson and the effective mass Schrödinger equation, we report on the challenges to correctly identify V_{FB} for ballistic nanoFETs, when charge carriers cross a short transistor channel without loss of energy and are injected largely via tunneling. Only by suppressing the tunnel contribution to the injection with asymmetrically gated nanoFETs, V_{FB} can be determined correctly. However, noise and ambipolar currents at low gate bias may still prevent the application of the described extraction procedure in experimental devices. As an alternative, we suggest to parametrize the dependence of the contact resistance on the gate voltage at low drain bias, which arises from the current control in ballistic SB nanoFETs. Moreover, we show that the dependence is not a simple one due to quantum

interference effects. The interference may be explored to bias the nanoFET for different cut-off frequencies.

SUMÁRIO

1	Introdução	1
1.1	Contextualização	1
1.2	Definição do problema	4
1.3	Objetivos do projeto	4
1.4	Apresentação do manuscrito	4
2	Revisão Bibliográfica	5
2.1	Transistor de nanotubo	5
2.1.1	Transistor balístico	7
2.2	Interface metal-semicondutor e Barreira de Schottky	8
2.3	<i>Fermi level pinning</i>	11
2.4	Vetor de onda e Relação de dispersão	13
2.5	Solucionador Schrödinger-Poisson	13
2.5.1	Equação de Schrödinger	14
2.5.2	Equação de Poisson	16
2.5.3	Condições de contorno	17
2.5.4	Solucionador	18
2.6	Método baseado na equação de Landauer-Büttiker 1D para a determinação da barreira de Schottky	18
2.7	Resistência de contato	21
2.7.1	Técnicas para controlar a resistência de contato	23
2.7.2	Dopagem	23
2.7.3	Porção do tubo inserida no contato metálico	25
2.8	Técnicas extração da resistência do contato	26
2.8.1	Resistência em série e curva I-V para diferentes comprimentos de canal	26
2.8.2	Método Y	27
3	Metodologia	29
3.0.1	Método para determinação da barreira de Schottky	29
3.0.2	Métodos para determinação da resistência do dispositivo	32
4	Resultados	35
4.1	Observações Gerais	35
4.2	NanoFET Simétrico	36

4.3	NanoFET Assimétrico.....	40
4.4	Resistência do nanoFET.....	42
4.4.1	Resistência vs barreira de Schottky.....	42
4.4.2	Relação entre resistência e comprimento do canal.....	43
4.4.3	Método Y.....	46
5	Conclusões.....	49
5.1	Trabalho Futuros.....	50
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	51
	Anexos.....	56
I	Diagramas Esquemáticos.....	57

LISTA DE FIGURAS

1.1	Tendência dupla definida pelo <i>International Technology Roadmap for Semiconductors</i> (ITRS): miniaturização das funções digitais e diversificação funcional. Adaptado de [1]	2
1.2	Pastilha com os transistores usados para construir "Cedric", o primeiro computador de nanotubos de carbono. Adaptado de [2]	3
2.1	Grafeno como matéria prima para materiais de carbono de outras dimensionalidades. Adaptado de [3]	6
2.2	Propriedades condutoras e semicondutoras do grafeno. Adaptado de [4]	7
2.3	Feixe de nanotubos de carbono (adaptado de [5]) e Nanotubo de carbono (adaptado de [6])	8
2.4	Arquiteturas de controle de porta. Adaptado de [7]	8
2.5	Estruturas simétrica e assimétrica de transistores TOP-GATE	9
2.6	Interface entre o metal e o CNTFET. Adaptado de [8] e Estrutura de bandas no contato metal-semicondutor [9]	10
2.7	Interação entre moléculas do metal e do CNT e possíveis interações que causam a mudança de estrutura de banda eletrônica. Adaptado de [10]	11
2.8	Junção metal-semicondutor. Adaptado de [11]	12
2.9	Efeito da dopagem no diagrama de bandas	12
2.10	Fermi Level Pinning e Estados de superfície. Adaptado de [11]	13
2.11	Funções de onda ao longo do dispositivo (Adaptado de [12]) e densidade de estados (Adaptado de [13])	15
2.12	Relações de dispersão mintmire e parabólica. Adaptado de [14]	16
2.13	Relação de dispersão parabólica independente da massa efetiva	16
2.14	Heterojunção (Adaptado de [14])	17
2.15	Iteração entre equações de Schrödinger e Poisson	18
2.16	Coefficiente de acoplamento $n_{q,g}$	20
2.17	Resistência de contato de CNTs para diversos tipos de metal. Adaptado de [15].....	21
2.18	Resistência na transmissão devido a barreira de potencial.....	23
2.19	Bandas de condução, funções de trabalho e níveis de Fermi para junções metal-semicondutor dopados tipo n e tipo p. Adaptado de [11]	24
2.20	Cargas na junção metal-semicondutor	25
2.21	Resistência de contato em função do comprimento (adaptado de [15])	26
2.22	Resistência do dispositivo versus o comprimento do canal L_{ch} . Adaptado de [16].....	27

2.23	Gráfico da função Y versus V_{GS}	28
3.1	Ambipolaridade. Adaptado de [17].....	30
3.2	Energias nos contatos de fonte e de dreno.....	31
3.3	Diagrama de Arrhenius e as inclinações para diferentes valores da tensão da porta ..	31
3.4	Desvio da linearidade de Φ_{SB} x V_{GS}	32
3.5	Variação da temperatura como meio da determinação do valor da barreira de Schottky	33
3.6	Diagrama de bandas do dispositivo para diferentes valores de V_{GS}	33
3.7	Efeito DIBL (Abaixamento da barreira induzida por dreno).....	34
3.8	Cálculo da resistência do dispositivo pela inclinação da parte linear V_{DS} x I_D	34
3.9	Modelo de resistência localizada do dispositivo	34
4.1	Vetores de onda ao longo do dispositivo	36
4.2	Espectro de corrente $V_{DS} = 0.2\text{ V}$ e (primeira linha) $V_{GS} = 0\text{ V}$, (segunda linha) 0.1 V e (terceira e quarta linhas) 0.4 V . As três primeiras linhas mostram o espectro de corrente em $T = 200\text{ K}$ e a última linha em $T = 500\text{ K}$. A linha pontilhada (a,e,i,m) serve como um guia indicando a diferença da função de Fermi da fonte e do dreno limitadas por E_{cc} e são adequadamente escalonadas. Note a mudança na escala da corrente para (m,n,o,p).....	37
4.3	Arquitetura do nanoFET simétrico	38
4.4	Característica de transferência para voltagens de dreno $V_{DS} = 0.2\text{ V}$, 0.4 V , 0.8 V e temperaturas $T = 200\text{ K} - 500\text{ K}$	39
4.5	Determinação da barreira de Schottky para dispositivos simétricos pelo gráfico ϕ_{SB} x V_{GS}	39
4.6	Diagrama de bandas para os quatro tipos de contatos a $T = 200\text{ K}$ e $V_{DS} = 0.2\text{ V}$...	40
4.7	Arquitetura do nanoFET assimétrico para diferentes tipos de assimetrias.	40
4.8	Extração da barreira de Schottky para dispositivos assimétricos	41
4.9	Diagrama de bandas do nanoFET assimétrico	41
4.10	Espectro de corrente para dispositivos assimétricos	42
4.11	Cuvas I_D x V_{DS} e determinação da resistência pela inclinação da parte linear do gráfico (linhas pontilhadas) para valores de $V_{GS} = 0.6\text{ V}, 0.8\text{ V}, 1\text{ V}$ e 1.2 V	43
4.12	Relação Resistência vs Barreira de Schottky para diversos valores de V_{GS}	43
4.13	Arquitetura do dispositivo simétrico com valores de comprimento do canal $L_{ch} = 50\text{ nm}/60\text{ nm}/70\text{ nm}$	44
4.14	Curvas $V_{DS} \times I_D$ para diferentes valores de comprimento do canal $L_{ch} = 50\text{ nm}/60\text{ nm}/70\text{ nm}$	45
4.15	Resistência do dispositivo x comprimento de canal em escala linear e em escala logaritmica	46
4.16	Corrente de dreno versus tensão da porta.....	46
4.17	Transcondutância g_m variando com V_{GS}	47
4.18	Função Y em função da tensão da porta V_{GS}	47
4.19	Resistência total do dispositivo balístico e resistência do contato.....	48

LISTA DE TABELAS

3.1	Características dos dispositivos simulados	30
4.1	Valores de ϕ_{SB} extraídos para cada um dos modelos de contatos	38
4.2	Valores extraídos da barreira de Schottky para dispositivo assimétrico	42
4.3	Resistência total para variados valores de ϕ_{SB}	44
4.4	Valores das resistências calculadas para cada comprimento de canal para diferentes valores de V_{GS}	45
4.5	Valor da resistência de contato pelo método Y para cada valor de V_{GS}	48

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A	Área	[m ²]
R	Resistência	[Ohm]
k	Vetor de onda	[kJ/kg]
J	Densidade de corrente	[A/m]
q	Carga elementar do elétron	[C]
E	Energia do elétron	[eV]
\hbar	Constante de Plank	[m ² kg/s]
E_F	Energia de Fermi	[eV]
k	Constante de Boltzmann	[m ² kg/s ² K]
T	Temperatura	[Kelvin]
DOS	Densidade de estados	[cm ⁻³ eV ⁻¹]
E_G	Energia de bandgap	[eV]
$E_{0,v}$	Energia da banda de valência	[eV]
$E_{0,c}$	Energia da banda de condução	[eV]
$V_{eff,v}$	borda de banda efetiva dependente da energia	[eV]
$m_{eff,ch}$	massa efetiva dependente da energia para a região do canal	□
$m_{eff,c}$	massa efetiva dependente da energia para a região dos contatos	□
I_{th}^{sub}	Corrente de subthreshold	[A]
ϵ_{ps}	permissividade relativa	□
κ	condutividade térmica	[W/m/K]

Símbolos Gregos

Φ_{SB}	Barreira de Schottky	[eV]
Φ_m	Função de trabalho do metal	[eV]
X	Afinidade do semiconductor	[eV]

Grupos Adimensionais

$\mathcal{T}(E)$	Probabilidade de transmissão
$n_{q,d}$	coeficiente de acoplamento do dreno
$n_{q,g}$	coeficiente de acoplamento da porta

Subscritos

c	Condução
cc	Controle de corrente
ch	Canal
s	Fonte
d	Dreno
FB	Banda plana

Siglas

ITRS	INTERNATIONAL TECHNOLOGY ROADMAP FOR SEMICONDUCTORS
------	---

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contextualização

Em 1965 foi apresentada a Lei de Moore, que fazia uma previsão sobre a evolução de circuitos eletrônicos integrados. Segundo esta lei o poder de processamento de um chip (número de transistores) dobraria a cada período de 18 meses pelo mesmo custo [1]. A Lei de Moore teve validade nos últimos 50 anos, porém a miniaturização dos transistores tem chegado ao seu limite pois o tamanho dos dispositivos se aproxima da ordem de magnitude do comprimento de onda do elétron. Atualmente a tecnologia CMOS (*Complementary Metal Oxide Semiconductor*) é a principal tecnologia utilizada para circuitos lógicos digitais como microprocessadores, microcontroladores e memórias e circuitos analógicos como sensores de imagens conversores de dados e transreceptores. A redução das dimensões dos transistores MOS para a escala nanométrica apresenta problemas de difícil solução, como maior corrente de fuga, maior densidade de potência, diferenças paramétricas e perda do controle da porta [18].

Assim a indústria precisa investigar o uso de novos materiais e arquiteturas alternativas para que os circuitos continuem aumentando o poder de processamento e sua versatilidade. Tecnologias heterogêneas como BiCMOS (bipolar-CMOS) combinam diferentes tecnologias utilizando as vantagens de cada uma para otimizar o funcionamento de um circuito. Essa técnica é utilizada na fabricação de amplificadores analógicos. A figura 1.1 ilustra a tendência do desenvolvimento das tecnologias nesse âmbito. Seguindo a linha "Mais Moore: miniaturização" vemos a tendência clássica de diminuição do tamanho dos dispositivos, já pela linha "Mais que Moore: diversificação" vemos a linha de pesquisa que procura novas funcionalidades e a integração em um mesmo chip a integração dessas características.

Várias arquiteturas tais como FinFET [19], TFET [20] e JLITFET [21] foram propostas como alternativas de arquitetura para proporcionar melhor controle do canal, dado que o escalamento tendendo a dimensões nanométricas impossibilita certos tipos de operação já feitos nos dispositivos clássicos. A diminuição da espessura do óxido da porta como isolante prejudica a sua funcionalidade como capacitância.

Nanotubos de carbono (CNTs) é um dos nanomateriais mais extensivamente estudados para

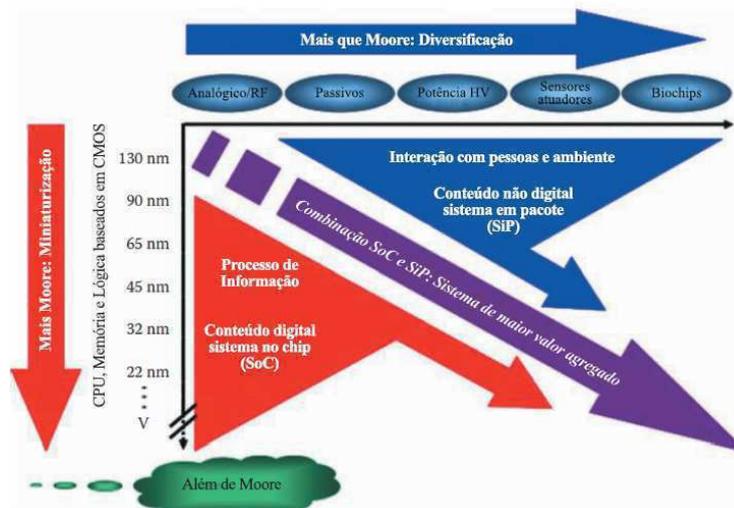


Figura 1.1: Tendência dupla definida pelo *International Technology Roadmap for Semiconductors* (ITRS): miniaturização das funções digitais e diversificação funcional. Adaptado de [1]

aplicações eletrônicas. Das alternativas de novos materiais nenhuma delas é capaz de competir com CNTFETs (*Carbon nanotube field effect transistor*) por diversas razões. São materiais quasi-unidimensionais e têm propriedades elétricas únicas e ideais para aplicações em dispositivos eletrônicos [22–25], apresentam (i) maior mobilidade e capacidade de corrente, (ii) baixa distorção por causa da relação linear entre corrente de dreno e tensão de entrada (tensão na porta), (iii) alta estabilidade térmica e (iv) transporte balístico.

Os MOSFETs (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) baseados em nanotubos de carbono mostraram prover melhor escalabilidade em comparação com os MOSFETs de silício e performance sem efeitos de canal curto e alta mobilidade de portadores. Corpo ultrafino, eficiência no transporte de portadores e energias de gap razoáveis oferecem melhores soluções quando comparados a outros semicondutores na mesma ordem de magnitude (sub-10nm) [26].

Transistores de efeito de campo (FETs) construídos com CNTs atingiram frequência de corte de ganho de corrente extrínseca de aproximadamente 10 GHz [27], gerando interesse na sua aplicação em circuitos de radiofrequência RF. CNTFETs apresentam ganho de potência e frequência de corte em baixa dissipação de potência, ideais para aplicação de RF em circuitos analógicos. A realização de sistemas baseados em CNTs usados em combinação com outros sistemas/subsistemas (modo tensão e modo corrente) foi conseguida recentemente [28].

Os CNTs também são investigados extensivamente para aplicações digitais. Um modelo DC simples para CNTFETs já foi proposto para análises estáticas de circuitos digitais básicos em [29] e um computador baseado em nanotubos de carbono, construído (veja figura 1.2) e demonstrado [30].

A necessidade de tecnologias alternativas com materiais biodegradáveis também tem feito o uso dos CNTs mais interessantes, como em painéis fotovoltaicos, que atualmente, convertem apenas 16% da energia solar. Pesquisadores do *Energy Department's National Renewable Energy Laboratory* (NREL) descobriram que o nanotubo de carbono de parede única (SWCNT) semicondutores podem ser favoráveis para sistemas fotovoltaicos convertendo energia solar em energia

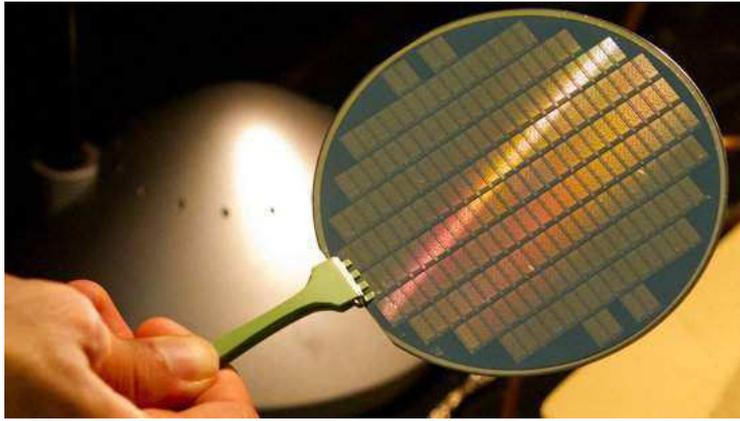


Figura 1.2: Pastilha com os transistores usados para construir "Cedric", o primeiro computador de nanotubos de carbono. Adaptado de [2]

elétrica de maneira eficiente [31]. Para muitos pesquisadores a exigência de um semiconductor ideal foi atingida quando CNTs mostraram propriedades promissoras no desempenho desses novos dispositivos.

Apesar das expectativas quanto ao seu desempenho, que chega a ser da ordem de TeraHertz [32] quando se trata de frequências de operação, ainda há empecilhos quanto aos processos de fabricação, equipamentos e modelagem. Existem dificuldades em purificar e controlar a posição desses cilindros moleculares que têm o diâmetro de aproximadamente 1 nanômetro. Para aplicações lógicas de alta performance, o que requer bilhões de transistores integrados em um chip, a concentração de impurezas de CNTs metálicos não pode ser superior a 0.0001% [29]. Processos para a purificação dos CNTs estão sendo pesquisados e desenvolvidos.

Modelos compactos para CNTFETs precisam ser elaborados para o uso em projetos de circuitos. Esses novos modelos devem incluir o transporte em uma dimensão (1D) e determinadas configurações do dispositivo também precisam ser adaptadas para o transporte em 1D nos CNTs.

Sobre questões de modelagem, a pesquisa por CNTFETs propôs vários modelos na literatura, que são numéricos e fazem uso da auto-consistência e assim sua implementação em simuladores de circuitos (SPICE, Verilog-A or VHDL-AMS) não é possível, e essa modelagem é necessária para o campo de design de automação eletrônica (EDA).

O parâmetro de fundamental importância para o desenvolvimento da tecnologia baseada em CNT é a resistência de contato metal-semicondutor. Na ausência de dopagem [33–35], a resistência de contato permanece grande. Um estudo recente ab initio em contatos metálicos para CNTs elucidou a dependência do metal e da geometria para a resistência de contato R_c [15].

A questão surge, se a correta extração da barreira de Schottky a partir das curvas de corrente-tensão será afetada pelas peculiaridades dos CNTFETs e do que são (i) a grande variedade de estruturas eletrônicas da porção do tubo que injeta portadores (ii) aumento do tunelamento e (iii) transporte balístico ao longo do canal.

Neste trabalho serão investigadas a barreira de Schottky e a resistência de um CNTFET. As

simulações de transistores de nanofios 1D mostra resultados bastante similares já que a física e o transporte em 1D se aplica aos dois casos. O presente texto apresenta um estudo computacional baseado na solução da equação de Schrödinger de massa efetiva para a determinação do parâmetro barreira de Schottky.

1.2 Definição do problema

Nesse trabalho avaliamos as técnicas para extração tanto da barreira de Schottky quanto da resistência de contato para transistores balísticos de nanotubos de carbono.

1.3 Objetivos do projeto

- Simular as características elétricas do transistor balístico de nanotubo de carbono
- Investigar diferentes modelos de contatos
- Extrair o valor da barreira de Schottky
- Otimizar a arquitetura para facilitar a extração da barreira
- Investigar alternativas para caracterizar a qualidade de um contato
- Investigar técnicas para a extração da resistência de contato

1.4 Apresentação do manuscrito

No capítulo 2 apresenta-se a revisão teórica necessária à correta interpretação deste trabalho. São introduzidos os parâmetros importantes para a caracterização dos contatos assim como as equações do solucionador numérico.

O capítulo 3 descreve a metodologia empregada para a extração da barreira de Schottky, da resistência de contato, e a caracterização de cada tipo de contato investigado.

No capítulo 4 são apresentados e discutidos os resultados das investigações feitas para os nanoFETs balísticos e cada método de análise.

O capítulo 5 refere-se as considerações finais do trabalho, além de algumas recomendações e propostas para trabalhos futuros.

Por fim, no anexo, está contido um exemplo do código de entrada usado no simulador COOS.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Transistor de nanotubo

A miniaturização dos dispositivos e circuitos digitais tem sido a força motriz para o desenvolvimento tecnológico. O avanço por muitos anos seguiu a lei de Moore [36].

O transistor de efeito de campo de nanotubos de carbono (CNTFET) é um transistor que tem como canal um único nanotubo de carbono ou um feixe deles ao invés de silício como na estrutura tradicional do MOSFET. As propriedades elétricas excepcionais dos nanotubos de carbono surgem das estruturas eletrônicas do grafeno que se enrolam e formam uma estrutura cilíndrica ôca [37]. O processo simples de manufatura o torna uma boa alternativa para o MOSFET. Em escala nanométrica o processo de automontagem facilita muito a construção do dispositivo.

Apesar de CNTs terem propriedades únicas e atrativas a produção em massa desse dispositivo ainda necessita de refinamento. O processo de purificação desse material é de fundamental importância dado que a quiralidade (orientação de enrolamento da folha de grafeno) determina se o CNT terá propriedades metálicas ou semicondutoras [38].

O grafeno é um material de construção 2D para materiais de carbono de todas as outras dimensionalidades, como mostrado na figura 2.1. O grafeno também apresenta propriedades e estudos semelhantes aos do CNT. Foi verificado que a característica de semicondutor da folha de grafeno é modificada de acordo com a tensão de esticamento da folha [4], figura 2.2.

Na figura 2.3 (a) mostra-se um feixe de nanotubos de carbono obtido por microscopia eletrônica de varredura e em (b) a estrutura de uma folha de grafeno enrolada como SWNT(nanotubo de parede única). Em [39] mostra-se que a largura da banda proibida depende do diâmetro do tubo.

As características corrente-tensão (I-V) do CNTFET são similares às do MOSFET. A tensão de limiar V_{th} é definida como a tensão mínima necessária para que o transistor comece a conduzir corrente. A tensão de limiar do CNT intrínseco pode ser aproximada em primeira ordem como uma função inversa do diâmetro do nanotubo [40].

Dispositivos baseados em nanotubos de carbono têm sido bastante estudados atualmente por

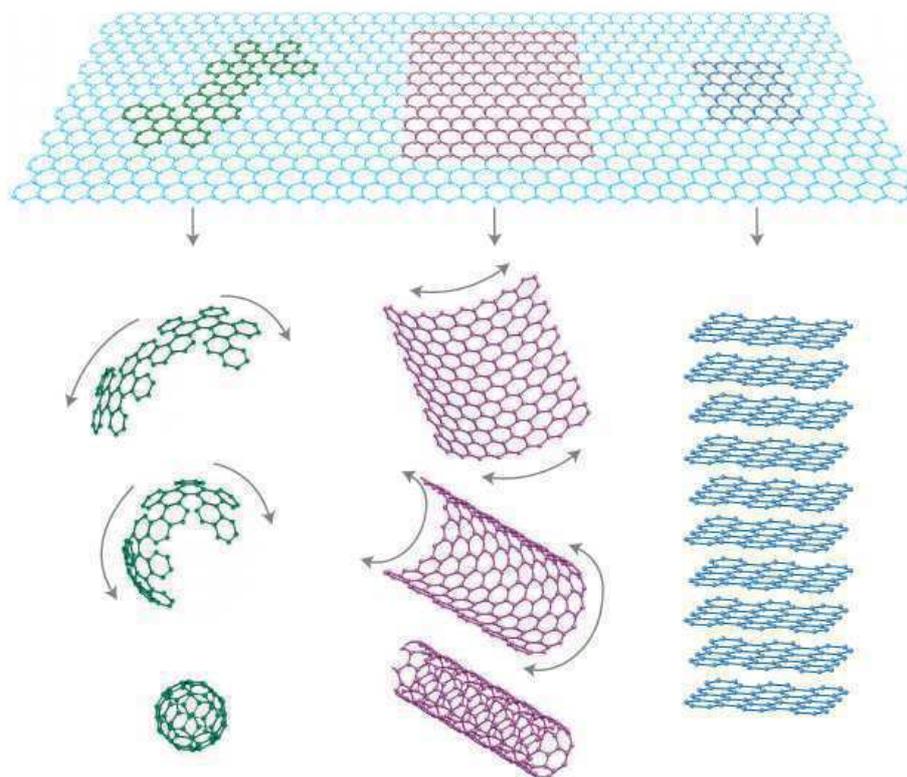


Figura 2.1: Grafeno como matéria prima para materiais de carbono de outras dimensionalidades. Adaptado de [3]

causa de sua alta mobilidade no canal e da sua característica tensão versus capacitância [41].

Nanofios, nanotubos ou nanofibras automontados em substratos isolantes provêem canais de transistores ultrafinos, que prometem excelente controle pelo campo da porta da densidade de portadores no canal. Como visto na figura 2.4 as arquiteturas de FinFET têm portas que envolvem o canal, provendo melhor controle da densidade de portadores e do potencial eletrostático no canal do que arquiteturas com a porta posicionada apenas acima do canal (arquiteturas planares). Em regime nanométrico a capacitância quântica tem papel fundamental na determinação da capacitância do CNTFET.

A fabricação do nanoFET é feita por métodos a altas temperaturas, como o de ablação por laser e o de deposição química por vapor (CVD). Nesses processos de fabricação existem determinados problemas ainda difíceis de serem solucionados como o posicionamento do cilindro nos contatos e o controle da quiralidade (purificação) durante o crescimento do CNT, por exemplo. Atualmente os processos de fabricação são capazes de produzir nanotubos com até 0.0001% de impurezas [42].

As arquiteturas dos transistores de efeito de campo de nanotubo (nanoFET) investigado são mostradas na Figura 2.5.

A transmissão em canais unidimensionais (1D) ainda precisa de muita investigação até se conseguir equações que modelem o funcionamento desses materiais em dispositivos e em circuitos integrados devido aos fenômenos quânticos. A investigação em 1D pode se dar tanto para nanofios

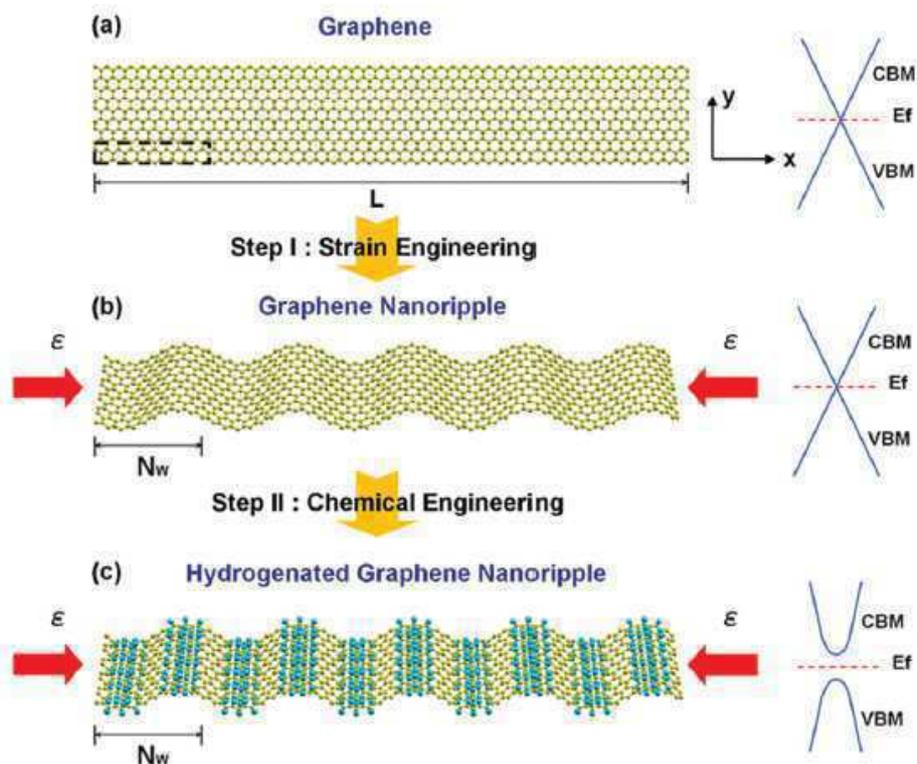


Figura 2.2: Propriedades condutoras e semicondutoras do grafeno. Adaptado de [4]

que possuem corpo para a condução dos portadores quanto para nanotubos que possuem uma estrutura ôca e a transmissão se dá apenas na superfície. Nos dois casos a dopagem do material continua sendo um problema por causa da baixa dimensionalidade [33–35].

2.1.1 Transistor balístico

O CNTFET é similar ao transistor convencional, tendo o CNT como canal. A estrutura unidimensional que comporta o elétron no nanodispositivo não tem um corpo nem muitos átomos para interagir com o elétron. Desse modo a transmissão do elétron se dá pela superfície do canal, sem efeitos de espalhamento e sem dissipação de energia que é o que caracteriza a transmissão balística.

Essa baixa interação do elétron com o meio faz com que este tenha alta mobilidade e não diminua a sua velocidade resultando em uma maior intensidade de corrente elétrica. O fato de o dispositivo operar com uma pequena quantidade de elétrons permite que este funcione operando em frequências maiores [43] dado que a frequência de operação depende da velocidade dos portadores e o tempo de reorganização ao longo do dispositivo.

O espalhamento dos portadores é bastante reduzido em nanoestruturas quasi-unidimensionais tornando o transistor balístico mesmo para comprimentos de canal moderados de algumas centenas de nanômetros. A redução do canal do transistor MOS está relacionada com o aumento do campo elétrico, principalmente junto ao dreno [44]. Este elevado campo elétrico (MV/cm) induz elétrons

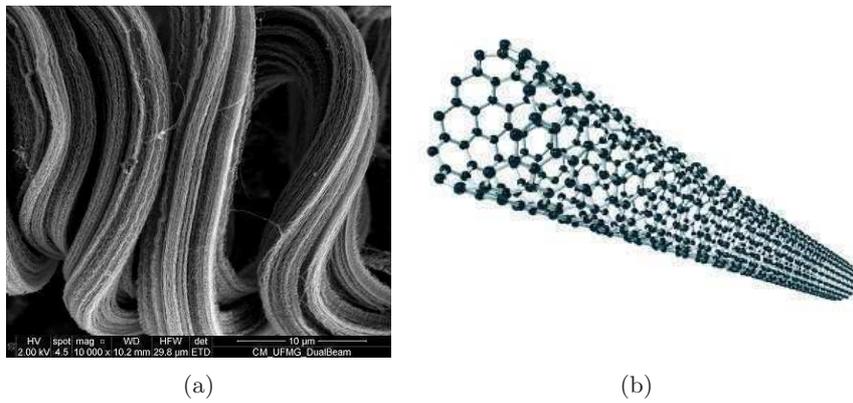


Figura 2.3: Feixe de nanotubos de carbono (adaptado de [5]) e Nanotubo de carbono (adaptado de [6])

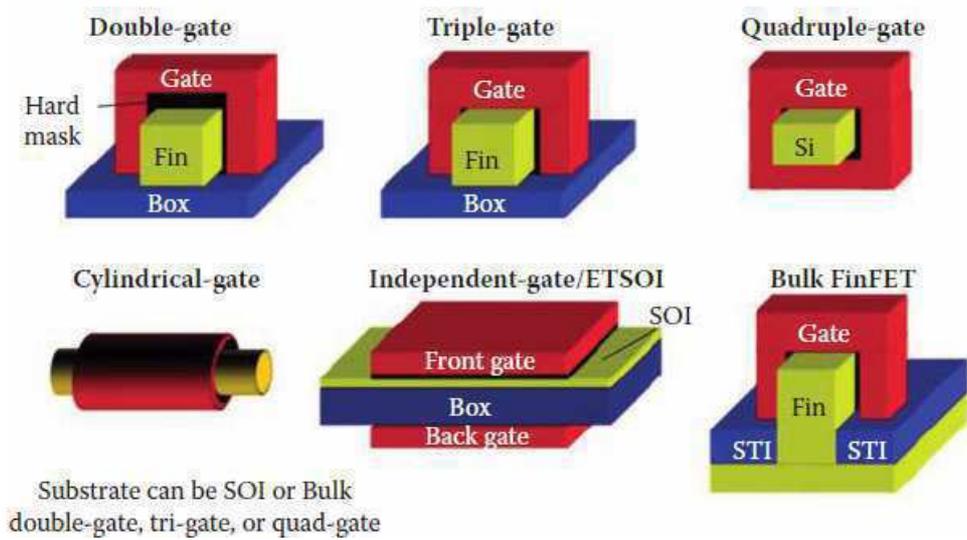


Figura 2.4: Arquiteturas de controle de porta. Adaptado de [7]

energéticos (*hot electrons*) a ionizarem, por impacto, portadores na região de canal.

A transmissão balística oferece soluções atraentes para o funcionamento dos nanoFETs, porém alguns desafios ainda precisam ser superados como a determinação da dissipação da energia dos portadores apenas na região da interface já que isso não se dá ao longo do canal.

2.2 Interface metal-semicondutor e Barreira de Schottky

Na engenharia de contatos a conexão de dois diferentes materiais precisa ser bastante investigada. O contato pode ser do tipo ôhmico e oferecer baixa resistência e comportamento linear, como pode ser também do tipo Schottky apresentando comportamento retificador. Esse segundo tipo de contato é o mesmo do diodo Schottky, que conduz em polarização direta e bloqueia a transmissão de portadores com polarização reversa.

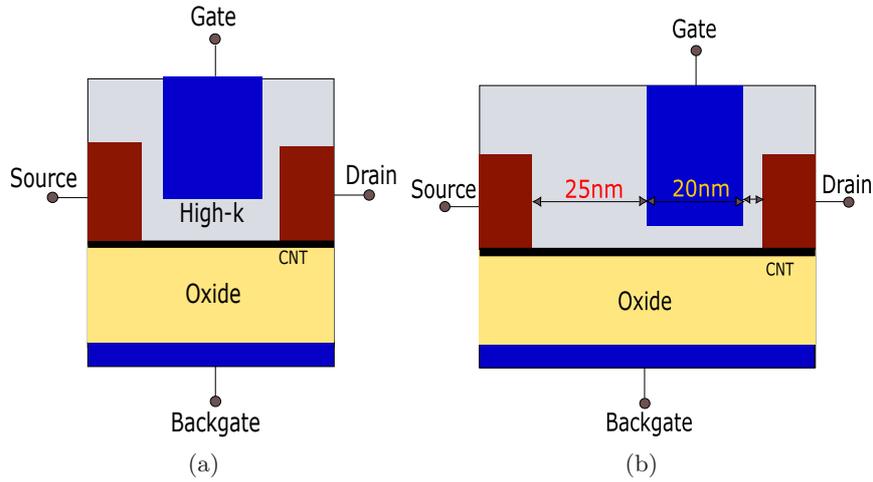


Figura 2.5: Estruturas simétrica e assimétrica de transistores TOP-GATE

A barreira de Schottky Φ_{SB} é um parâmetro usado para especificar a qualidade de uma interface metal semicondutor, especialmente para combinações de materiais que são fracamente afetadas pela fixação do nível de Fermi (*Fermi Level Pinning*), como interfaces CNT-metal e metal-InP/InGaAs.

O valor da barreira de Schottky é decisivo para o desenvolvimento das tecnologias baseadas em novos materiais já que esse parâmetro tem relação direta com o valor da resistência de contato na conexão entre os dois materiais.

Existem três tipos de contato do CNT com o metal: *end-bonded*, *side-bonded* e *embedded-contact*. O modelo de contato metal-CNT *embedded-contact* é mostrado em Fig.2.6(a) e investigado neste trabalho. Devido à fisi- ou quimisorção a porção do CNT envolta pelo metal pode ter as bordas de banda deslocadas (imprevisivelmente dopada) como mostrado na figura 2.6(b).

Quanto aos tipos de interações entre os dois materiais metal-semicondutor (mostrados em Fig. 2.7) deslocarem as bordas dos diagramas de banda temos as possibilidades de (a)transferência de carga através da interface (nivelamento dos níveis de Fermi do metal e do semicondutor), (b)cargas espelhadas, (c)rearranjo da nuvem de elétrons na superfície do metal, (d)forte interação química entre as moléculas levando a um rearranjo da nuvem eletrônica e das geometrias moleculares e (e)existência de estados de interface.

O deslocamento das bordas de banda merece um estudo mais aprofundado. Porém nesse estudo o valor da barreira de Schottky é o principal parâmetro de estudo. A origem da barreira de Schottky se dá pelo alinhamento dos dois níveis de Fermi do metal e do semicondutor $E_{F,metal} = E_{F,semicondutor}$ na interface e a consequente dobra das bandas de condução e de valência como visto na figura 2.8.

Em um experimento ideal, se a junção metal-semicondutor é colocada no vácuo, a energia para retirar um elétron deve ser a mesma para qualquer ponto do dispositivo. Assim é criado esse modelo para a relação entre os parâmetros barreira de Schottky ϕ_{SB} , função de trabalho do metal ϕ_m , função de trabalho do semicondutor ϕ_s e afinidade do semicondutor χ (energia necessária para

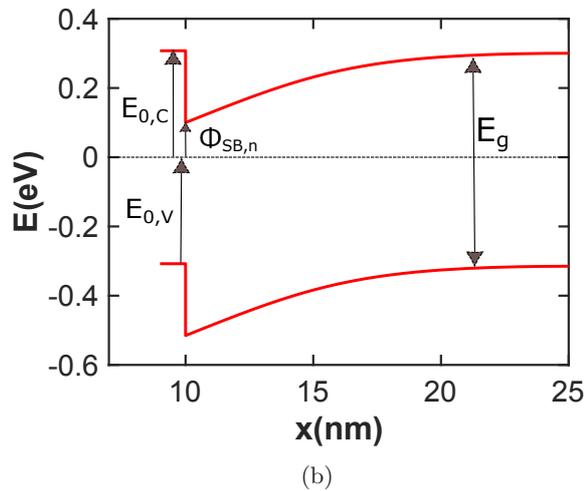
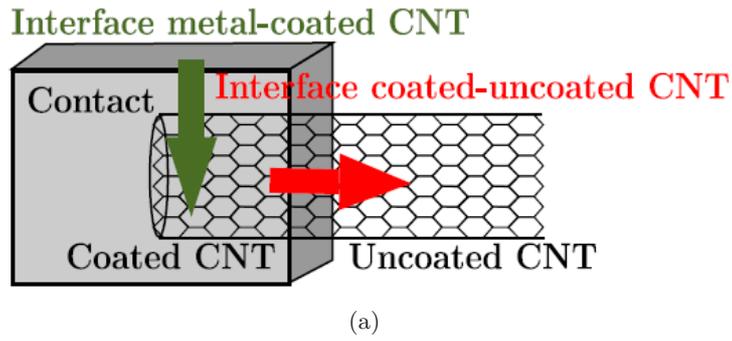


Figura 2.6: Interface entre o metal e o CNTFET. Adaptado de [8] e Estrutura de bandas no contato metal-semicondutor [9]

retirar o elétron do nível na banda de condução e mandar para o vácuo). E a diferença da função de trabalho do metal e do semicondutor dá origem à relação $q(\phi_m - \phi_s) = qV_0$.

Na figura 2.8 vemos o alinhamento por cima da função de trabalho do metal com a afinidade do semicondutor.

$$\Phi_{SB} = \Phi_m - \chi \quad (2.1)$$

O contato de uma superfície de metal com um semicondutor dopado requer o alinhamento do nível de Fermi dos dois materiais e induz o deslocamento de cargas do metal para o semicondutor e consequentemente o aparecimento de um campo elétrico no contato. Esse campo elétrico é uma barreira de potencial eletrostático que o elétron precisa vencer para conduzir. No gráfico essa barreira é representada por W , uma região de depleção de portadores.

O contato ideal metal-semicondutor é ôhmico quando a carga induzida no semicondutor alinhando os níveis de Fermi é provido por portadores majoritários. Um método prático para formar este tipo de contato é dopando pesadamente o semicondutor na região da interface. Assim se uma barreira existe, ela será fina o suficiente para que os portadores possam tunelar, como representado na Fig. 2.9 (veja sessão 2.7.2).

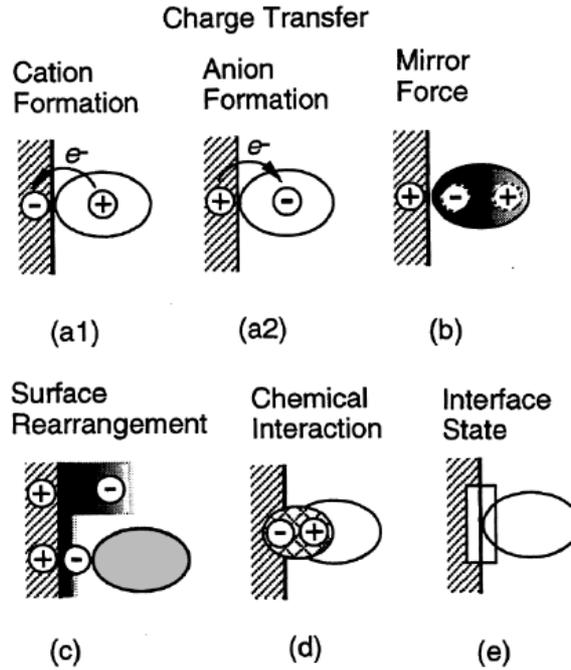


Figura 2.7: Interação entre moléculas do metal e do CNT e possíveis interações que causam a mudança de estrutura de banda eletrônica. Adaptado de [10]

2.3 *Fermi level pinning*

Pela regra de Schottky-Mott a altura da barreira de Schottky proporcional à diferença entre o valor da função de trabalho do metal e o valor da eletroafinidade do semiconductor como mostrado na equação 2.1.

Escolher a função de trabalho para ter o controle da altura da barreira de Schottky não funciona para materiais que não têm o nível de Fermi definido com o acoplamento do metal. No acoplamento entre um metal e um semiconductor [45–47], o nível de Fermi do metal fica fixado em uma posição da banda proibida do semiconductor.

No contato do silício com qualquer outro metal o nível de Fermi da junção é bem determinado, E_F fica fixado e $\phi_{SB} = 2E_{gap}/3$ para dopagem do tipo n e $\phi_{SB} = E_G/3$ para dopagem do tipo p.

Essa determinação da posição do nível de Fermi do semiconductor quando em contato com um metal é diferente para materiais orgânicos, inclusive CNTs.

O efeito de *Fermi level Pinning* é visto em diversos semicondutores, como Silício, Germânio e Arsenieto de Gálio (Si, Ge, GaAs) [48]. A altura da barreira de Schottky acaba sendo determinada por esse "pinning" e não pela função de trabalho do metal como visto na equação 2.1. Então no caso desses novos materiais é tão importante a determinação da barreira de Schottky por uma metodologia alternativa.

Foi notado em 1947 por John Bardeen [49] que o fenômeno *Fermi level pinning* ocorreria naturalmente se houvessem estados carregáveis na interface com energias dentro da banda proibida.

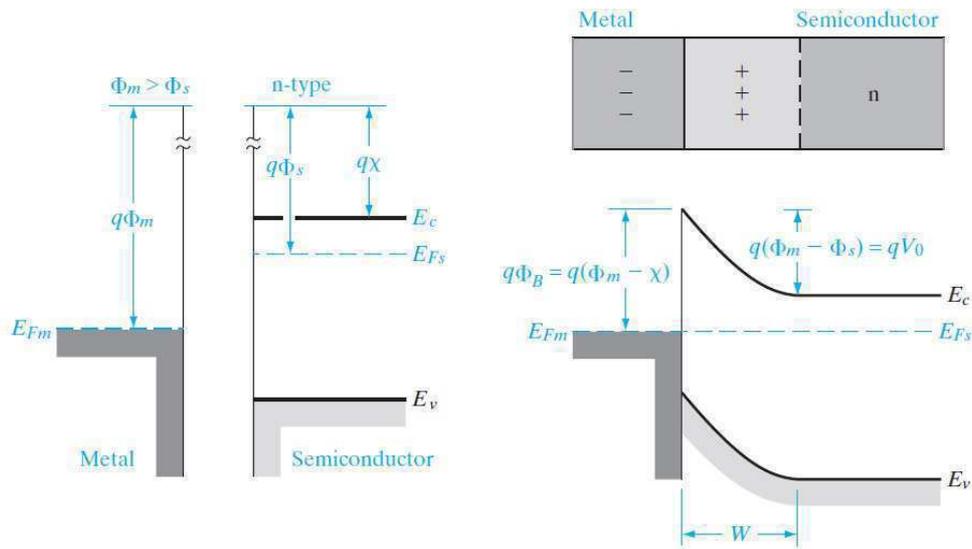


Figura 2.8: Junção metal-semicondutor. Adaptado de [11]

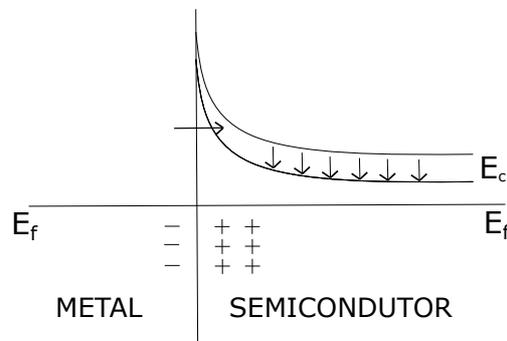


Figura 2.9: Efeito da dopagem no diagrama de bandas

Estes estados seriam induzidos da ligação química do metal e do semicondutor (estados de *gap* induzidos por metal) ou já estariam presentes no semicondutor (estados de superfície). Como uma consequência as bandas do semicondutor necessariamente se alinhariam com um dos estados de superfície que já estaria afixado ao nível de Fermi do metal.

Por exemplo, quase todos os metais formam uma grande barreira de potencial quando conectado ao Germânio tipo-n e formam um contato ôhmico quando conectado com Germânio tipo-p já que a borda da banda de valência é fortemente ligada ao nível de Fermi do metal.

Em Fig.2.10 mostra-se o efeito de *Fermi level Pinning* causado por estados na banda proibida do semicondutor induzidos no metal. As bandas no semicondutor já começam dobradas por causa desses estados de superfície. Elas se dobram novamente após o contato para igualar os níveis de Fermi. Contudo a quantidade de dobramento muda completamente de acordo com a ligação.

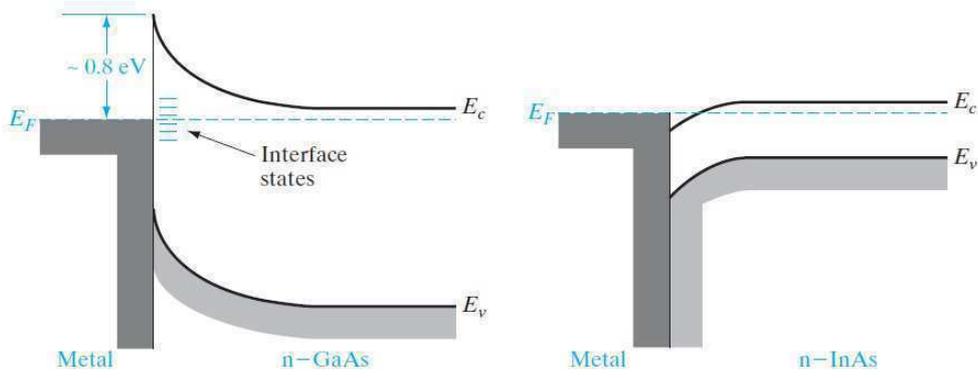


Figura 2.10: Fermi Level Pinning e Estados de superfície. Adaptado de [11]

2.4 Vetor de onda e Relação de dispersão

Para caracterizar uma onda, dois parâmetros são necessários: a frequência ω e o comprimento de onda λ .

A amplitude da onda corresponde ao número de fônons quando visto pelo aspecto de partícula. A frequência e o comprimento de onda estão relacionados pela velocidade de fase v_{phase} :

$$v = \frac{v_{phase}}{\lambda} \quad (2.2)$$

A velocidade de fase depende das propriedades do meio em que a onda se propaga [50]. Para valores altos de frequências, diferentes frequências da onda resultam em diferentes velocidades de propagação e o pacote de onda "dispersa" (similarmente a um prisma dispersando um feixe de luz policromático). Por causa dessa dependência a equação 2.2 é chamada relação de dispersão. Para uma completa descrição da onda, tanto a direção de propagação da onda quanto o comprimento de onda recíproco são combinados no vetor de onda k :

$$|k| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.3)$$

2.5 Solucionador Schrödinger-Poisson

Uma modelagem acurada para o CNTFET requer uma solução auto-consistente da densidade de portadores e do potencial eletrostático. O solucionador utilizado foi o COOS (simulador baseado nas funções de onda), desenvolvido pela cadeira para dispositivos eletrônicos e circuitos integrados, TU Dresden, Alemanha. Existe uma colaboração entre o grupo de pesquisa de TU Dresden e o laboratório de dispositivos e circuitos integrados da UnB (LDCI). Nessa colaboração pesquisadores de ambos os grupos de pesquisa melhoram o código do COOS e adicionam novas funcionalidades.

O simulador COOS modela o funcionamento dos transistores balísticos de nanotubo resolvendo a equação de Schrödinger de massa efetiva. Outros modelos de transporte também podem ser implementados no simulador, sejam eles: Difusão e deriva, Equação de transporte Boltzmann

com método Monte Carlo (MC-BTE) e Equação de transporte Boltzmann balístico determinístico (BALL-BTE). Detalhes do solucionador de equação de Schrödinger de massa efetiva são dados por Claus *et al.* [14].

2.5.1 Equação de Schrödinger

A partir do potencial eletrostático a equação de Schrödinger calcula as funções de onda dos elétrons do sistema. Determinando os níveis de energia permitidos de um sistema mecânico quântico, os autovalores da função de onda associada, indicam a probabilidade de encontrar uma partícula em uma determinada posição, veja figura 2.11. O cálculo das funções de onda dos elétrons fornece a densidade de portadores ao longo do canal.

A equação de Schrödinger de massa efetiva independente do tempo é dada por (2.4).

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m_{\text{eff}}^*(E, x)} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = (E - qV_{\text{eff}}) \phi \quad (2.4)$$

Onde ϕ é a função de onda do elétron no canal. V_{eff} é a borda de banda efetiva e m_{eff}^* , a massa efetiva do portador ($V_{\text{eff}} = E_{c/v} - q\psi$). A dependência entre m_{eff}^* e a energia (E) é causada pela diferença entre a relação de dispersão do CNT e uma parábola.

A massa efetiva dos portadores de carga, elétrons ou lacunas, é uma função do diâmetro do CNT, e para a primeira subbanda de condução ou de valência, é dada por:

$$m_{\text{cnt}} = \frac{4}{9} \frac{\hbar^2}{a_{\text{cc}} t_{\text{cc}}} \frac{1}{d_{\text{cnt}}} \quad (2.5)$$

Nesse trabalho a distância entre dois átomos de carbono no CNT é assumida $a_{\text{cc}} = 0.142$ nm e a energia *tight-binding* entre os átomos de carbono $t_{\text{cc}} = 3$ eV [17]. Para um diâmetro de CNT de 1.3 nm a massa efetiva dos portadores relativamente a massa de um elétron livre é igual a $m_{\text{cnt}}/m_0 = 0.06$.

O domínio de simulação para o qual a equação de Schrödinger foi resolvida envolve as regiões de canal e de contato. Assim $m_{\text{eff}} = m_{\text{cnt}}$ para a região do canal e $m_{\text{eff}} = m_{\text{s/d}}$ para a região dos contatos. A dependência espacial de m_{eff} se deve ao fato de que a massa efetiva do portador pode mudar quando injetado no canal.

Nesse trabalho a relação de dispersão do CNT na região dos contatos metálicos é parabólica e resulta em massa efetiva constante. Enquanto que na região do canal é considerada a relação de dispersão mintmire não parabólica [51] que é dada pela equação 2.6. E_g indica a energia da banda proibida do CNT.

$$E(k) = \pm \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{E_g}{2m_{\text{cnt}}^*} \hbar^2 k^2} \quad (2.6)$$

As relações de dispersão mintmire e parabólica são mostradas na figura 2.12. Nesta os vetores de onda também são calculados para valores de energia pertencentes à banda proibida. As energias

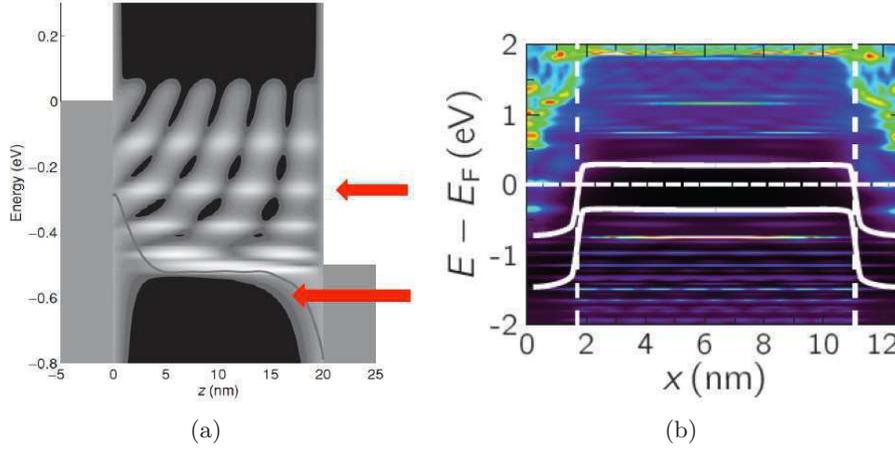


Figura 2.11: Funções de onda ao longo do dispositivo (Adaptado de [12]) e densidade de estados (Adaptado de [13])

na banda proibida são mostradas como a parte imaginária do gráfico, e são importantes para o tunelamento banda-para-banda. Essa análise é importante apesar de não se aplicar às simulações desse trabalho.

A massa efetiva dos portadores atravessando o transistor depende levemente da energia, já que uma relação de dispersão do tipo mintmire é assumida $E(k_{ch})$, que muda de parabólico para linear quando o momento aumenta do mínimo de banda (veja figura 2.13).

A equação 2.6, no caso em que $k \rightarrow 0$, $E = E_{gap}/2 + \hbar^2 * k^2/2m_{cnt}$, pode ser simplificada para uma parábola com $E(K = 0) = E_{gap}/2$. No caso em que $k \rightarrow \infty$, $E = \sqrt{E_{gap}/2m_{cnt}}\hbar k$ o comportamento da equação 2.6 é linear.

$$E = E_c + \frac{k^2 \hbar^2}{2m^*} \quad (2.7)$$

No grafeno, ou CNT, a massa efetiva do elétron é menor que a massa do elétron livre visto que o carbono interage fracamente com o elétron na condução balística. Esses valores baixos para m_{eff}^* facilitam a injeção por tunelamento no canal.

Para considerar a estrutura de banda não parabólica (equação 2.6) na solução da equação de Schrödinger (2.4), a massa efetiva dependente da energia é determinada pela equação 2.8.

$$m_{eff}(E, x) = m_{cnt} \left(1 + \frac{E - qV_{eff}(x)}{E_g} \right) \quad (2.8)$$

A relação de dispersão $E(k_{s/d})$ para as regiões do contato é assumida ser parabólica, isto é, descrita por uma massa efetiva independente da energia $m_{eff,c}$. Isso se deve ao fato de que a segunda derivada da energia (E) em relação ao vetor de onda k é constante.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m^*} = constante \quad (2.9)$$

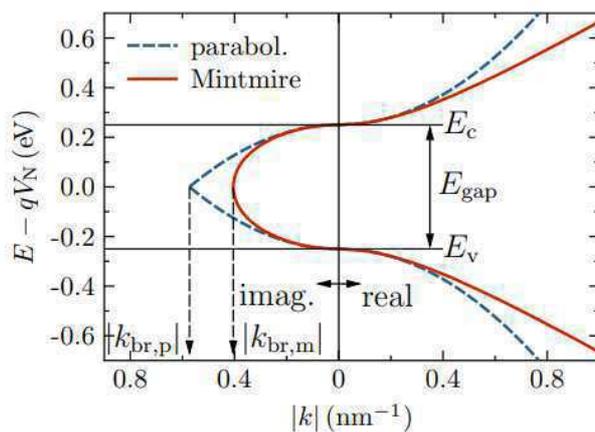


Figura 2.12: Relações de dispersão mintmire e parabólica. Adaptado de [14]

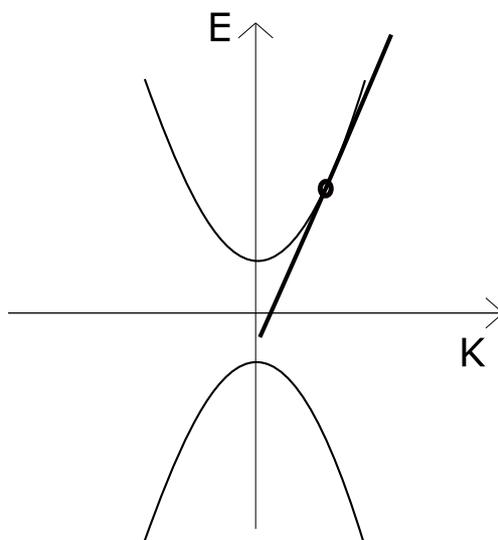


Figura 2.13: Relação de dispersão parabólica independente da massa efetiva

Assim a relação de dispersão parabólica resulta em uma energia independente da massa efetiva representada na figura 2.13.

2.5.2 Equação de Poisson

A equação de Poisson calcula o potencial elétrico a partir da densidade de portadores e é dada por:.

$$-\varepsilon \nabla E = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \varepsilon = -\rho \quad (2.10)$$

ψ é o potencial eletrostático, ε a permissividade elétrica do meio, ρ a densidade de portadores e x é a variável espacial do dispositivo. O transporte balístico ao longo de um canal 1D do transistor pode ser modelado como uma onda de elétron se propagando em um potencial eletrostático variante com a posição.

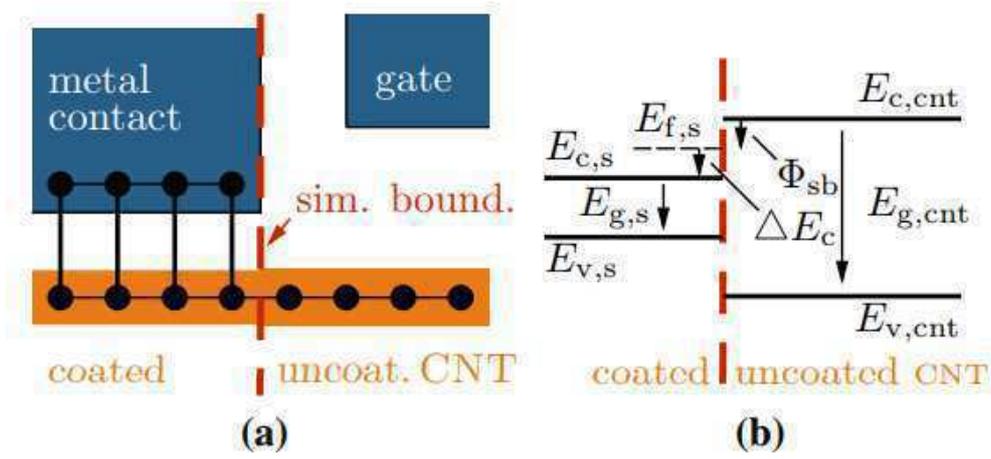


Figura 2.14: Heterojunção (Adaptado de [14])

Geralmente assumimos que o potencial eletrostático do canal está situado entre dois reservatórios de elétrons (regiões de dreno e de fonte) e cada um deles injeta portadores no canal de acordo com a distribuição de energia do seu respectivo nível de Fermi e relação de dispersão. O fluxo de corrente é determinado pela diferença entre o número de ondas entrando e saindo do canal.

2.5.3 Condições de contorno

Neste ponto um tratamento especial para injeção de cargas em transistores de canal 1D é essencial para prever as características terminais dos CNTFETs. A injeção pode ser significativamente influenciada pela força de acoplamento entre os contatos metálicos e o canal do CNTFET [52].

As condições de contorno para a equação de Poisson e a equação de Schrödinger são determinadas na interface coberta-descoberta para os contatos de fonte e dreno. O modelo de contato da heterojunção permite uma descontinuidade da massa efetiva na interface metal-semicondutor. Como consequência da dependência entre m_{eff} e a posição na equação de Schrödinger (2.4), as condições de continuidade para a função de onda ϕ_x na interface CNT-metal têm que ser generalizadas.

O contato simulado nesse trabalho envolve uma interação entre as moléculas do CNT e as moléculas do metal mudando a estrutura eletrônica do CNT como mostrado na figura 2.14. Na porção do nanotubo inserida no metal, devido à ligação química do carbono e os átomos de metal, a relação de dispersão nas porções de tubo coberta e descoberta irá mudar, o que leva a diferentes bordas de bandas e massa efetiva.

Uma reflexão de portadores de cargas dependente da tensão na interface deve ser considerada por conta de descontinuidades no valor do potencial e do momento do elétron [53].

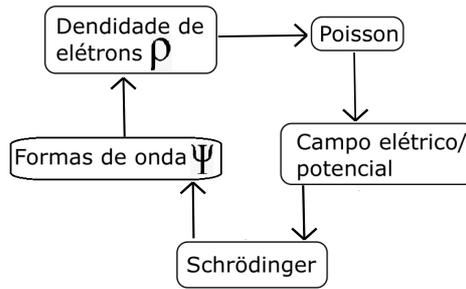


Figura 2.15: Iteração entre equações de Schrödinger e Poisson

2.5.4 Solucionador

O solucionador considera efeitos de estrutura de banda não parabólica e o modelo de heterojunção para contatos estendidos para descrever a injeção e a recepção de portadores para dentro e para fora do canal.

Efeitos eletrostáticos são contados resolvendo a equação de Poisson 3D. Para capturar efeitos quânticos ao longo do canal do transistor como picos de transmissão de ressonância e tunelamento ao longo das barreiras dos contatos, a carga e a corrente balística são calculadas pelo envelope das funções de onda ϕ . Eventos de espalhamento são difíceis de serem considerados, porém com a dimensionalidade reduzida (espalhamento por fônon) e baixa densidade de portadores (espalhamento eletron-eletron) estes devem ser raros de acontecer em nanotubos.

O método autoconsistente para determinar a distribuição de elétrons e os campos elétricos ao longo do dispositivo é mostrado na figura 2.15.

A equação 2.11 determina a densidade de cargas ρ a partir da densidade de portadores n .

$$\rho = q * n = q * \int_{-\infty}^{\infty} D_{s,d}(E) |\phi(x)|^2 f_{s,d}(E) dE \quad (2.11)$$

2.6 Método baseado na equação de Landauer-Büttiker 1D para a determinação da barreira de Schottky

Um método de extração de ϕ_{SB} relacionado à característica corrente-tensão em diferentes temperaturas é o método de ativação de energia (AEM), que assume a emissão termiônica de portadores através de uma barreira de potencial em um diodo Schottky. Nesse método ϕ_{SB} é extraído a uma tensão de banda plana V_{FB} . Porém este valor, V_{FB} , é muito difícil de identificar especialmente para CNTs e compostos III/V, que têm um baixo valor de massa efetiva dos portadores. Esse método assume uma interface 3D com o metal e apenas a modificação da equação do diodo Schottky para 1D pode não ser suficiente. E outras adaptações mais sofisticadas precisam ser feitas.

O procedimento de extração da barreira de Schottky para transistores balísticos 1D foi descrito

anteriormente em [54]. A corrente de elétrons em dispositivos quasi-balísticos é relacionado à probabilidade de transmissão pela equação de Landauer-Büttiker [55] e regiões de polarização e transporte resultam em diferentes formulações do formalismo. A equação de Landauer-Büttiker é dada por (2.12).

$$J = \frac{4q}{\hbar} \int_{E_{cc}}^{\infty} \mathcal{T}(E)[f_S(E) - f_D(E)]dE \quad (2.12)$$

Sendo q a carga elementar do elétron $-1.6 \times 10^{-19}\text{C}$, \hbar a constante de Planck reduzida $6,58 \times 10^{-16}[\text{eV} \cdot \text{s}]$, $\mathcal{T}(E)$ a função de probabilidade de transmissão do elétron dada pela equação 2.14, $f_{S/D}$ as funções de Fermi da fonte e do dreno. Contudo para grandes barreiras e pequenos valores de tensão para a porta e o dreno os níveis de Fermi dos dois contatos estão bem abaixo da energia de controle de corrente E_{cc} sendo que $\mathcal{T}(E > E_{cc}) > 0$. E_{cc} é definida como a energia mínima em que a corrente pelo dispositivo é diferente de 0. Tipicamente o ponto de energia de controle de corrente está associada com o mínimo da banda de condução.

Assim a probabilidade de injeção de todos os portadores injetados é afetada pela parte exponencial da função de Fermi e correntes termiônica e de tunelamento podem exibir uma dependência de temperatura similar no regime de baixas tensões, veja a figura 4.2. A dependência da temperatura da equação de Landauer-Büttiker não apenas se aplica a correntes puramente termiônicas, mas também determina aproximadamente o *onset* do tunelamento.

Analisando o fenômeno do transporte em uma dimensão pelo aspecto da transmissão dos elétrons como onda. Considere o caso de elétrons sendo injetados em um semiconductor 1D. Os elétrons têm uma energia (E) maior que a energia E_c da borda da primeira subbanda do semiconductor. Condução em um sistema 1D pode ser visto como um problema de transmissão. Parte do fluxo de corrente é refletido devido à reflexão das ondas na interface metal-semiconductor e uma parte é transmitida como é visto na equação 2.13. Adicionando os dois fluxos do dreno temos o espectro da corrente dos elétrons.

$$J_e(E) = \mathcal{T}(E)J_S(E) + [R(E) - 1]J_D(E) = \mathcal{T}(E)[J_S(E) - J_D(E)] \quad (2.13)$$

$\mathcal{T}(E)$ é a probabilidade de transmissão ($\mathcal{T} \approx 1$ para balístico) e $R(E)$ a probabilidade de reflexão na energia E para o sistema inteiro. A corrente de elétrons em uma determinada energia E é o produto da carga e a velocidade dos elétrons.

É implicitamente assumido que $\mathcal{T}(E)$ depende apenas fracamente da temperatura. A função de probabilidade de transmissão é dada pela equação (2.14).

$$\mathcal{T}(E) = \frac{m_s^*(E) k_d(E)}{m_d^*(E) k_s(E)} |\phi^s(x_d)|^2 \quad (2.14)$$

O transporte é determinado entre as regiões de fonte e dreno e o transporte do bulk metal dos contatos para os fios é assumido ser independente da tensão de polarização. A função de onda ϕ^s é calculada na interface entre a porção do tubo envolvida pelo metal e a parte descoberta. Os valores

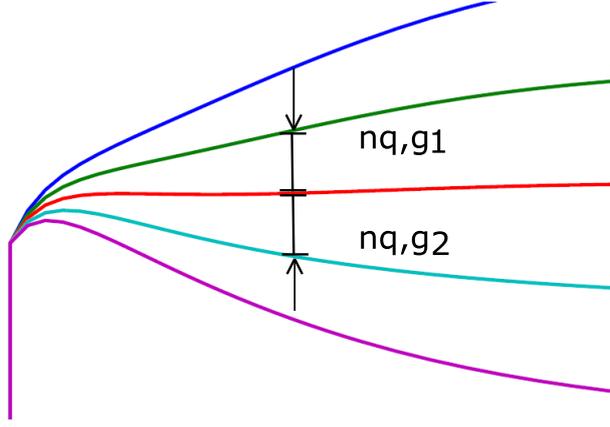


Figura 2.16: Coeficiente de acoplamento $n_{q,g}$

para $k_{s/d}$ dependem da estrutura de banda assumida na região dos contatos e conseqüentemente dos parâmetros do $m_{s,d}^*$ e $E_{c,eff,s/d}$. Para estimar a dependência de temperatura, no regime de baixas tensões, uma função de probabilidade de transmissão média é introduzida \bar{T} independente da energia.

$$J \approx \frac{4q}{\hbar} \bar{T} \int_{E_{cc}}^{\infty} [f_S(E) - f_D(E)] dE \quad (2.15)$$

A equação de Landauer-Büttiker simplificada descrevendo o transporte quasi-balístico considerando apenas a primeira subbanda para correntes de elétron termiônicas na região de *subthreshold*, $V_{GS} \rightarrow V_{FB}$ e $V_{DS} \rightarrow 0$ é dada pela equação 2.16. Assim obtemos a equação que norteia os experimentos para determinar a barreira de Schottky.

$$\ln\left[\frac{J\hbar}{4q^2\bar{T}V_t}\right] \approx \frac{n_{q,g}}{V_t}(V_{GS} - V_{FB}) + \frac{n_{q,d}}{V_t}V_{DS} - \frac{\phi_{SB}}{V_t} \quad (2.16)$$

Em que $V_t = k_B T q^{-1}$ é a tensão térmica, k_B é a constante de Boltzmann $1.38 \times 10^{-23} [m^2 kg s^{-2} K^{-1}]$, T a temperatura em Kelvin, q a carga elementar do elétron, \bar{T} a função de probabilidade de transmissão média.

O coeficiente de acoplamento $n_{q,g}$ nos dá a relação entre a variação na concentração de cargas no canal e a variação da tensão aplicada na porta. Seu valor varia com o lado da aproximação do valor de V_{GS} de V_{FB} como pode ser visto em Fig. 2.16.

Um acoplamento eletrostático entre o contato de dreno e o canal deve levar a um abaixamento da barreira induzido pelo dreno (DIBL). Esse fenômeno é capturado por $n_{q,d}$ que é determinado descobrindo a barreira de potencial para cada valor de V_{GS} e fazendo a extrapolação linear para $V_{DS} = 0$. O método para determinar $n_{q,d}$ e $n_{q,g}$ é descrito na seção 3.

Partindo da equação 2.16 plota-se um diagrama de Arrhenius $\ln I_{th}^{sub}/T \sim T^{-1}$ para diferentes valores de V_{GS} a cada V_{DS} como mostrado na figura 3.3 (a). As inclinações dessas curvas são plotadas em função de V_{DS} e extrapolam-se as retas obtidas nesse gráfico para $V_{DS} = 0$ como visto em 3.3 (b).

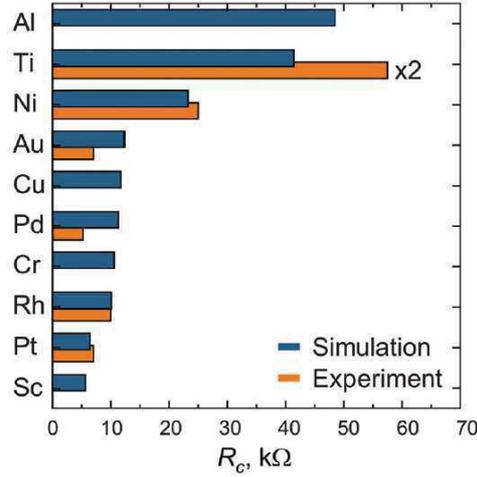


Figura 2.17: Resistência de contato de CNTs para diversos tipos de metal. Adaptado de [15].

A dependência entre a temperatura e a curva de transferência no regime de *subthreshold* pode ser descrita muito bem por um comportamento termicamente ativado apesar de a corrente de tunelamento não ser desprezível nesse regime, veja Figura 4.2.

A tensão de banda plana é identificada por uma descontinuidade na curva resultante de ϕ_{SB} x V_{GS} e nesse ponto $V_{GS} = V_{FB}$.

Mesmo no caso de transporte balístico perfeito, há uma condutância balística fundamental que satura a corrente do dispositivo com uma resistência de aproximadamente $12.9 \text{ k}\Omega$ por modo (inclusa a degenerescência de spin). Há também a generalização do formalismo de Landauer-Büttiker aplicável para problemas com dependência do tempo e na presença de dissipação.

2.7 Resistência de contato

O transporte em uma dimensão ainda não é completamente entendido e modelado pelos fenômenos quânticos. O portador é transmitido sem perda de energia ao longo do canal, no caso do nanoFET balístico, e a extração em um contato 3D causa a dissipação brusca da energia (o elétron deixa de ter a energia do canal e passa a ter uma energia bem menor correspondente às energias do contato). Atualmente as resistências de contato CNT-metal têm valores bem maiores que a resistência do mínima (resistência quântica), assim esse valor R_c passa a ser um fator limitante para o uso do nanoFET balístico e de extrema importância para a caracterização do dispositivo. A resistência de contato do CNT e diversos metais é mostrada na figura 2.17

Assim a determinação desse parâmetro é de fundamental importância para o desenvolvimento dessa nova tecnologia. Na literatura diferentes métodos para extrair a resistência de contato dos CNTFETs são encontrados [56,57]. Porém os valores encontrados em cada método podem diferir por ordens de magnitude. Contato do tipo ôhmico já foi conseguido por Javey *et al.* em CNTs [58].

Os contatos CNT-metal podem ser distinguidos por sua geometria *end-bonded*, *side bonded* ou *embedded contact*. Esse último tem feito parte do progresso da tecnologia CNTFET e tem

mostrado controle do valor da resistência de contato de acordo com o comprimento do CNT envolvido pelo metal como demonstrado anteriormente [15]. Neste caminho ainda há desafios para obter pequenas resistências de contato para canais menores que 10 nm.

Determinou-se que, para contatos muito longos com metais que interagem fracamente com o CNT, a resistência de contato não depende muito da função de trabalho do metal e tende ao valor da resistência quântica $R_0/m = \hbar/2e^2 * (1/m) \approx 12.9 \text{ k}\Omega/m$ em que m é o número de modos. Contudo diferentes barreiras eletrostáticas entre a parte coberta e descoberta do tubo são o motivo de as resistências de contato não serem iguais a R_0/m . Para canais curtos e contatos ôhmicos, a resistência total R_{tot} se aproxima do seu limite balístico.

Como mostrado em Fig.2.6 (a), duas interfaces contribuem para a resistência de contato (i) a interface entre o metal e parte encoberta do nanotubo (ii) a interface entre a parte coberta e a parte descoberta do metal. A primeira interface pode ser influenciada por vários parâmetros como geometria e comprimento do contato, assim como qualquer camada que esteja presente entre o metal e o nanotubo. A segunda interface influencia na mudança da estrutura eletrônica da parte do tubo coberta por causa da interação com o metal [14, 52, 59].

Apenas para interações fortes, o que é típico para metais quimicamente absorvidos, longos contatos CNT-metal podem ter grande resistência causada por: (i) *Fermi level pinning* na interface entre a parte do tubo coberta e descoberta e (ii) grande diferença na estrutura eletrônica na parte encoberta do CNT.

Uma estratégia comum para reduzir R_c é aumentar o comprimento da porção do tubo inserida no metal, o que não é desejável já que o tamanho do dispositivo aumenta. Na ausência de dopagem, a resistência de contato permanece grande.

A resistência de contato não pode ser determinada em um único parâmetro de interface como uma barreira de potencial do tipo Schottky. Contatos de Níquel e Alumínio exibem o mesmo valor de Φ_{SB} porém valores bem diferentes de R_c . De qualquer modo Φ_{SB} é um importante parâmetro de interface e metais que formam uma grande barreira de potencial não resultarão em resistências de contato pequenas.

A resistência total R_{tot} do CNTFET pode ser medida em seus terminais e considerada a soma da resistência do canal R_{ch} e as resistências dos contatos de dreno e fonte $R_{c,s/d}$, $R_{\text{tot}} = R_{\text{ch}} + R_{c,s} + R_{c,d}$ como feito no modelo clássico e mostrado na figura 3.9. Especialmente para o caso de transistores de barreira de Schottky, o impacto de Φ_{SB} na característica I-V pode ser considerado um parâmetro da resistência de contato dependente da tensão de porta. Assim $R_{c,s/d}$ é a resistência de contato e inclui o impacto da barreira de Schottky, que é calculada pela equação 2.17.

Tratando-se de um transistor balístico e de canal curto os fenômenos de dispersão e espalhamento podem ser bem reduzidos e até desconsiderados. A resistência do canal depende do número de eventos de dispersão e assim menor é a contribuição de R_{ch} para R_{tot} .

$$\phi_{\text{SB}} = E_{c,\text{cnt}} - E_{f,\text{metal}} \quad (2.17)$$

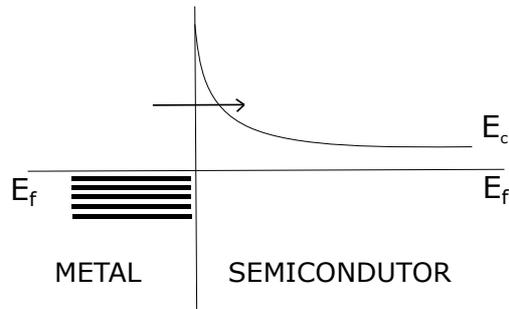


Figura 2.18: Resistência na transmissão devido a barreira de potencial

O valor da barreira de schottky é a diferença entre o nível de Fermi e a borda da banda de condução $E_{o,c}$ na interface como visto em Fig.2.6. Em Fig. 2.18 é ilustrada a barreira de potencial e a energia que o elétron deve transpor para conseguir ser injetado no canal, mostrando que a barreira de potencial oferece uma resistência na transmissão dos portadores.

2.7.1 Técnicas para controlar a resistência de contato

2.7.2 Dopagem

Um circuito integrado típico é uma mistura de regiões p e regiões n que devem estar conectadas. Essas regiões de contato devem ter mínima resistência e sem tendência a retificar sinais. O contato tipo ôhmico tem uma característica I-V linear em ambas as direções de polarização, ao contrário de contatos retificantes que têm uma região de depleção no semicondutor. O método para obter um contato do tipo ôhmico com o silício de semicondutor foi descrito [11].

O contato é ôhmico quando na junção metal-semicondutor a carga é induzida no semicondutor alinhando os níveis de Fermi e causadas pelos portadores majoritários.

Por exemplo, $\phi_m < \phi_s$ (tipo n) como na figura 2.19 os níveis de Fermi são alinhados em equilíbrio transferindo elétrons do metal para o semicondutor. Isso aumenta as energias dos elétrons do semicondutor e abaixa o potencial eletrostático relativamente ao metal em equilíbrio. Dessa maneira a barreira para o fluxo de elétron é pequena e facilmente transposta para pequenos valores de V_{DS} .

No caso de contatos retificantes a diferença do potencial eletrostático necessário para alinhar os níveis de Fermi em equilíbrio requer depleção de portadores majoritários no semicondutor. Uma maneira de formar contatos ôhmicos é dopar o semicondutor pesadamente na região contato, assim se existir uma barreira na interface a largura da região de depleção é tão pequena que os portadores podem tunelar. Por exemplo, Au (ouro) contendo uma pequena porcentagem de Sb (Antimônio) pode ser ligado ao Silício tipo n formando uma camada (n^+) na superfície do semicondutor e um excelente contato ôhmico.

A operação de dispositivos eletrônicos depende da densidade de portadores de cargas livres disponíveis no semicondutor. Na maior parte dos dispositivos semicondutores essa densidade é controlada pela adição de átomos de dopagem. O sucesso da operação desses dispositivos depende

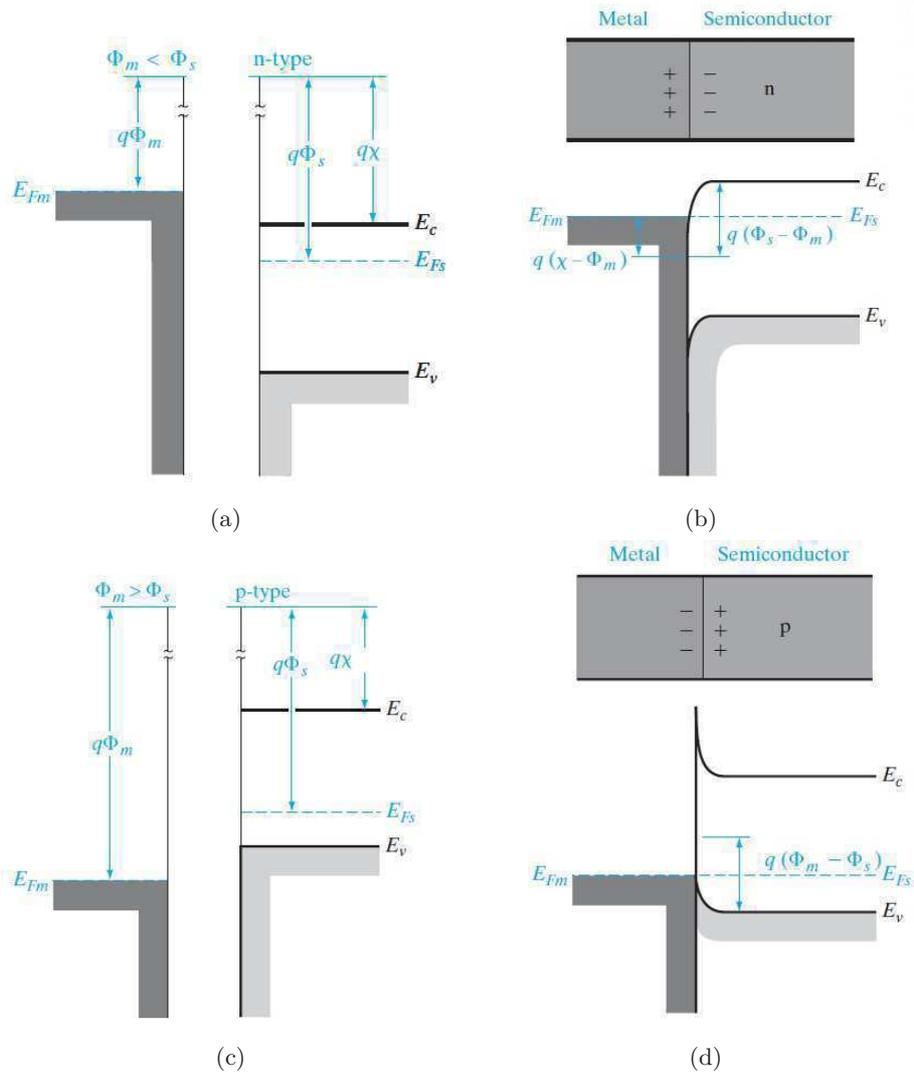


Figura 2.19: Bandas de condução, funções de trabalho e níveis de Fermi para junções metal-semicondutor dopados tipo n e tipo p. Adaptado de [11]

da habilidade de controlar precisamente o local e a densidade de impurezas no semicondutor hospedeiro durante o processo de fabricação.

O efeito da dopagem na junção metal-semicondutor pode ser observado na figura 2.20. A dopagem aproxima banda de condução do nível de Fermi, diminuindo assim a largura da barreira e facilitando a transmissão de portadores. Quando as dimensões são reduzidas a presença de interfaces e materiais adjacentes ao semicondutor se torna mais importante e pode determinar completamente as propriedades eletrônicas do dispositivo.

Medindo a condução elétrica de nanofios de silício dopado como uma função do raio do nanofio, da temperatura e do dielétrico cercante, mostramos que a energia de ionização do doador aumenta com a diminuição do raio do nanofio e isso modifica grandemente a densidade de portadores livres [33].

Em dispositivos 1D a dopagem continua sendo um problema dado que a presença de impurezas

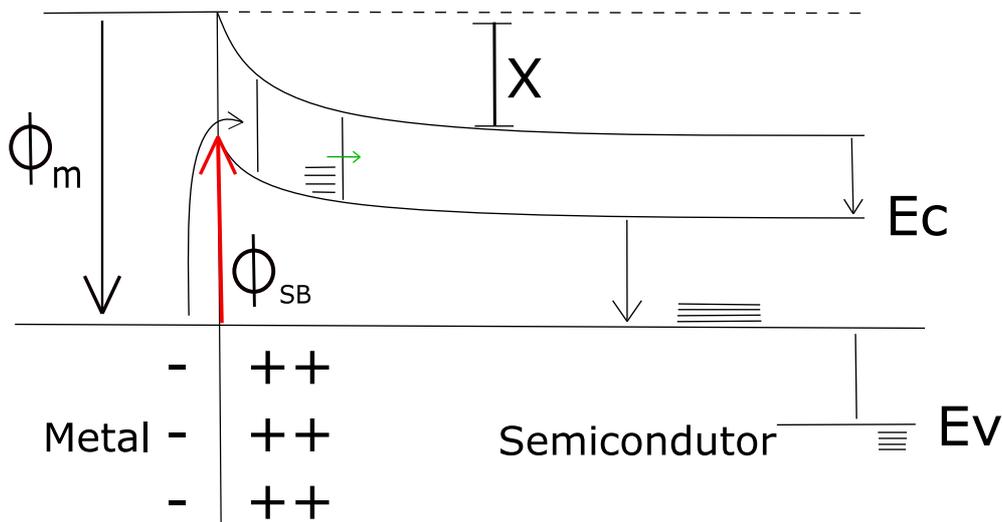


Figura 2.20: Cargas na junção metal-semicondutor

em um canal da dimensão de poucos nanômetros pode gerar efeitos difíceis de serem calculados. Um desses problemas é o efeito de segregação, em que as impurezas tendem a migrar para superfície do nanofio, dificultando a passagem de portadores apenas na superfície.

Outro problema da dimensionalidade no caso da dopagem é que a impureza doadora pode não doar o elétron pois as forças dos átomos no meio circundante não é suficiente para arrancar o elétron do doador (efeito da blindagem). Em cristais 3D todas as cargas têm o efeito de blindar a força atrativa do núcleo que é carregado positivamente.

Os processos de produção dos nanoFETs ainda demandam altas temperaturas (chegam até 1000 graus Celsius). O cobre, um metal de interconexão típico, tem um ponto de fusão de 1084 graus Celsius. Para a deposição dos contatos e os átomos de impurezas são evaporados como consequência dessas altas temperaturas.

2.7.3 Porção do tubo inserida no contato metálico

Uma estratégia comum para controlar a resistência do contato R_c é aumentar a porção do tubo inserida no contato metálico.

Vemos na figura 2.21 a dependência da resistência do contato com a porção do nanotubo de carbono envolvida pelo metal. Para metais como Alumínio, Titânio e Níquel a resistência diminui com o aumento da porção do tubo no contato e apresenta oscilações para contatos menores que 20 nm. Essas oscilações são causadas por efeitos de interferência quânticos. Metais como Cobre, Ródio e Escândio têm uma resistência bem baixa até mesmo para pequenos valores L_c (porção do nanotubo inserido no metal). Metais como Crômio, Paládio, Platina e Ouro apresentam valores de resistência bem elevados independentemente do valor de L_c .

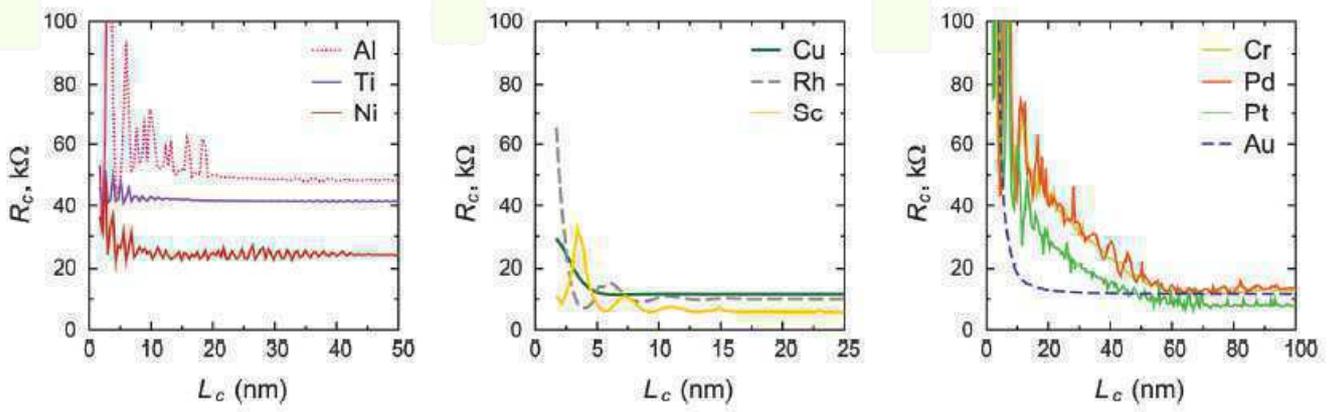


Figura 2.21: Resistência de contato em função do comprimento (adaptado de [15])

2.8 Técnicas extração da resistência do contato

2.8.1 Resistência em série e curva I-V para diferentes comprimentos de canal

No caso do modelo clássico as resistências são bem localizadas, porém essa determinação não é definida para o modelo quântico e métodos de extração da resistência são investigados.

Em [16] deriva-se a expressão para a corrente de dreno do MOSFET levando em conta o efeito de modulação do canal (equação 2.18) e é a base da maior parte das técnicas para determinar a resistência de contato $R_{S/D}$, a mobilidade efetiva μ_{eff} , o comprimento do canal L_{ch} , a capacitância do óxido por unidade de área C_{ox} e a largura do canal W_{eff} (esse parâmetro precisa ser adaptado para o caso unidimensional). As técnicas geralmente requerem pelo menos dois dispositivos de diferentes comprimentos de canal.

$$I_D = \frac{W_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}C_{\text{ox}}(V_{\text{GS}} - V_{\text{th}})V_{\text{DS}}}{(L - \Delta L) + W_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}C_{\text{ox}}(V_{\text{GS}} - V_{\text{th}})R_{S/D}} \quad (2.18)$$

A partir da equação da corrente I_D calcula-se o valor da resistência $R_{\text{tot}} = V_{\text{DS}}/I_D$. Substituindo pela equação (2.18) obtém-se:

$$R_{\text{tot}} = R_{\text{ch}} + R_{\text{SD}} = \frac{L - \Delta L}{W_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}C_{\text{ox}}(V_{\text{GS}} - V_{\text{th}})} + R_{S/D} \quad (2.19)$$

A resistência total, R_{tot} , entre cada par de contatos é obtido pelas medidas I-V nesses contatos. A resistência localizada em cada contato é determinada com a extrapolação linear de $R_{\text{tot}}(L_{\text{ch}})$ para $L_{\text{ch}} = 0$. Dado que $L_{\text{ch}} = L - \Delta L$, as equações (2.18) e (2.19) são adaptadas para ao nanoFET. R_{ch} é interpretada como a resistência intrínseca do MOSFET.

A equação 2.19 resulta em $R_{\text{tot}} = R_c$ se $L = \Delta L$. Plotando-se R_{tot} x L para diferentes valores de V_{GS} e diferentes comprimentos obtém-se o gráfico mostrado na figura 2.22. A intersecção dessas linhas fornece tanto a resistência de contato $R_{S/D}$ para cada valor de V_{GS} (que não deve variar já que espera-se que a resistência de contato seja a mesma para cada valor de V_{GS} no caso do

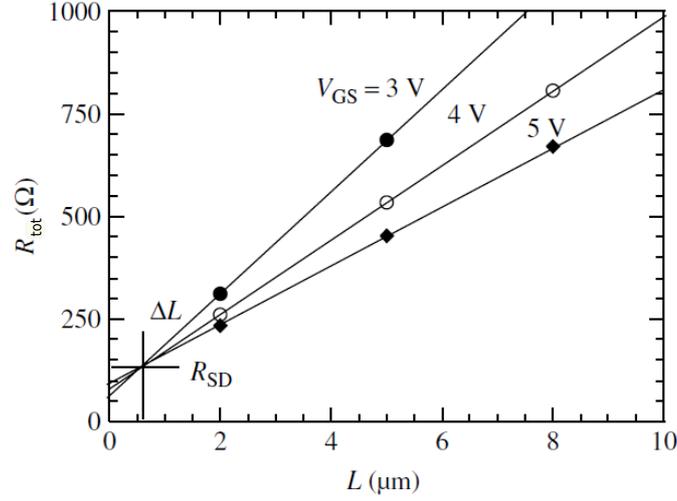


Figura 2.22: Resistência do dispositivo versus o comprimento do canal L_{ch} . Adaptado de [16].

MOSFET) quanto o valor de ΔL .

2.8.2 Método Y

O método baseado na função Y originalmente foi desenvolvido para Si-MOSFETs usando equações analíticas simples de MOSFETs e foi utilizado para determinar a resistência de CNTFETs [8]. Essa análise também cabe para o caso do nanoFET balístico dado que para pequenos valores das tensões de polarização assume-se que $I_D \sim V_{DS}$ por um fator de proporcionalidade, e uma relação linear é considerada. O método da função Y foi usada para extrair a resistência de contato em CNTFETs [60] e é baseado na combinação da equação da corrente e da equação de transcondutância para evitar os efeitos da redução de mobilidade na determinação dos parâmetros do modelo do dispositivo.

A função Y é definida como:

$$Y = \frac{I_D}{\sqrt{g_m}} \quad (2.20)$$

Em que I_D é a corrente do dreno e g_m é a transcondutância, parâmetro que determina a relação entre a polarização da porta e a condutância do canal no transistor. A transcondutância é medida como a derivada de I_D em relação a V_{GS} com V_{DS} constante.

$$g_m = \frac{\partial I_D}{\partial V_{GS}} \quad (2.21)$$

A expressão para corrente de dreno usada em YFM é dada pela por:

$$I_D \approx \beta \frac{(V_{GS} - V_{th})}{1 + R_C \beta (V_{GS} - V_{th})} V_{DS} \quad (2.22)$$

Em que $\beta = \mu_0 C_G / L_{ch}^2$ com a capacitância $C_G = C_{ox} W L_{ch}$; C_{ox} é a capacitância do óxido da porta específica por área, L_{ch} é o comprimento efetivo do canal, W é a largura efetiva do canal.

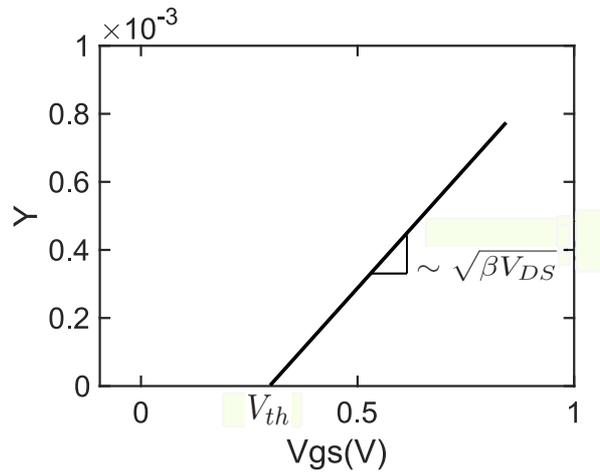


Figura 2.23: Gráfico da função Y versus V_{GS}

Substituindo a corrente de dreno (equação 2.22) na função Y (equação 2.20) a função Y pode ser escrita na forma de 2.23:

$$Y = \sqrt{\beta V_{DS}}(V_{GS} - V_{th}) \quad (2.23)$$

Assim a resistência é aproximada em baixos valores de V_{DS} por:

$$R_{tot} \approx \frac{1}{\beta(V_{GS} - V_{th})} \quad (2.24)$$

Como visto na figura 2.23 o gráfico da função Y determina tanto a tensão de limiar (V_{th}) na intersecção com o eixo x quanto o valor de β com a inclinação do gráfico. Assim substituem-se esses valores na equação 2.24 e obtem-se a resistência do dispositivo.

Capítulo 3

Metodologia

3.0.1 Método para determinação da barreira de Schottky

A arquitetura do nanoFET investigado é mostrado na figura 2.5 com comprimento de canal $L_{\text{ch}} = 40$ nm. Um dielétrico de porta de espessura $t_{\text{ox}} = 5$ nm e permissividade relativa de $\epsilon_r = 16$ foram assumidos. O óxido também serve como um *spacer* para a porta, que tem um comprimento de $L_g = 30$ nm. O modelos de contatos escolhidos são parcialmente motivados por um contato Al-CNT, que pode ser descrito por $\Phi_{\text{SB},n} = 0.26$ eV e $E_{0,c} = -0.8$ eV.

Para evitar complicações adicionais para a extração da barreira causadas pela injeção ambipolar de cargas do contato do dreno em baixa polarização da porta, o transporte pela banda de valência é negligenciado no presente estudo, isto é, E_G e $-E_{0,v} \rightarrow \infty$. Como visto na figura 3.1 o deslocamento da banda de condução resulta no deslocamento da banda de valência. Se por um lado eleva-se o perfil da banda de condução para diminuir a transmissão de elétrons na fonte, a elevação do perfil da banda de valência (que acompanha o perfil de E_c dado que $E_{\text{gap}} = \text{cte}$), e a injeção de lacunas como mais um fator de análise dificulta a compreensão da característica I_D x V_{GS} .

Quatro diferentes modelos de contatos são considerados. Todos os modelos exibem a mesma barreira de Schottky para a injeção de elétrons $\Phi_{\text{SB},n}$ mas diferem na banda de condução $E_{0,c}$ e na massa efetiva. Cada característica desse dispositivo é tabulada em 3.1.

Os valores ϵ_r e κ são os valores da permissividade relativa e da condutividade térmica respectivamente. Os valores empregados para a massa efetiva são bem baixos, típico para materiais baseados em carbono, o que facilita a injeção de cargas por tunelamento.

Sobre o método para a extração da barreira de Schottky descrito em [54], é essencial a identificação da tensão de banda plana V_{FB} .

Inicialmente são determinadas as curvas I_D x V_{GS} para diferentes valores de temperatura. Os valores de temperatura na simulação neste trabalho foram T=200 K, 250 K, 300 K, 350 K, 400 K, 450 K e 500 K. Os valores de tensão da porta V_{DS} vão de 0.2 V a 0.8 V e os valores da tensão da porta V_{GS} variam de -0.1 V a 1 V, operando na região de sublimiar. Verificamos que, para baixos

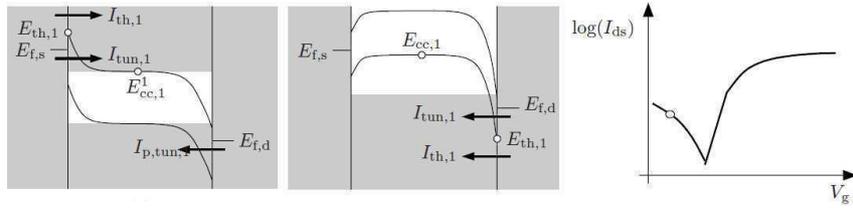


Figura 3.1: Ambipolaridade. Adaptado de [17]

Tabela 3.1: Características dos dispositivos simulados

C1	$E_{o,c} = 0 \text{ eV}$	$m_{eff,ch} = 0,075$	$\phi_{SB} = 0.28 \text{ eV}$	$m_{eff,c} = 0,06$
C2	$E_{o,c} = -0.4 \text{ eV}$	$m_{eff,ch} = 0,075$	$\phi_{SB} = 0.28 \text{ eV}$	$m_{eff,c} = 0,06$
C3	$E_{o,c} = -0.8 \text{ eV}$	$m_{eff,ch} = 0,075$	$\phi_{SB} = 0.28 \text{ eV}$	$m_{eff,c} = 0,06$
C4	$E_{o,c} = -0.8 \text{ eV}$	$m_{eff,ch} = 0,025$	$\phi_{SB} = 0.28 \text{ eV}$	$m_{eff,c} = 0,06$
SiO2	dióxido de silício	$eps = 3,9$	$kappa = 1,3$	
HfO2	dióxido de háfnio	$eps = 16$	$kappa = 10$	
CNT	Diâmetro do canal	$d_{cnt} = 1.3 \text{ nm}$		
Temperatura (T)	200 K - 500 K			

valores de tensão da porta na região de sublimiar, a característica $I_D \times V_{GS}$ tem perfil linear e a temperatura tem impacto na magnitude da corrente de dreno I_D por ordens de grandeza, como pode ser visto na figura 4.4. Já esses pequenos valores de V_{DS} não impactam significativamente no perfil. A partir da equação 2.16 é plotado um diagrama de Arrhenius ($\ln(I_{th}^{sub}/T) \sim T^{-1}$) como mostrado no gráfico da figura 3.3 (a).

Em química a equação de Arrhenius permite calcular a variação da constante de velocidade de uma reação química com a temperatura. Essa abordagem permite ver a dependência entre a transferência do elétron da fonte para o dreno e a temperatura como dois estados estáveis que precisam de certa energia para fazer a transição, como indicado na figura 3.2.

As inclinações das curvas do diagrama de Arrhenius são calculadas e plotadas ao longo de V_{DS} para cada valor de V_{GS} como visto na figura 3.3 (b).

No diagrama de Arrhenius é plotada a relação $\ln(I_D/T) \sim (1/T)$. As retas obtidas ($\ln(I_D/T) = m_1 * (1/T)$) fornecem o valor da inclinação $m_1 = n_{q,g}(V_{GS} - V_{FB}) + n_{q,d}V_{DS} - \Phi_{SB}$.

Assim quando extrapola-se para o valor $V_{DS} = 0$ elimina-se o segundo termo do segundo membro da equação 2.16. O último passo é plotar a relação $n_{q,g}(V_{GS} - V_{FB}) - \Phi_{SB}$ vs V_{GS} . O desvio da linearidade em ($V_{GS} = V_{FB}$) é dado pela diferença do valor de $n_{q,g}$ para $V_{GS} - V_{FB} > 0$ e $V_{GS} - V_{FB} < 0$, como pode ser visto na figura 3.4.

A energia térmica (temperatura) e o valor da tensão da porta são parâmetros diretamente proporcionais à condutividade do canal. A energia térmica aumenta o número de portadores

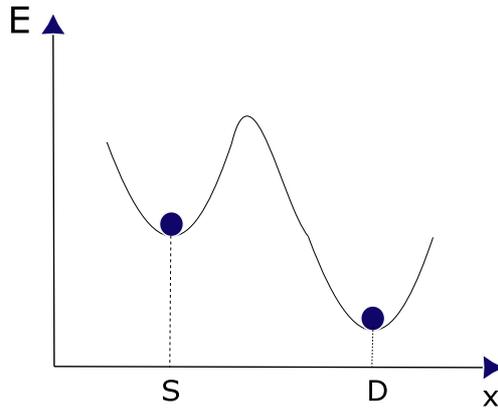


Figura 3.2: Energias nos contatos de fonte e de dreno.

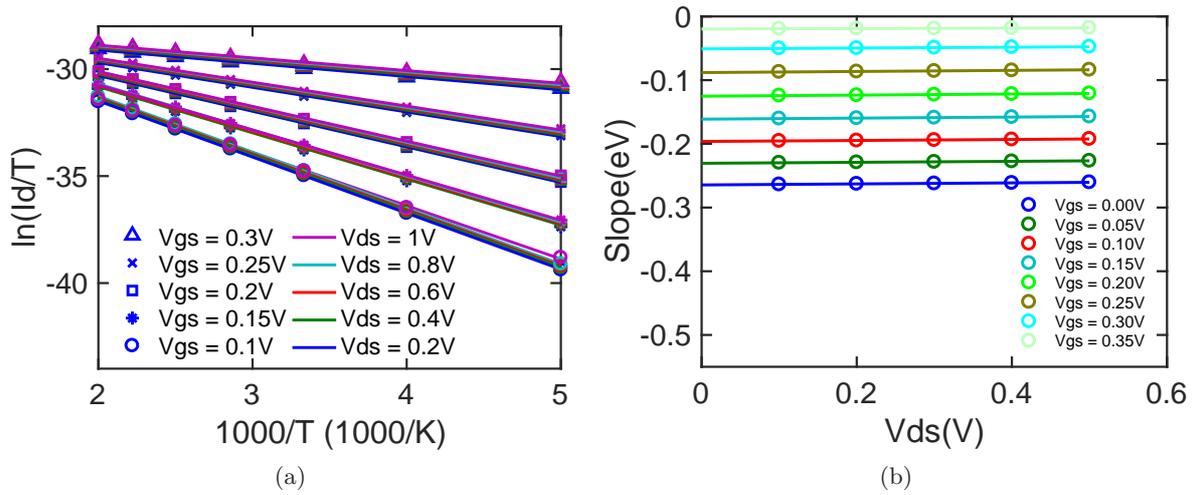


Figura 3.3: Diagrama de Arrhenius e as inclinações para diferentes valores da tensão da porta

disponíveis e V_{GS} diminui o potencial eletrostático ao longo do canal. Vemos uma forte dependência da barreira efetiva do valor de V_{GS} , ou seja, um coeficiente de acoplamento da porta $n_{q,g}$ bastante significativo.

Exemplificando graficamente como a variação da temperatura é um meio para a determinação da barreira de Schottky temos a figura 3.5. O controle da temperatura permite o monitoramento do número de portadores disponíveis para conduzir a corrente pelo dispositivo. Essa relação é bem determinada pela função de Fermi.

A figura 3.6(a) mostra a variação do perfil do potencial eletrostático da banda de condução E_c de acordo com o valor da tensão da porta. Maiores valores da tensão da porta aumentam o número de portadores majoritários no canal diminuindo assim o valor do potencial eletrostático ao longo do canal. O aumento de V_{GS} tem como consequência facilitar a condução de corrente (os elétrons precisam de menores energias para conduzir), diminuindo a barreira de potencial para a injeção das cargas aumentando a probabilidade de tunelamento, melhorando a condutividade.

Dos perfis de potencial, a tensão de banda plana V_{FB} é considerada o limite da condução por tunelamento. Esta tensão gera um perfil eletrostático constante ao longo de todo o canal criando

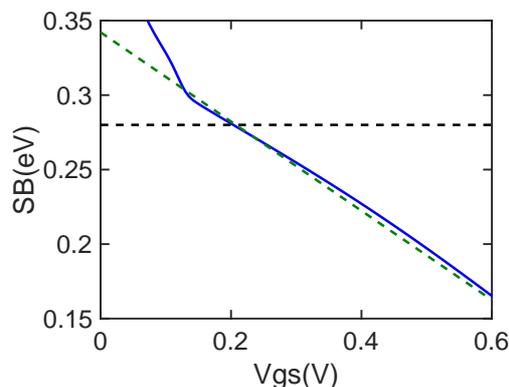


Figura 3.4: Desvio da linearidade de $\Phi_{SB} \times V_{GS}$

uma barreira de potencial da largura de todo o canal do dispositivo para elétrons e, teoricamente, desativaria o fenômeno de tunelamento.

No caso do dispositivo simulado é indicado pelo diagrama de bandas da figura 3.6 (b) e a tensão de banda plana determinada é $V_{FB} = 0.04$ V.

É importante perceber que V_{DS} tem uma contribuição para a altura barreira efetiva. O aumento da tensão de dreno diminui o valor da borda da banda de condução E_c na região de dreno. Esse abaixamento influencia todo o perfil dessa banda ao longo do dispositivo e esse efeito é chamado abaixamento da barreira induzida por dreno (DIBL). Este efeito é observado graficamente em Fig. 3.7.

3.0.2 Métodos para determinação da resistência do dispositivo

Métodos são investigados para o cálculo do valor da resistência do CNTFET. Em Fig. 3.8 a inclinação da curva $I_D \times V_{DS}$ determina o valor de $1/R_{tot}$. Descontinuidades nessa curva são apresentadas e questiona-se se fenômenos quânticos são a origem destas.

Na figura 3.9 é mostrado o modelo clássico de localização da resistência de um dispositivo. Nos experimentos verifica-se se é possível a aplicação desse modelo para o nanoFET quântico e a validade desse modelo para caracterizar a resistência calculada. A contribuição dos dois contatos, fonte e dreno, é indicada por $R_c = R_s + R_d$ e a resistência do canal R_{ch} representada por uma queda de tensão de $V_{s,i}$ no canal, com o índice i indicando que é um valor interno.

No caso do nanoFET balístico, a resistência do dispositivo é considerada apenas como a resistência de contato. Dado que o comprimento do dispositivo é menor do que o caminho médio livre do elétron e eventos de dispersão são negligenciados, a resistência do canal não é significativa para a condução ao longo do CNTFET.

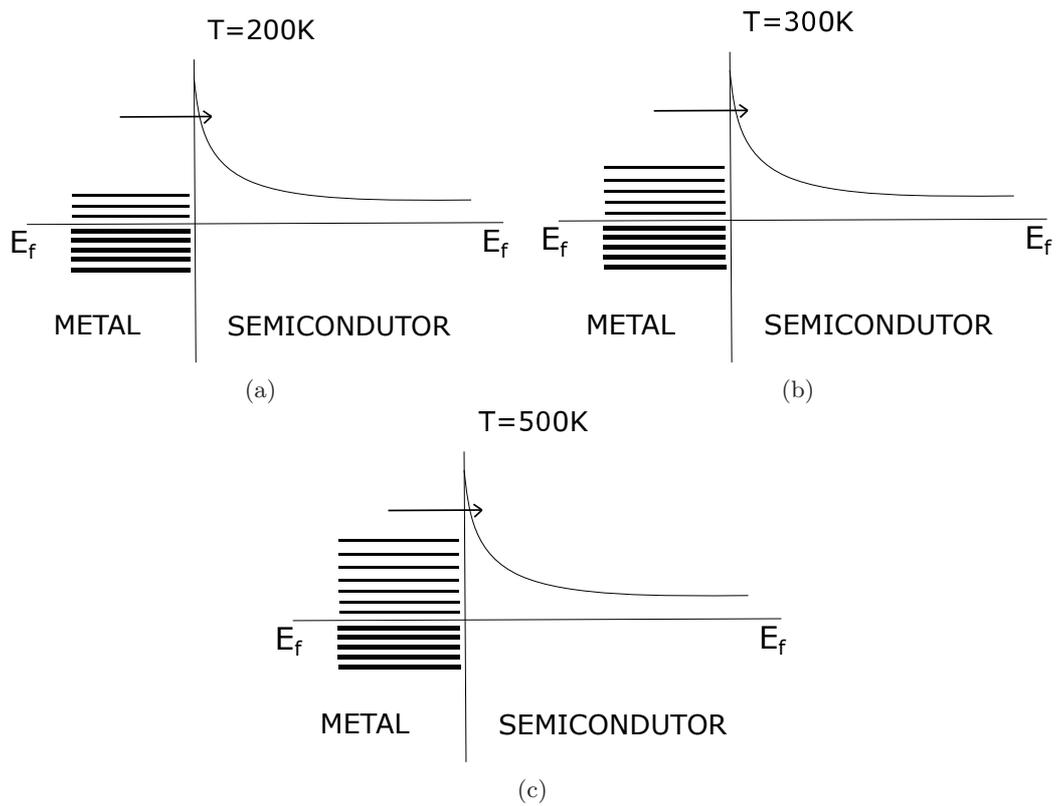


Figura 3.5: Variação da temperatura como meio da determinação do valor da barreira de Schottky

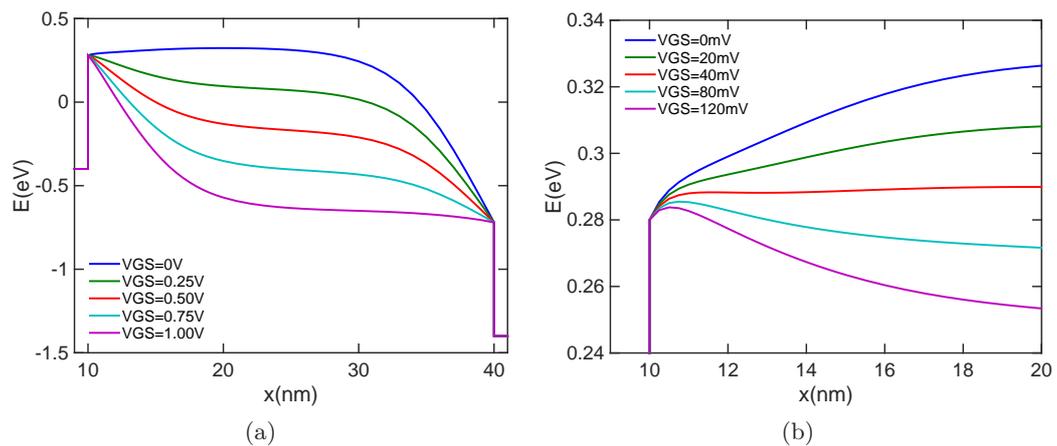


Figura 3.6: Diagrama de bandas do dispositivo para diferentes valores de V_{GS}

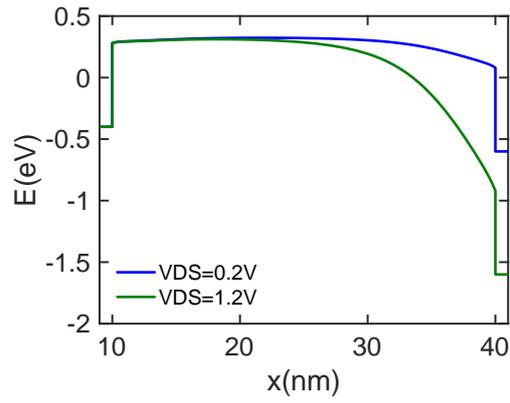


Figura 3.7: Efeito DIBL (Abaixamento da barreira induzida por dreno)

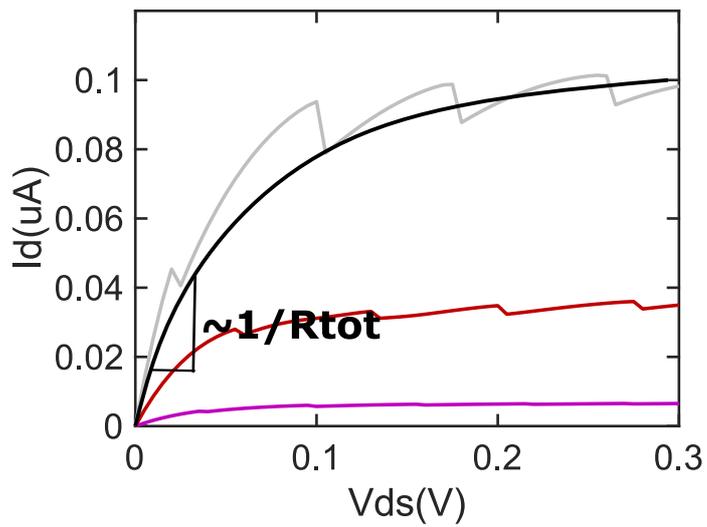


Figura 3.8: Cálculo da resistência do dispositivo pela inclinação da parte linear $V_{DS} \times I_D$



Figura 3.9: Modelo de resistência localizada do dispositivo

Capítulo 4

Resultados

4.1 Observações Gerais

Um dos resultados intermediários mais importantes é mostrado na figura 4.2. Nela é plotado o núcleo da integral da equação de Landauer-Büttiker 2.12. A diferença entre duas funções exponenciais $F_S - F_D$ resulta em uma área aproximada de um perfil triangular em um gráfico semilogaritmico. Apenas para valores de energia situada entre esses dois níveis é possível a condução de corrente.

Para fins didáticos e de interpretação consideramos a linha pontilhada indicando a altura da barreira de Schottky. Assim os elétrons com energias acima desse nível compõem a parte da corrente termiônica, tendo energia suficiente para atravessar a barreira de potencial. Os elétrons com energia abaixo do valor da linha formam a corrente de tunelamento, e transmitem apesar de terem energias menores que a barreira. Esse fenômeno quântico mostra picos de transmissão e a pequena diferença entre a área da curva real e o triângulo é interpretada como a diferença da aproximação entre \mathcal{T} e $\bar{\mathcal{T}}$.

Observa-se também a dependência da corrente de tunelamento com a temperatura. Isso se deve ao fato de que a temperatura aumenta o número de portadores disponíveis para a transmissão, inclusive para a transmissão por tunelamento. Assim, apesar de o tunelamento ser um efeito quântico, o número de elétrons disponíveis para tunelar é dependente da temperatura.

Em cada linha do gráfico aumenta-se o valor da tensão da porta e diminui-se o potencial eletrostático no canal. Na primeira linha ($V_{GS} = 0$ e $T = 200$ K) todo o espectro de corrente está situado acima da linha pontilhada. Já na segunda linha ($V_{GS} = 0.1$ V, $T = 200$ K) o espectro de corrente é bastante aumentado. Na terceira e quarta linhas ($V_{GS} = 0.4$ V) e na última linha a temperatura é $T = 500$ K. O contatos C1, C2 e C3 correspondem a massa efetiva de 0.075 e C4 a massa efetiva de 0.025.

Assim a medida em que aumenta-se V_{GS} diminui-se a espessura da barreira e mais elétrons podem contribuir para a corrente abaixo da barreira, verificando-se na teoria a contribuição de V_{GS} para a corrente de dreno I_D .

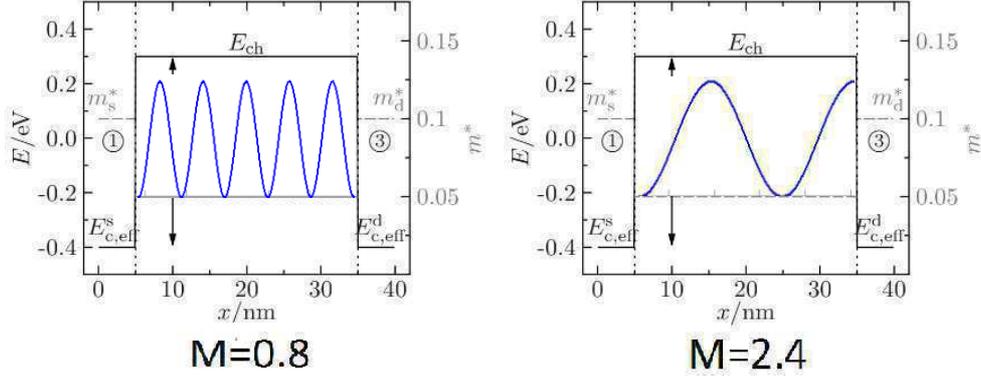


Figura 4.1: Vetores de onda ao longo do dispositivo

No modelo de contato C4, onde a massa efetiva é menor, apresentam-se picos de transmissão mais pronunciados, indicando energias em que o comprimento do canal é um múltiplo do comprimento de onda do elétron.

Em [53] faz-se uma análise da transmissão. Nesse instante é importante mencionar a relação entre o vetor de onda k e a energia. O vetor de onda em cada região é dado por:

$$k = \sqrt{2m^*(E - E_{c,\text{eff}})/\hbar^2}$$

Nas interfaces entre os contatos e o canal as condições de contorno que $\psi(x)$ e $[1/m^*(x)]d\psi/dx$ devem ser contínuas. Para fracas ligações químicas do metal com semiconductor espera-se que a razão da massa efetiva $M = m_{s,d}^*/m_{ch}^*$ seja perto de um. Quando $E \rightarrow E_{c,\text{eff}}$, $k \rightarrow 0$. Verificando que o valor do vetor de onda k é inversamente proporcional ao valor do comprimento de onda λ (veja equação 2.3). Vemos essa relação na figura 4.1. Assim se para a condição de $m_{\text{eff}} = 0.075$, $M = 0.06/0.075 = 0.8$ e para a condição $m_{\text{eff}} = 0.025$, $M = 0.06/0.025 = 2.4$. Tendo $a = Mk_{ch}/k_s$ e $b = k_d/k_s$ quanto maior o valor de M maior o valor de a , fazendo com que os picos de transmissão para dentro da curva, mínimo da transmissão (T_{min}) sejam mais pronunciados.

$$\mathcal{T}_{\text{min}} = \frac{4a^2b}{(a^2 + b)^2} \quad (4.1)$$

4.2 NanoFET Simétrico

A arquitetura simétrica simulada é mostrada na figura 4.3.

Em Fig. 4.4 apresentam-se as curvas de transferência para os quatro tipos de contato investigados e temperaturas de 200 K a 500 K. O impacto da temperatura é notável, aumentando o valor da corrente de dreno I_D em ordens de grandeza (linhas pontilhadas). Já o valor da tensão V_{DS} não muda significativamente o valor de I_D no regime investigado. Esse é o primeiro passo do procedimento de extração da barreira de Schottky.

Em seguida determina-se o diagrama de Arrhenius como no gráfico em 3.3 (a) na seção 3 e verifica-se que o impacto que diferentes valores de $V_{DS} = 0.2\text{V}, 0.4\text{V}, 0.6\text{V}, 0.8\text{V}$ e 1V para

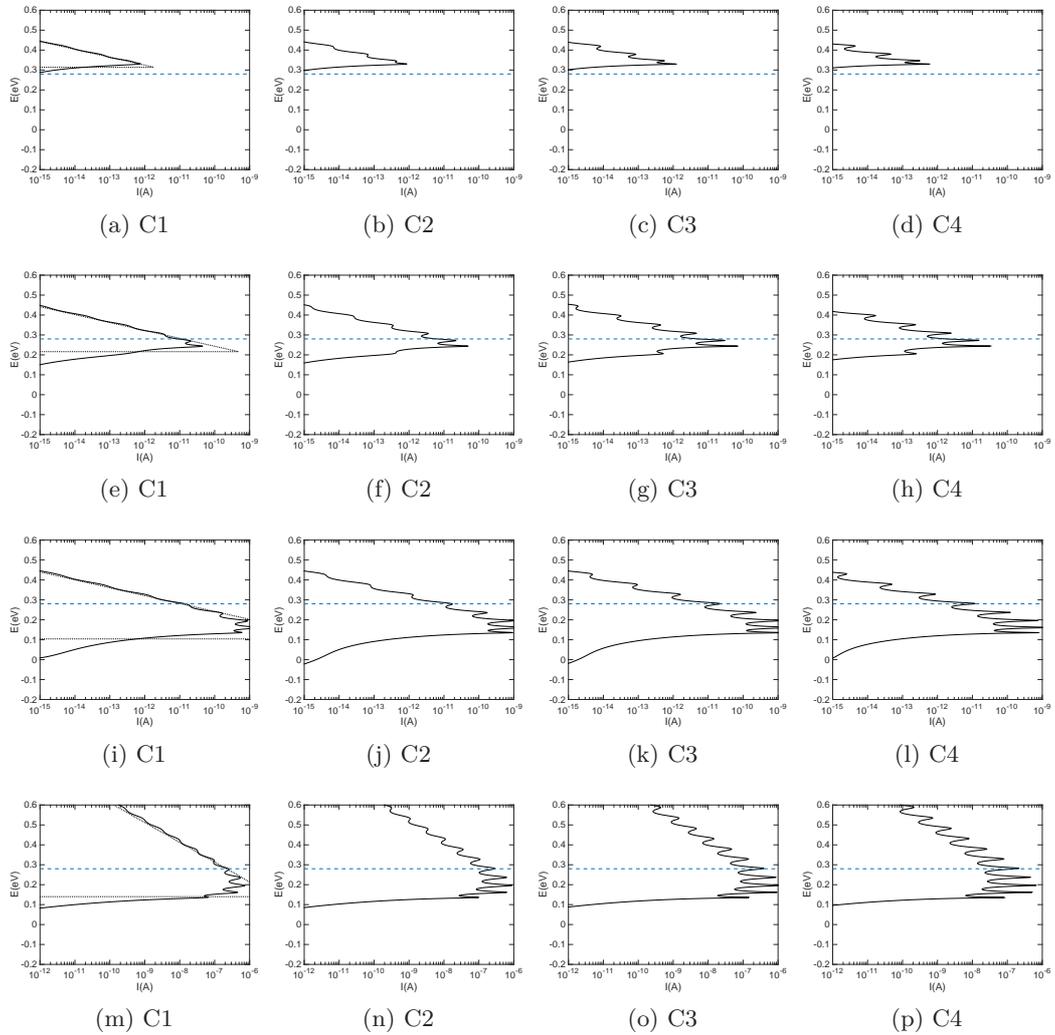


Figura 4.2: Espectro de corrente $V_{DS} = 0.2 \text{ V}$ e (primeira linha) $V_{GS} = 0 \text{ V}$, (segunda linha) 0.1 V e (terceira e quarta linhas) 0.4 V . As três primeiras linhas mostram o espectro de corrente em $T = 200 \text{ K}$ e a última linha em $T = 500 \text{ K}$. A linha pontilhada (a,e,i,m) serve como um guia indicando a diferença da função de Fermi da fonte e do dreno limitadas por E_{cc} e são adequadamente escalonadas. Note a mudança na escala da corrente para (m,n,o,p).

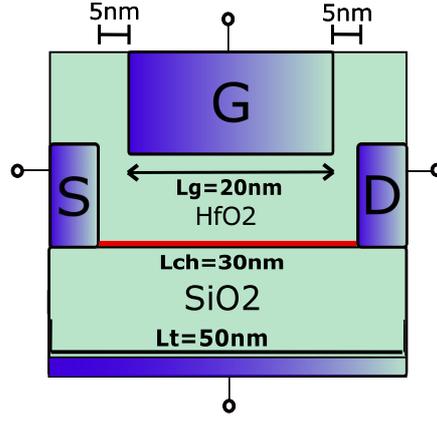


Figura 4.3: Arquitetura do nanoFET simétrico

Tabela 4.1: Valores de ϕ_{SB} extraídos para cada um dos modelos de contatos

Modelo de contato	C1	C2	C3	C4
Φ_{SB}	0.28 eV	0.28 eV	0.28 eV	0.28 eV
$\Phi_{SB, falso}$	0.06 eV	0.04 eV	0.04 eV	0.07 eV

$V_{GS} = constante$ não é significativo no regime de *subthreshold*. O valor de V_{GS} é diretamente proporcional ao valor de $\ln(I_D/T)$ e as inclinações de cada uma dessas retas dá origem ao gráfico de 3.3 (b).

Em fig. 4.5 o gráfico $n_{q,g}(V_{GS} - V_{FB}) - \phi_{SB} \times V_{GS}$ demonstra que o valor da barreira de Schottky calculada a partir da equação 2.16 para vários valores de V_{GS} não apresenta desvio na linearidade quando $V_{GS} = V_{FB}$.

O desvio da linearidade não é significativo para arquiteturas simétricas na região próxima do valor real de ϕ_{SB} e isso se deve à relação da condução por tunelamento com a temperatura no cálculo da função de Fermi no regime estudado. Tanto a corrente terminônica quanto a corrente de tunelamento apresentam a mesma proporção de variação com a variação da temperatura (veja figura 4.2).

Esse desvio do comportamento linear só é observado em valores de V_{GS} bem maiores do que o real valor de banda plana (nesse caso $V_{FB} = 0.04 V$). Lembrando que a diferença da aproximação de V_{GS} em cada sentido fornece um valor diferente para $n_{q,g}$.

Na figura 4.6 verificamos os perfis de diagramas de bandas para cada modelo de contato para os pontos de operação $V_{GS} = 0 V, 0.25 V, 0.5 V$ e $1 V$.

Os valores determinados para ϕ_{SB} pelo método investigado estão bem aquém dos valores reais como pode ser visto na tabela 4.1.

Afinal, a metodologia proposta baseada na equação de Landauer-Büttiker para nanoFETs simétricos balísticos de nanotubos TOP-GATE não é satisfatória para a determinação da tensão de banda plana V_{FB} do parâmetro Barreira de Schottky. Assim investigaremos essa metodologia

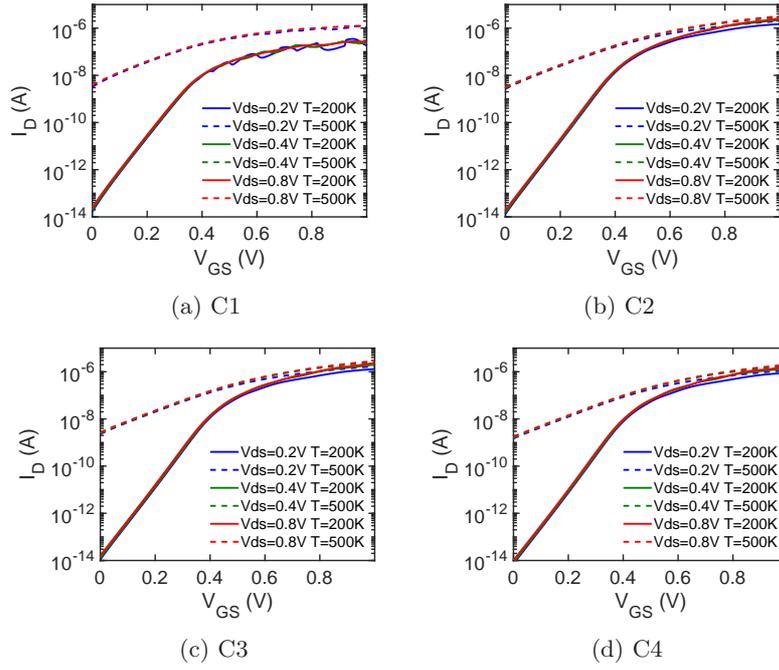


Figura 4.4: Característica de transferência para voltagens de dreno $V_{DS} = 0.2\text{ V}$, 0.4 V , 0.8 V e temperaturas $T = 200\text{ K} - 500\text{ K}$

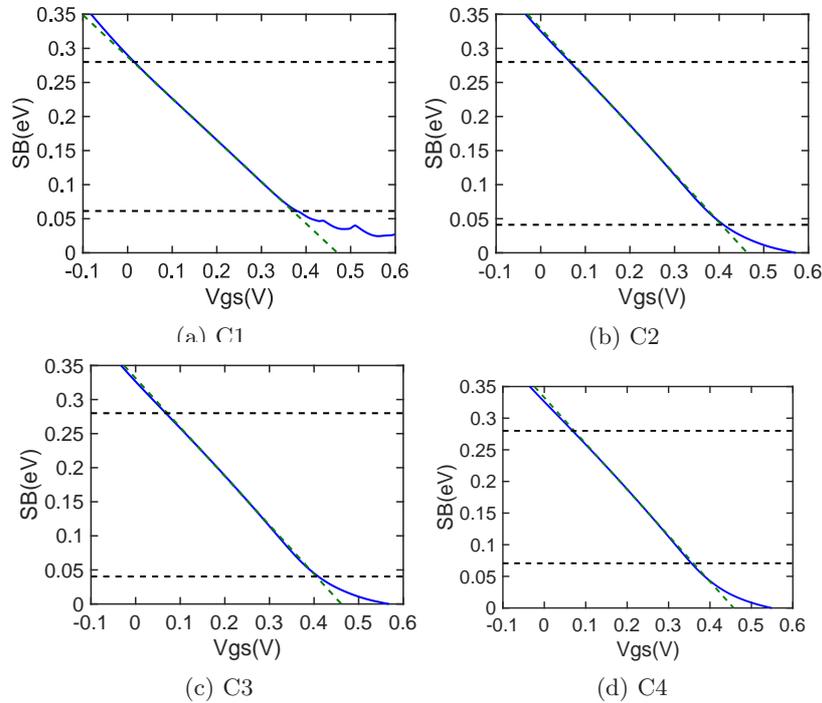


Figura 4.5: Determinação da barreira de Shottky para dispositivos simétricos pelo gráfico ϕ_{SB} x V_{GS}

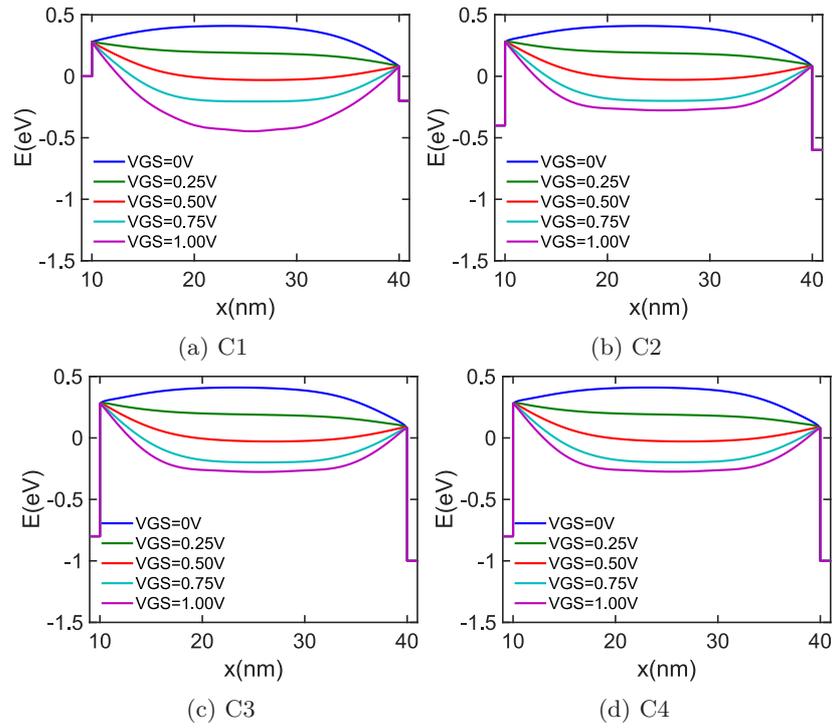


Figura 4.6: Diagrama de bandas para os quatro tipos de contatos a $T = 200\text{ K}$ e $V_{DS} = 0.2\text{ V}$

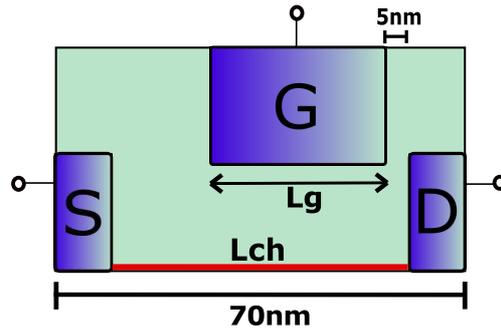


Figura 4.7: Arquitetura do nanoFET assimétrico para diferentes tipos de assimetrias.

para a arquitetura assimétrica.

4.3 NanoFET Assimétrico

A arquitetura simulada é mostrada em 4.7. Nela o valor L_g indica o comprimento da porta, conseqüentemente, sua assimetria. Vale lembrar que o substrato não está representado na figura apenas, e que todas as simulações foram feitas com a presença de "SiO₂" como substrato. O perfil do diagrama de banda assimétrico diminui a contribuição da corrente de tunelamento ao estender a barreira de potencial para regiões mais afastadas da fonte.

Nomeando as assimetrias temos $L_{g1} = 40\text{ nm}$ (simétrico), $L_{g2} = 30\text{ nm}$, $L_{g3} = 20\text{ nm}$ (maior assimetria). O desvio da linearidade no gráfico $\phi_{SB} \times V_{GS}$ não é observado para a arquitetura simétrica, enquanto que para as duas outras arquiteturas a tensão de banda plana é bem identi-

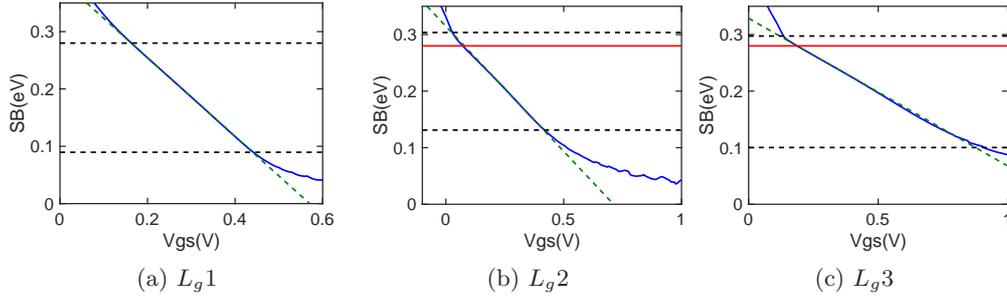


Figura 4.8: Extração da barreira de Schottky para dispositivos assimétricos

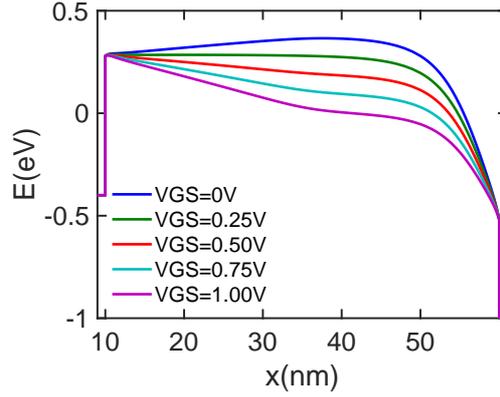


Figura 4.9: Diagrama de bandas do nanoFET assimétrico

ficável como pode ser visto em Fig. 4.8. Quanto maior a assimetria (distância da borda da porta até o contato de fonte) mais próximo do valor real a tensão de banda plana é identificada.

Na figura 4.9 observa-se claramente a diferença entre o perfil de diagrama de bandas do dispositivo simétrico (figura 4.5) e o perfil de diagrama de bandas do dispositivo assimétrico. Nesta seção foi simulado o contato C2 ($E_{0,c} = -0.4 \text{ eV}$), $T = 200 \text{ K}$, $V_{DS} = 0.8 \text{ V}$. Verifica-se que o perfil do diagrama é deslocado para a direita (mais próximo do meio do dispositivo). A proximidade entre os perfis de banda de condução, para os diferentes pontos de operação, mostram uma dificuldade no monitoramento do controle da injeção por tunelamento.

Enquanto o controle de corrente da parte termiônica da corrente é feito acima do perfil de banda plana, o controle do tunelamento (espessura da barreira) é feito com o controle de V_{GS} abaixo da tensão de banda plana V_{FB} . Assim temos que $V_{GS} > V_{FB}$ monitora a injeção termiônica e $V_{GS} < V_{FB}$ monitora a injeção por tunelamento.

Em Fig. 4.10 o espectro de corrente do dispositivo assimétrico para o modelo de contato C2 $V_{DS} = 0.2 \text{ V}$ e pontos de operação $V_{GS} = 0 \text{ V}, 0.1 \text{ V}$ e 0.4 V . Verifica-se a redução considerável da componente de tunelamento da corrente e diminuição drástica da magnitude da corrente em relação ao espectro do dispositivo simétrico. A distância do contato da porta até o contato de fonte faz com que o potencial eletrostático não diminua na região perto deste contato diminuindo a probabilidade de injeção por tunelamento perto do canal. Fique atento à diferença de escala de corrente de dreno I_D para o espectro de corrente das duas arquiteturas investigadas.

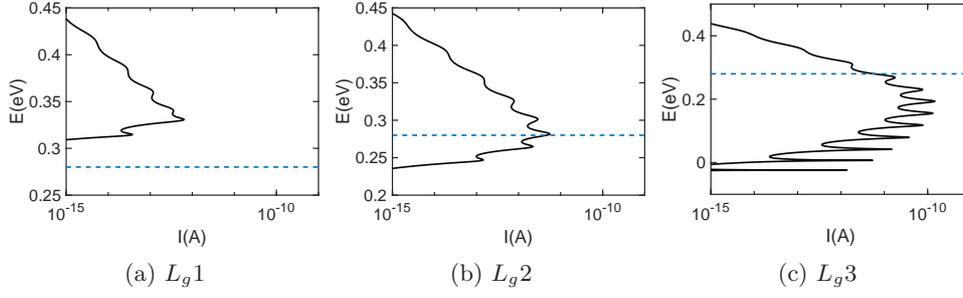


Figura 4.10: Espectro de corrente para dispositivos assimétricos

Tabela 4.2: Valores extraídos da barreira de Schottky para dispositivo assimétrico

Assimetria	Φ_{SB}	$\Phi_{SB,extraido}$
L_g1	0.28 eV	0.36 eV
L_g2	0.28 eV	0.32 eV
L_g3	0.28 eV	0.29 eV

Na tabela 4.2 os valores extraídos pela mesma metodologia para os três tipos de assimetria são tabulados. E observa-se que a proximidade do valor real é proporcional ao parâmetro assimetria.

Assim, a determinação de ϕ_{SB} para nanoFETs balísticos de nanotubos apenas pelas medidas elétricas é bastante favorecida pela arquitetura assimétrica. Dispositivos assim podem ser utilizados em circuitos apenas para monitoramento dos valores de ϕ_{SB} de dispositivos adjacentes. Caso não seja possível a disponibilidade dessa arquiteturas, investigam-se métodos de cálculo do valor da resistência total do nanoFET que é o parâmetro de principal importância.

4.4 Resistência do nanoFET

4.4.1 Resistência vs barreira de Schottky

Se a indentificação da tensão V_{FB} é possível apenas na arquitetura assimétrica, métodos para determinar a resistência de contato (R_c) do nanoFET balístico são investigados. O valor de R_c é de fundamental importância para o desenvolvimento da tecnologia e um dos objetivos do trabalho é relaciona-lo com o valor da barreira de Schottky.

A arquitetura utilizada para a determinação da resistência com a barreira de Schottky é a mesma do nanoFET simétrico e varia-se apenas o valor de ϕ_{SB} no arquivo de entrada. Em Fig. 4.11 calculam-se as curvas $I_D \times V_{DS}$ para valores de $V_{GS} = 0.6 \text{ V}, 0.8 \text{ V}, 1 \text{ V}$ e 1.2 V no modelo de contato C2 e temperatura $T = 300 \text{ K}$.

Na figura 4.12 temos a relação entre a resistência do dispositivo (método de cálculo indicado na seção 3) e o valor da barreira de Schottky. A linha verde pontilhada abaixo indica o valor da resistência quântica $R_0 = 12.9 \text{ k}\Omega$ por subbanda. Observa-se que uma pequena diferença do valor

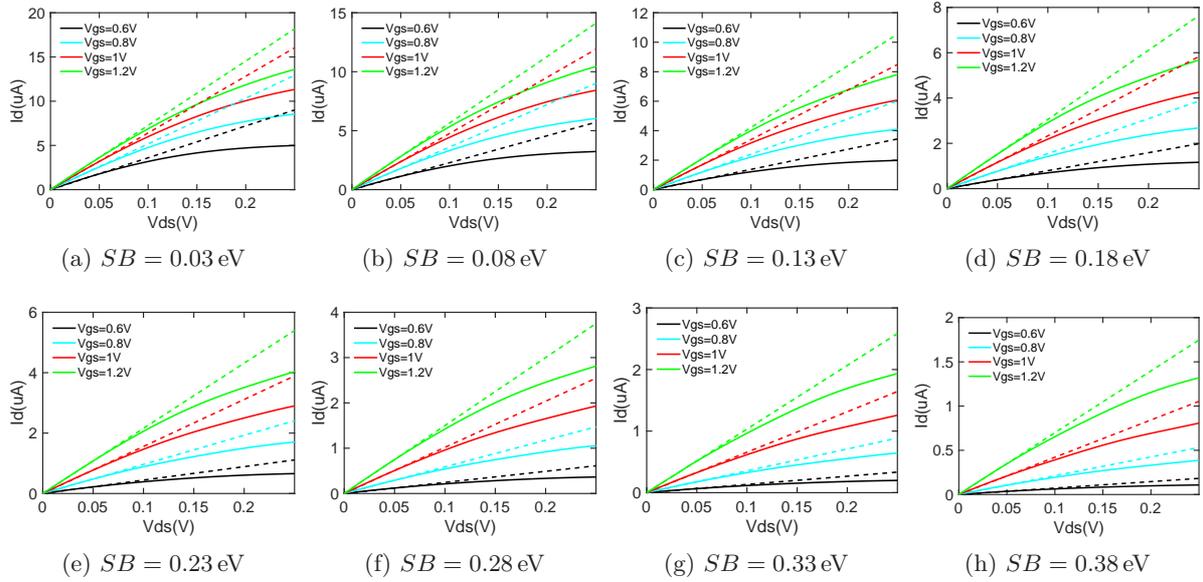


Figura 4.11: Curvas $I_D \times V_{DS}$ e determinação da resistência pela inclinação da parte linear do gráfico (linhas pontilhadas) para valores de $V_{GS} = 0.6 \text{ V}, 0.8 \text{ V}, 1 \text{ V}$ e 1.2 V .

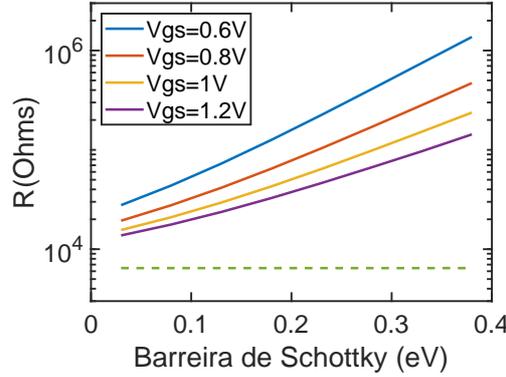


Figura 4.12: Relação Resistência vs Barreira de Schottky para diversos valores de V_{GS}

de ϕ_{SB} pode variar o valor da resistência do dispositivo por ordens de grandeza. No caso desse estudo consideramos apenas uma subbanda (a banda de condução $E_{0,c}$). A dependência entre o valor V_{GS} e R_c faz necessária a investigação de um outro parâmetro $P2$ que envolva ϕ_{SB} e forneça uma função $R_c(P2)$ independentemente da tensão de trabalho V_{GS} .

Na tabela 4.3 listam-se os valores da resistência do dispositivo para cada valor de ϕ_{SB} .

Verificamos a relação direta da altura da barreira de Schottky com a resistência do dispositivo, como já esperado. Os valores das resistências listados são bem altos, como se pode ver, em relação à resistência quântica.

4.4.2 Relação entre resistência e comprimento do canal

O método de medição das resistências de contato variando o comprimento do canal é comumente usado para dispositivos clássicos de MOSFET. E verificamos se o transistor balístico de

Tabela 4.3: Resistência total para variados valores de ϕ_{SB}

ϕ_{SB} / V_{GS}	$V_{GS} = 0.6 \text{ V}$	$V_{GS} = 0.8 \text{ V}$	$V_{GS} = 1 \text{ V}$	$V_{GS} = 1.2 \text{ V}$
$SB = 0.03 \text{ eV}$	27.7 k Ω	19.3 k Ω	15.6 k Ω	13.7 k Ω
$SB = 0.08 \text{ eV}$	43.7 k Ω	27.7 k Ω	20.9 k Ω	17.7 k Ω
$SB = 0.13 \text{ eV}$	72.7 k Ω	41.5 k Ω	29.5 k Ω	23.7 k Ω
$SB = 0.18 \text{ eV}$	126 k Ω	64.7 k Ω	42.9 k Ω	32.7 k Ω
$SB = 0.23 \text{ eV}$	224 k Ω	103 k Ω	64.2 k Ω	43.3 k Ω
$SB = 0.28 \text{ eV}$	408 k Ω	169 k Ω	98.2 k Ω	66.6 k Ω
$SB = 0.33 \text{ eV}$	747 k Ω	281 k Ω	152 k Ω	96.7 k Ω
$SB = 0.38 \text{ eV}$	1.37 M Ω	470 k Ω	237 k Ω	143 k Ω

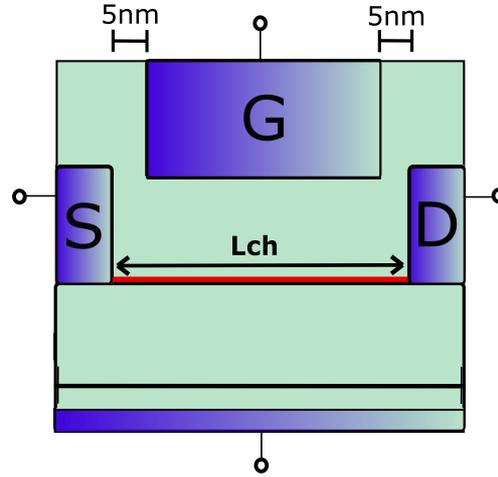


Figura 4.13: Arquitetura do dispositivo simétrico com valores de comprimento do canal $L_{ch} = 50 \text{ nm}/60 \text{ nm}/70 \text{ nm}$

nanotubo também pode ter suas características de resistência de contato determinadas desse modo. Como orientação a figura 3.9 mostra as resistências de contato R_c que precisam ser investigadas e a resistência do canal R_{ch} que nos dispositivos clássicos dependem do comprimento do canal.

Foram simuladas arquiteturas de comprimentos de canal $L_{ch} = 50 \text{ nm}$, $L_{ch} = 60 \text{ nm}$ e $L_{ch} = 70 \text{ nm}$. $V_{GS} = 0.6 \text{ V}/0.8 \text{ V}/1 \text{ V}/1.2 \text{ V}/1.4 \text{ V}/1.6 \text{ V}$ e tensão de dreno V_{DS} variando de 0 a 0.5 V para o modelo de contato C2. As arquiteturas são indicadas em Fig. 4.13.

As resistências correspondentes para cada valor de V_{GS} são obtidas pela inclinação da parte linear do gráfico I_D vs V_{DS} indicadas pelas retas pontilhadas em Fig. 4.14.

Dos valores obtidos para as resistências do dispositivo veja-se Tab. 4.4. Os valores das resistências são os mesmos para os diferentes comprimentos por via de regra, com algumas flutuações de valor devido às descontinuidades nas curvas obtidas.

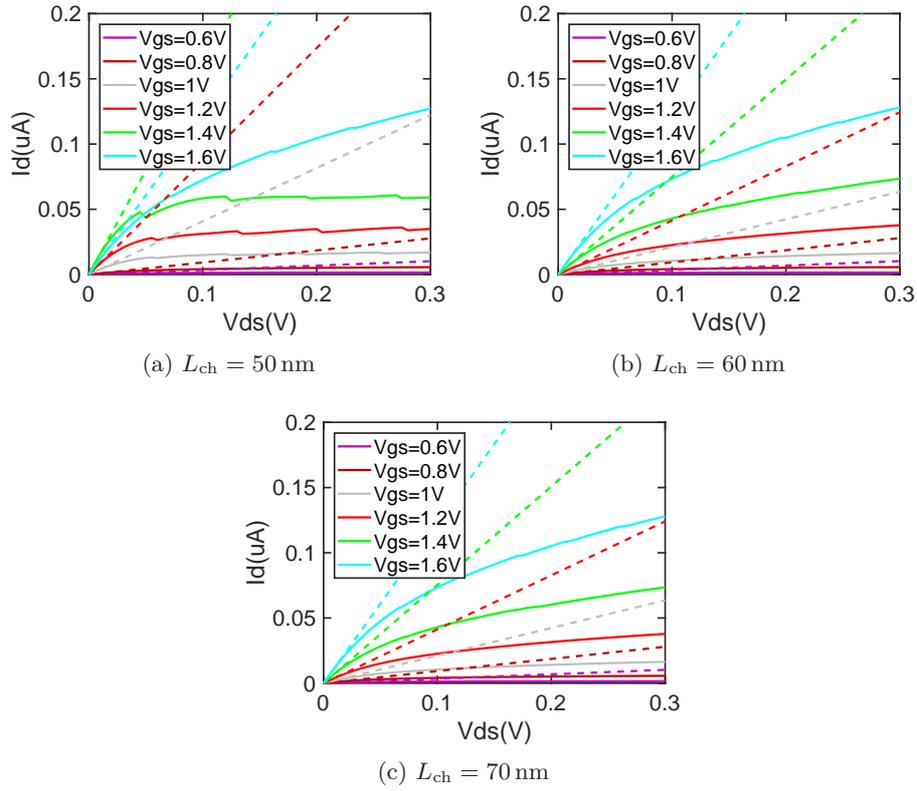


Figura 4.14: Curvas $V_{DS} \times I_D$ para diferentes valores de comprimento do canal $L_{ch} = 50 \text{ nm}/60 \text{ nm}/70 \text{ nm}$

Tabela 4.4: Valores das resistências calculadas para cada comprimento de canal para diferentes valores de V_{GS}

L_{ch} / V_{GS}	0.6 V	0.8 V	1 V	1.2 V	1.4 V	1.6 V
50 nm	29.4 M Ω	10.8 M Ω	2.45 M Ω	1.15 M Ω	0.62 M Ω	0.82 M Ω
60 nm	29.2 M Ω	10.7 M Ω	4.73 M Ω	2.41 M Ω	1.33 M Ω	0.82 M Ω
70 nm	29.2 M Ω	10.7 M Ω	4.72 M Ω	2.42 M Ω	1.32 M Ω	0.82 M Ω

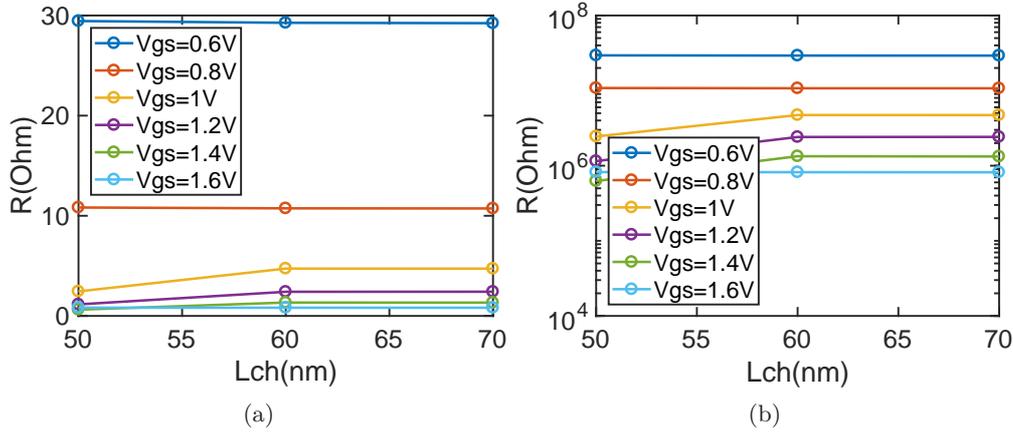


Figura 4.15: Resistência do dispositivo x comprimento de canal em escala linear e em escala logaritmica

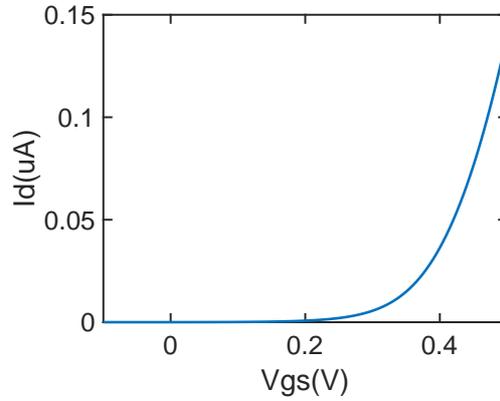


Figura 4.16: Corrente de dreno versus tensão da porta

A Fig. 4.15 mostra a resistência em função do comprimento na escala linear e na escala logaritmica. Para os diferentes valores de comprimento do canal a resistência total tem o mesmo valor. Mostrando a independência desses dois parâmetros, como esperado para dispositivos balísticos que não perdem energia na transmissão pelo canal a resistência não pode ser calculada em função do comprimento do canal. O valor da resistência varia apenas com o valor de V_{GS} .

4.4.3 Método Y

Dado que a resistência do dispositivo não pode ser determinada pelo método da variação do comprimento de canal calcula-se a resistência pelo método Y apresentado na seção 2.8.2. Lembrando que esse método é uma adaptação das equações clássicas para MOSFET e pode não funcionar para transistores quânticos. O dispositivo simulado é simétrico e tem $\phi_{SB} = 0.28$ eV, temperatura $T = 300$ K e tensão de dreno $V_{DS} = 0.2$ V.

Em Fig. 4.16 plota-se a curva $I_D \times V_{GS}$ e obtém-se que o transistor apenas começa a conduzir para valores de tensão da porta maiores que $V_{GS} = 0.42$ V, que por definição é a tensão de limiar V_{th} .

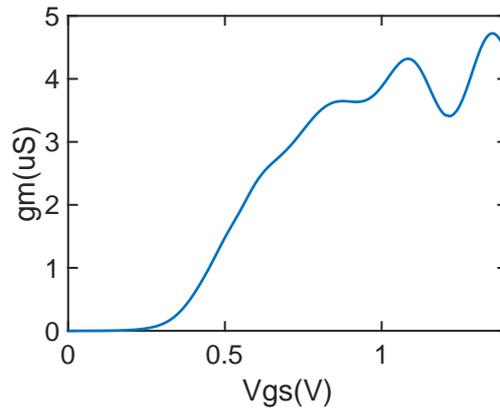


Figura 4.17: Transcondutância g_m variando com V_{GS}

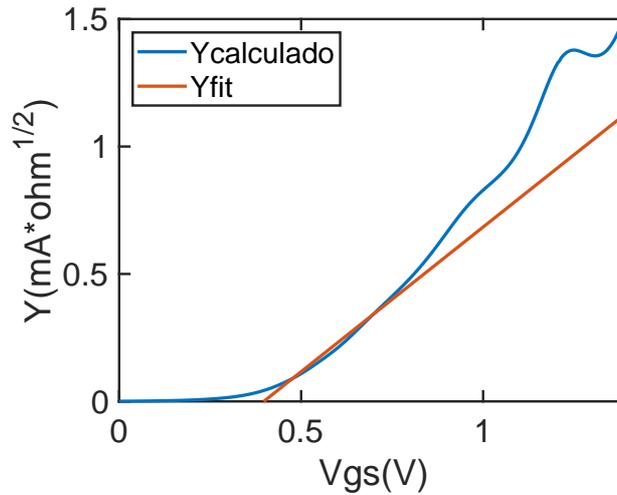


Figura 4.18: Função Y em função da tensão da porta V_{GS}

Seguindo o método, depois é determinada a relação dada na figura 4.17 investigando o perfil da transcondutância variando com a tensão da porta. Para valores de V_{GS} maiores que 1 V a oscilação do valor da transcondutância mostra a possibilidade do uso do mesmo dispositivo para operações com frequências diferentes apenas ajustando o valor de V_{GS} . Para amplificadores de corrente a relação entre a frequência de corte e a transcondutância é determinada por $f_c = g_m/C_G$ em que C_G é a capacitância da porta.

No gráfico da função Y x V_{GS} (figura 4.18), é feita uma extrapolação linear da função, determinando os valores de V_{th} e β como mostrado graficamente em Fig. 2.23. A inclinação nessa simulação determinou o valor de $\beta = 1.43 \times 10^{-5} A V^{-2}$ e a intersecção com o eixo X o valor de $V_{th} = 0.51 V$.

Aplicando os valores obtidos de β e V_{th} para o cálculo da resistência, obtemos o gráfico da variação da resistência total calculada anteriormente (R_{tot}) e da resistência obtida pelo método Y (RY) para diferentes valores da tensão da porta em 4.19. Pelo cálculo do método Y o valor da resistência calculada difere do método anterior em aproximadamente 100% ($R_{tot} = 0.4 M\Omega$ e $RY \approx 0.8 M\Omega$).

Tabela 4.5: Valor da resistência de contato pelo método Y para cada valor de V_{GS}

V_{GS}	Resistência do canal $R_{tot} = R_{ch}$
0.6 V	408 k Ω
0.8 V	169 k Ω
1 V	98.2 k Ω

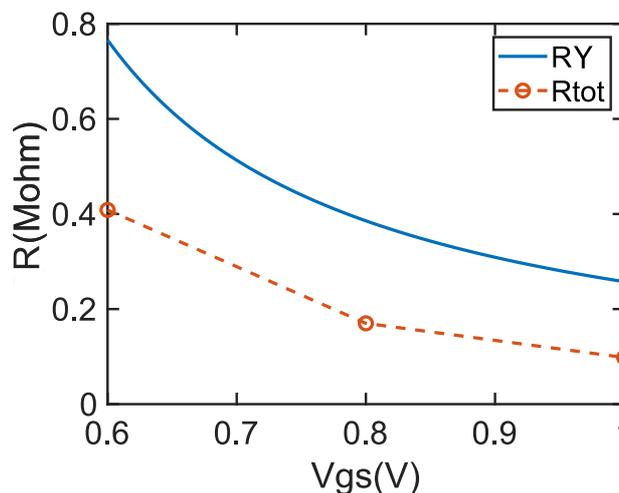


Figura 4.19: Resistência total do dispositivo balístico e resistência do contato

Os valores das resistências determinada pelo método Y são tabuladas em 4.5.

Vemos assim que o modelo de resistência localizada $R_c = R_{tot} - R_{ch}$ como indicado na figura 3.9 não é satisfatório para o nanoFET balístico. E o método Y não calcula precisamente os valores de β e V_{th} devido às oscilações no perfil $gm \times V_{GS}$. Essas oscilações são originadas do fenômeno de ressonância do CNTFET balístico como indicado na figura 2.11. Quando o nível de energia (maior probabilidade de elétrons para conduzir) se alinha com o nível de Fermi do metal a função de probabilidade de transmissão tem um máximo e o fator transcondutância gm diminui. Assim o perfil ondulatorio do elétron além de proporcionar a quantização dos níveis de energia, gera oscilações no perfil da transcondutância.

O nanoFET, como dito no início, se trata de um dispositivo quântico com fenômenos ainda não inteiramente modelados e compreendidos para a caracterização desse dispositivo.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho de estudo computacional da extração da barreira de Schottky para transistores balísticos de carbonanotubos verificou-se a possibilidade de extração de parâmetros do dispositivo por métodos clássicos e novos procedimentos. Utilizando o simulador COOS obtivemos as características I-V e por meio desses resultados, para diversas arquiteturas do nanoFET, calculamos o valor da barreira de Schottky e da resistência do dispositivo.

Os efeitos da ambipolaridade foram eliminados neste estudo e considerou-se apenas a banda de condução para transporte de portadores. A equação de Landauer-Büttiker determinou a solução para a densidade de corrente no nanoFET balístico.

O método auto-consistente para a solução da distribuição de portadores pelo canal utilizou a equação de Schrödinger de massa efetiva. Diferentes modelos de contatos foram investigados, variando o valor da borda da banda de condução E_c e o da massa efetiva do elétron no canal, de modo a observarmos o efeito da variação desses parâmetros nas curvas I-V e conseqüentemente seu impacto na determinação da tensão de banda plana V_{FB} .

Diversas arquiteturas foram simuladas com o mesmo valor de ϕ_{SB} . A arquitetura simétrica não permite a correta extração da altura da barreira de Schottky ϕ_{SB} . Por outro lado, as arquiteturas assimétricas apresentam desvio significativo da linearidade no gráfico $\phi_{SB} \times V_{GS}$ indicando um valor da barreira de Schottky bem próximo do valor real.

Se a resistência de canal não tem uma relação direta com o seu comprimento L_{ch} , o transistor balístico de nanotubo não pode ser modelado como resistências em série localizadas no canal e no contato. O comportamento do transistor balístico quântico ainda precisa ser investigado mais a fundo com a variação de outros parâmetros, como materiais na conexão metal-semicondutor, tensões de polarização, comprimento do contato inserido na porção metálica.

O método Y para a determinação das resistências de contato não fornece valores acurados por causa das oscilações no perfil da transcondutância. Por outro lado essas oscilações possibilitam a tunabilidade do CNTFET para diferentes frequências de operação e de corte.

5.1 Trabalho Futuros

- Encontrar uma relação $R_c(V_{gs})$ parametrizada.
- Definir um método de extração dos parâmetros dessa função para nanoFETs balísticos.
- Determinar a dependência desses parâmetros com as propriedades dos materiais no contato.
- Desenvolver um modelo compacto para nanoFETs balísticos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] W. e. a. ARDEN, ““More-than-Moore” White Paper,” *IEEE J. Electron Devices Soc.*, vol. 501, no. 7, pp. 526–530, 2010.
- [2] <https://www.inovacaotecnologica.com.br/noticias/noticia.php?artigo=primeiro-computador-nanotubos-carbono/>.
- [3] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “The rise of graphene,” *nature materials*, vol. 6, p. 183–191, 2007.
- [4] C. Si, Z. Sun, and F. Liu, “Strain engineering of graphene: a review,” *Nanoscale*, vol. 8, p. 3207–3217, 2016.
- [5] <https://www.sbpmat.org.br/pt/artigo-em-destaque-flocos-de-aluminio-para-producao-de-nanotubos-de-carbono/feixe-nanotubos/>.
- [6] <https://brasilecola.uol.com.br/quimica/nanotubos-carbono.htm>.
- [7] J. D. Cressler, *Silicon Earth: Introduction to the Microelectronics and Nanotechnology Revolution*. Cambridge University Press, 2009, vol. 1.
- [8] A. Pacheco-Sanchez, M. Claus, S. Mothes, and M. Schröter, “Contact resistance extraction methods for short- and long-channel carbon nanotube field-effect transistors,” *Solid State Electron*, vol. 125, pp. 161–166, Nov. 2016.
- [9] G. Santos and S. Blawid, “Computacional study on Schottky barrier Height extraction for ballistic nanotubes ,” *IEEE*, vol. 77, no. 12, p. 4, Aug. 2018.
- [10] H. Ishii, K. Sugiyama, E. Ito, and K. Seki, “Energy level alignment and interfacial electronic structures at organic/metal and organic/organic interfaces,” *Advanced materials*, vol. 11, no. 8, p. 605–625, Jun. 1999.
- [11] B. G. Streetman and S. K. Banerjee, *Solid State Electronic Devices*. Pearson, 2016, vol. 7.
- [12] D. L. Pulfrey, *Understanding modern transistors and diodes*. Cambridge University Press, 2010, vol. 1.
- [13] COOS manual v030i.

- [14] M. Claus, S. Mothes, S. Blawid, and M. Schröter, “COOS: a wave-function based Schrödinger–Poisson solver for ballistic nanotube transistors,” *J Comput Electron*, vol. 13, no. 3, pp. 689–700, Jun. 2014.
- [15] A. Fediai, D. A. Ryndyk, G. Seifert, S. Mothes, M. Claus, M. Schröter, and G. Cuniberti, “Towards an optimal contact metal for CNTFETs,” *Nanoscale*, vol. 8, no. 19, pp. 10 240–10 251, 2016.
- [16] D. K. Schroder, *Semiconductor material and device characterization*. Wiley, 1990, vol. 3.
- [17] M. Claus, “Modeling of Ballistic Carbon Nanotube Transistors for Analog High-Frequency Applications,” Ph.D. dissertation, Technische Universität Dresden, Mar. 2011.
- [18] A. P. Jacob, R. Xie, M. G. Sung, L. Liebmann, R. T. P. Lee, and B. Taylor, “Scaling Challenges for Advanced CMOS Devices,” *International Journal of High Speed Electronics and Systems*, vol. 26, no. 1, Jun. 2017.
- [19] C. H. Angada B. Sachid, Min-Cheng Chen, “FinFET with High-k Spacers for Improved Drive Current,” *IEEE J. Electron Devices Soc.*, vol. 37, no. 7, pp. 835–838, 2016.
- [20] A. M. . M. P. . V. Sharma, “Double gate vertical tunnel FET for hybrid CMOS-TFET based low standby power logic circuits,” in *International Conference on Microelectronics, Communication and Renewable Energy (ICMiCR-2013)*, 2013, pp. 1–4.
- [21] T.-K. Chiang, “A New Threshold Voltage Model for Short-Channel Junctionless Inverted T-Shaped Gate FETs (JLITFET),” *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 15, no. 3, pp. 442–447, 2016.
- [22] S. Iijimi and T. Ichihashi, “Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter,” *Nature*, vol. 363, pp. 603–605, Jun. 1993.
- [23] G. D. R. Saito and M. S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*. London : Imperial College Press, 1998, vol. 1.
- [24] J. Robertson, “Growth of nanotubes for electronics,” *Materials Today*, vol. 10, pp. 36–43, Jan. 2007.
- [25] P. Wong and D. Akinwande, *Carbon Nanotube and Graphene Device Physics*. Cambridge University Press, 2011, vol. 1.
- [26] A. B. Prakash, Sundaram, “A review on carbon nanotube field effect transistors (CNT-FETs)for ultra low power applications,” *IEEE J. Electron Devices Soc.*, vol. 2, no. 4, pp. 44–49, 2014.
- [27] M. Schröter, M. Claus, P. Sakalas, M. Haferlach, and D. Wang, “Carbon Nanotube FET Technology for Radio-Frequency Electronics: State-of-the-Art Overview,” *IEEE J. Electron Devices Soc.*, vol. 1, no. 1, pp. 9–20, 2013.

- [28] A. Bhargav, A. Srinivasulu, and D. Pal, “An Operational Transconductance Amplifiers Based Sinusoidal Oscillator Using CNTFETs,” in *Proc. 23rd International Conference on Applied Electronics*, 2018, pp. 1–6.
- [29] R. Marani and A. Perri, “Static Simulation of CNTFET-based Digital Circuits,” *International Journal of nanoscience and nanotechnology*, vol. 14, p. 121–131, 2018.
- [30] S. M. Max Schulaker, Gage Hills, “Carbon nanotube computer,” *IEEE J. Electron Devices Soc.*, vol. 501, no. 7, pp. 526–530, 2013.
- [31] D.-M. Sun, C. Liu, W.-C. Ren, , and H.-M. Cheng, “A Review of Carbon Nanotube- and Graphene-Based Flexible Thin-Film Transistors,” *Small*, vol. 9, no. 8, p. 1188–1205, Mar. 2013.
- [32] S. Hasan, S. Salahuddin, M. Vaidyanathan, and M. A. Alam, “High-frequency performance projections for ballistic carbon-nanotube transistors,” *IEEE Trans. Nanotechnol.*, vol. 5, no. 1, pp. 14–22, Jan. 2006.
- [33] M. Diarra, Y.-M. Niquet, C. Delerue, and G. Allan, “Ionization energy of donor and acceptor impurities in semiconductor nanowires: Importance of dielectric confinement,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, no. 4, pp. 486–4, Jan. 2007.
- [34] M. T. Bjork, H. Schmid, J. Knoch, H. Riel, and W. Riess, “Donor deactivation in silicon nanostructures,” *Nature Nanotech*, vol. 4, no. 2, pp. 103–107, Jan. 2009.
- [35] U. N. Maiti, W. J. Lee, J. M. Lee, Y. Oh, J. Y. Kim, J. E. Kim, J. Shim, T. H. Han, and S. O. Kim, “25th Anniversary Article: Chemically Modified/Doped Carbon Nanotubes & Graphene for Optimized Nanostructures & Nanodevices,” *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 1, pp. 40–67, Oct. 2013.
- [36] G. Moore, “Progress In Digital Integrated Electronics,” *IEDM Tech Digest*, pp. 11–13, 1975.
- [37] <https://www.maxwell.vrac.puc-rio.br/21808/21808.3.PDi>.
- [38] http://lqes.iqm.unicamp.br/images/vivencia_lqes_monografias_odair_nanotubos_carbono.pdf.
- [39] J. M. Stephanie Reich, Christian Thomsen, *Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties*. Wiley, 2004, vol. 1.
- [40] J. Deng and H.-S. P. Wong, “A compact SPICE model for carbon- Nanotube field-effect transistors including nonidealities and its application—Part II: Full device model and circuit performance benchmarking,” *IEEE Trans. Electron Device*, vol. 54, no. 12, p. 3195–3205, Dec. 2007.
- [41] S. K. Sinha and S. Chaudhury, “Advantage of carbon nannotube field effect transistor (CNT-FET) over double-gate MOSFET in nanometre regime,” in *Proc. Chip on the mountains, Microelectronics Students Forum*, Nov. 2012.

- [42] Y. Che, H. Chen, H. Gui, J. Liu, B. Liu, and C. Zhou, “Review of carbon nanotube nanoelectronics and macroelectronics,” *Semicond. Sci. Technol*, vol. 29, no. 7, Jul. 2014.
- [43] <http://www.lsi.usp.br/bariatto/fatec/ds2/aula12-mosfetcurto.pdf>.
- [44] M. Romero, R. Ragi, and J. E. Manzoli, “Transistores de alta mobilidade eletrônica (HEMTs) Princípios de operação e características eletrônicas,” *Revista brasileira de ensino de física*, vol. 37, p. 4306, 2015.
- [45] W. Spicer, I. Lindau, P. Skeath, and C. Su, “The Unified Model for Schottky Barrier Formation and MOS Interface States in 3–5 Compounds,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 9, p. 89–91, Sep. 1981.
- [46] W. Mönch, “On the Physics of Metal-Semiconductor Interfaces,” *Rep. Progr. Phys.*, vol. 53, p. 221–278, Mar. 1990.
- [47] L. Brillson, “Advances in Understanding Metal-Semiconductor Interfaces by Surface Science Techniques,” *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 44, p. 703–733, 1983.
- [48] J. Robertson and L. Lin, “Fermi level pinning in Si, Ge and GaAs systems - MIGS or defects?” in *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, Dec. 2009.
- [49] J. Bardeen, “Surface states and rectification at a metal semiconductor contact,” *Phys. Rev.*, vol. 71, May 1947.
- [50] S. Roth and D. Carrol, *One-dimensional Metals conjugated polymers, Organic Crystals, Carbon Nanotubes and Graphene*. Wiley, 2004, vol. 3.
- [51] J. Mintmire and C. White, “Universal density of states for carbon nanotubes,” *Phys. Rev. Lett*, vol. 81, no. 12, p. 2506–2509, Dec. 1998.
- [52] J. Knoch and J. Appenzeller, “Tunneling phenomena in carbon nanotube field-effect transistors,” *Phys Status Solidi A*, vol. 205, no. 4, pp. 679–694, 2008.
- [53] S. Blawid, M. Claus, and M. Schroter, “Phenomenological Modeling of Charge Injection - Beyond the Schottky Barrier Paradigm,” *ECS Transactions*, vol. 49, no. 1, pp. 85–92, Oct. 2012.
- [54] A. Pacheco-Sanchez and M. Claus, “Device design-enabled Schottky barrier height extraction for nanoFETs based on the 1D Landauer-Büttiker equation,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 111, no. 16, pp. 163108–6, Oct. 2017.
- [55] D. M. Ventra, *Electrical Transport in Nanoscale Systems*. Cambridge University Press, 2008, vol. 1.
- [56] W. Hoenlein, F. Kreupl, G. Duesberg, A. Graham, M. Liebau, R. Seidel, and E. Unger, “Carbon nanotubes for microelectronics: status and future prospects,” *Materials Science and Engineering*, vol. 23, p. 663–669, Dec. 2003.

- [57] T. Dang, L. Anghel, and R. Leveugle, “CNTFET basics and simulation,” in *International Conference on Design and Test of Integrated Systems in Nanoscale Technology*, Oct. 2006.
- [58] L.-M. Peng, Z. Zhang, and S. Wang, “Carbon nanotube electronics: recent advances,” *Materials Today*, vol. 00, no. 00, pp. 433–4420, 2014.
- [59] M. Claus, A. Fediai, S. Mothes, J. Knoch, D. Ryndyk, S. Blawid, G. Cuniberti, and M. Schroter, “Towards a multiscale modeling framework for metal-CNT interfaces,” in *Proc. Int. Workshop on Computational Electronics*. IEEE, 2014, pp. 1–3.
- [60] Q. Cao, S.-J. Han, G. S. Tulevski, A. D. Franklin, and W. Haensch, “Evaluation of field-effect mobility and contact resistance of transistors that use solution-processed single-walled carbon nanotubes.” *ACS Nano*, vol. 6, no. 7, pp. 6471–6477, Jul. 2012.

ANEXOS

I. DIAGRAMAS ESQUEMÁTICOS

A estrutura de código a seguir foi elaborada e empregada nas simulações do dispositivo simétrico, usando o simulador COOS. No arquivo de entrada, o primeiro bloco é o de definição da estrutura, onde os materiais e suas dimensões são estabelecidos.

```
&REGION_INFOspat_dim = 3coor_sys = ' cart'/
&REGION_DEFreg_mat = ' CONT'mod_name = ' GATE'cont_name = ' gate2'low_xyz = 000upp_xyz =
70e - 95e - 9100e - 9layer = 1/
&REGION_DEFreg_mat = ' OXID'mod_name = ' SiO2'low_xyz = 05e - 90upp_xyz = 70e -
925e - 9100e - 9/
&REGION_DEFreg_mat = ' OXID'mod_name = ' HfO2'low_xyz = 025e - 90upp_xyz = 70e -
955e - 9100e - 9/
&REGION_DEFreg_mat = ' SEMI'mod_name = ' Chan'low_xyz = 10e-925e-950e-9upp_xyz =
60e - 925e - 950e - 9layer = 2/
&REGION_DEFreg_mat = ' CONT'mod_name = ' CC'cont_name = ' source'low_xyz = 025e -
90upp_xyz = 10e - 945e - 9100e - 9layer = 1/
&REGION_DEFreg_mat = ' CONT'mod_name = ' CC'cont_name = ' drain'low_xyz = 60e -
925e - 90upp_xyz = 70e - 945e - 9100e - 9layer = 1/
&REGION_DEFreg_mat = ' CONT'mod_name = ' GATE'cont_name = ' gate'low_xyz = 15e -
930e - 90upp_xyz = 55e - 955e - 9100e - 9layer = 1/
```

No primeiro bloco `®ION_DEF` define-se a estrutura do dispositivo. Porta, contatos, canal, substrato, óxido e suas respectivas dimensões.

```
&RANGE_GRIDdisc_dir = ' x'intv_pnts = 010e - 915e - 920e - 950e - 955e - 960e - 970e -
9intv_diff = 1e - 90.25e - 90.5e - 91e - 90.5e - 90.25e - 91e - 9/
&RANGE_GRIDdisc_dir = ' y'intv_pnts = 05e - 920e - 925e - 930e - 945e - 955e - 9intv_diff =
5e - 91e - 90.5e - 90.5e - 91e - 91e - 9/
&RANGE_GRIDdisc_dir = ' z'intv_pnts = 0100e - 9intv_diff = 10e - 9/
```

No bloco `&RANGE_GRID` os pontos para a solução das equações na forma discreta é determinada. Para uma análise mais acurada a região do dispositivo que envolve transição de materiais precisa de uma discretização em passos menores.

```
&OXIDEmod_name = ' HfO2'eps = 16/
```

Em `&OXIDE` determina-se o material usado no óxido e sua permissividade relativa.

```
&CNTmod_name = ' Chan'd_cnt = 1.3e - 9/
```

Em *&CNT* determinam-se as características do canal tal como seu diâmetro.

```
&CONTACTmod_name = ' CC'con_type = ' schottky'sb_type = ' elec'phi_sb = 0.28/  
&SEMIelec = 1hole = 0temp = 200/  
&BAND_DEFmod_name = ' Chan'type = ' mintmire'alpha = 0/  
&BAND_DEFmod_name = ' CC'type = ' para'band = ' cb'e.0 = -0.8m_eff = 0.075deg = 2/
```

Em *&CONTACT* o contato é definido como ôhmico ou Schottky e o valor da barreira. Em *&SEMI* são determinados parâmetros como a solução com elétrons e lacunas e a temperatura. Em *&BAND_DEF* a estrutura de banda é determinada Mintmire para a região do canal e parabólica para a região dos contatos. A massa efetiva é determinada para a região do contato assim como o valor da banda de condução.

```
&EFMn_iter = 200p_tol = 1e - 7/
```

Em *&EFM* a equação de Schrödinger de massa efetiva determina-se o número máximo de iterações para atingir a convergência

```
&BIAS_DEFdv_max = 0.05/  
&BIAS_INFOcont_name = ' source'bias_fun = ' TAB'bias_val = 0/  
&BIAS_INFOcont_name = ' drain'bias_fun = ' LIN'bias_val = 00.5101/  
&BIAS_INFOcont_name = ' gate'bias_fun = ' TAB'bias_val = 0.8/  
&BIAS_INFOcont_name = ' gate2'bias_fun = ' TAB'bias_val = 0/
```

Em *&BIAS_INFO* determinam-se as tensões de polarização. Nesse caso a função 'LIN' determina uma rampa como entrada e 'TAB' um valor fixo.

```
&OUTPUTname = ' gvgs08e8'elpha_lev = 1inqu_lev = 1band_lev = 1spectrum_lev = 0/
```

Em *&OUTPUT* indicam-se os parâmetros desejados nos arquivos de saída, tais como: nome do arquivo de saída, parâmetros elétricos, quantidades internas, estrutura de banda e função de espectro de energia.