

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики  
наименование кафедры

**Наноразмерный транзистор в рамках полуклассической модели  
независимых электронных уровней.**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 423 группы

направления 11.03.03 «Конструирование и технология электронных средств»  
код и наименование направления

физический факультет

наименование факультета

Маскина Данила Андреевича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

к.ф.-м.н., ассистент  
должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

дата, подпись

Г.В.Савостьянов

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор  
должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

дата, подпись

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2019 г.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
РАЗДЕЛ 1. Полуклассическая модель независимых электронных.....	4
РАЗДЕЛ 2. Программная реализация модели нанотранзистора.....	6
РАЗДЕЛ 3. Транзистор на основе графеновой наноленты.....	10
РАЗДЕЛ 4 Моделирование транзистора на основе графеновой наноленты.....	11
Заключение.....	13
Список литературы.....	14

## ВВЕДЕНИЕ.

Графен представляет собой гексагональную двумерную решётку, образованную из атомов углерода. Из-за необычных механических, термических, электрических и оптических свойств графен стал одним из наиболее перспективных материалов в развитии нанотехнологии и одним из самых популярных у исследователей.

В настоящее время имеется множество статей посвящённые транзисторам, в основе которых лежит графеновая структура. В данной квалификационной работе будет рассмотрен нанотранзистор на базе графеновой наноленты [2], который будет исследован в рамках полуклассической модели независимых электронных уровней.

Целью выпускной квалификационной работы является: построение модели нанотранзистора на базе графеновой наноленты в рамках полуклассической теории независимых электронных уровней.

Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи:

1. Разработка и программная реализация алгоритма вычисления ВАХ для одноуровневого нанотранзистора;
2. Обобщение разработанного алгоритма в рамках полуклассической модели независимых электронных уровней для возможности моделирования устройств с произвольной плотностью электронных состояний в проводящем канале;
3. Построение полноатомной модели устройства, приведённого в работе [2];
4. Вычисление плотности электронных состояний проводящего канала на основе построенной модели в рамках метода неравновесных функций Грина;
5. Вычисление ВАХ в рамках построенной модели и анализ полученных результатов.

## РАЗДЕЛ 1. Полуклассическая модель независимых электронных уровней.

С помощью модели наноразмерного транзистора, схема которого представлена на рисунке 1, будет изучаться полуклассическая модель независимых уровней.

Нанотранзистор состоит из полупроводникового канала, отделенного от металлического затвора слоем изолятора. Области, обозначенные как «исток» и «сток», представляют собой две контактные площадки, которые обладают высокой проводимостью. Сопротивление канала определяет ток, протекающий от истока к стоку, когда между ними приложено электрическое напряжение  $V_D$ . Напряжение на затворе  $V_G$  используется для управления концентрацией электронов в канале и его сопротивлением.

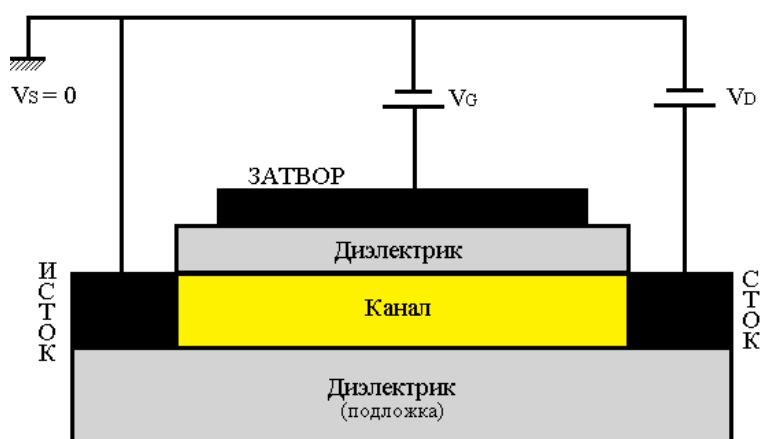


Рис.1. Схема наноразмерного полевого транзистора.

Для того чтобы описать процесс протекание электрического тока, данная модель будет обладать следующими особенностями:

1. Размер канала настолько мал, что траектория движения носителей заряда в нем меньше чем их длина свободного пробега;
2. Материал канала не влияет на его проводимость, а суммарный кондактанс модели будет определяться отношением:

$$G \approx \frac{q^2}{h} = 38.7 \mu S;$$

3. В канале находится один электрон на единственном электронном уровне;
4. Проводимость зависит от характеристик электродов и интенсивности их взаимодействия с каналом, при этом электроды рассматриваются как

источники неограниченной электронной плотности по сравнению с каналом, так как они будут изготовлены из металла;

5. Для появления электрического тока необходимо наличие состояний электронных уровней вблизи  $E = \mu$ , где  $\mu$  – электрохимический потенциал.

### Причины возникновения тока.

Если рассмотреть простую одноуровневую систему (рисунок 2), смещенную таким образом, что ее уровень энергии  $\varepsilon$  находится между электрохимическими потенциалами двух контактов, то можно будет описать процесс установления баланса. Равновесию с первым контактом соответствует функция  $f_1(\varepsilon)$ , тогда как второму контакту –  $f_2(\varepsilon)$ , где  $f_1$  и  $f_2$  – функции Ферми истока и стока, определяемые уравнениями (2(а, б)). Ток  $I_1$  через левый контакт пропорционален  $(f_1 - N)$  и имеет вид:

$$I_1 = \frac{q \cdot \gamma_1}{\hbar} * (f_1(\varepsilon) - N) \quad 1(a)$$

Аналогично, результирующий ток  $I_2$  через правый контакт пропорционален  $(f_2 - N)$  и может быть записан:

$$I_2 = \frac{q \cdot \gamma_2}{\hbar} * (f_2(\varepsilon) - N) \quad 1(b)$$

Где:

$$f_1(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp[(\varepsilon - \mu_1) / (k_B \cdot T)]} = f_0(E - \mu_1) \quad 2(a)$$

$$f_2(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp[(\varepsilon - \mu_2) / (k_B \cdot T)]} = f_0(E - \mu_2) \quad 2(b)$$

Константы  $\gamma_1/\hbar$  и  $\gamma_2/\hbar$  определяют скорости ухода электрона, первоначально заполнявшего уровень  $\varepsilon$  на контакты истока и стока соответственно. Эти величины имеют размерность обратного времени, так что  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  имеют размерность энергии.

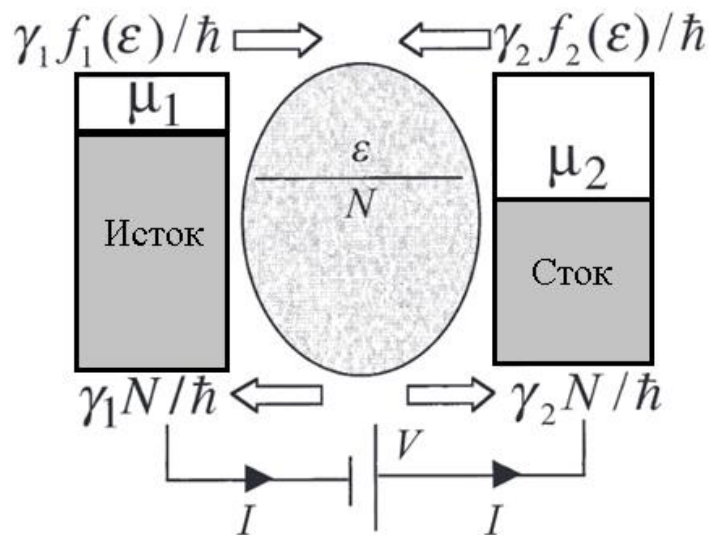


Рис. 2. Входящие и выходящие токи электронов на границах между одноуровневым каналом и истоком и стоком[1]

Теперь рассмотрим ситуацию, когда данная система находится в стационарном состоянии, т.е. когда результирующий поток, направленный внутрь или вне, равен 0:  $I_1 + I_2 = 0$ , и из уравнений 1(а) и 1(б) получим количество электронов  $N$ :

$$N = \frac{\gamma_1 f_1(\varepsilon) + \gamma_2 f_2(\varepsilon)}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (3)$$

Если подставим данный результат в 3(а) и 3(б), получим выражение для тока стационарного состояния:

$$I = I_1 = -I_2 = \frac{q}{\hbar} * \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} * [f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)] \quad (4)$$

Это ток для одной проекции спина. При наличии двух спиновых состояний с одинаковой энергией данную величину тока следует увеличить вдвое.

### Учёт уширения уровня

Чтобы не было противоречий с условием:  $G \approx \frac{q^2}{h} = 38.7 \mu S$ , следует учесть эффект уширения уровня.

С учётом эффекта выражение для силы тока (4) будет выглядеть следующим образом:

$$I = \frac{q}{\hbar} \int_{-}^{+} dE D(E)_{\varepsilon} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)] \quad (5)$$

Выражение для количества электронов (4) с учётом данного эффекта запишется:

$$N = \int_{-}^{+} dE D(E)_{\varepsilon} \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (6)$$

Где:

$$D_{\varepsilon}(E) = \frac{\gamma/2\pi}{(E-\varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (7)$$

### Электростатический потенциал

$$U = U_L + \frac{q^2}{C_E} \Delta N \quad (8)$$

Где  $U_L$  – потенциал канала, который рассчитывается:

$$U_L = \frac{C_G}{C_E} (-qV_G) + \frac{C_D}{C_E} (-qV_D) \quad (9)$$

## РАЗДЕЛ 2. Программная реализация модели нанотранзистора.

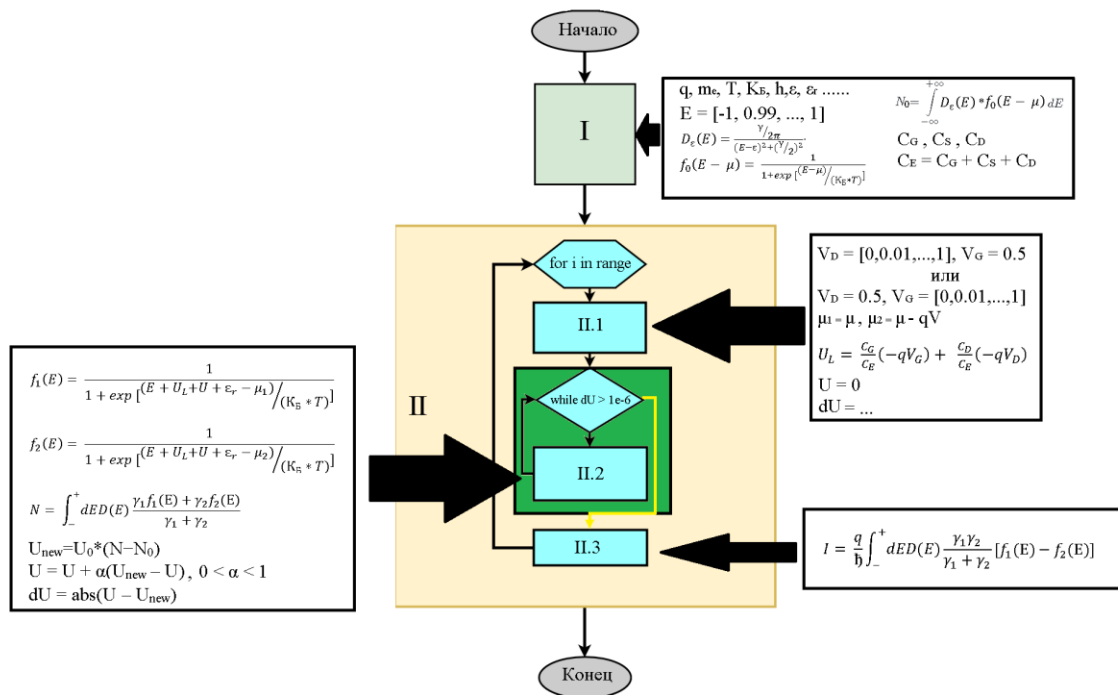


Рис. 3. Блок – схема алгоритма расчёта.

Алгоритм представленный блок – схемой (рисунок 3) был разделён на две зоны.

В первой зоне:

- объявляются переменные для расчёта;
- строится одномерный массив со значениями энергии;
- происходит расчёт:
  - o функции Ферми  $f_0(E)$ ;
  - o плотности электронных состояний  $D(E)$ ;
  - o Емкостей  $C_G, C_S, C_D, C_E$ ;
  - o Начального количества электронов  $N_0$ .

Во второй зоне уже происходит расчёт ВАХ транзистора, а именно:

- в под зоне II.1:
  - o задаётся массив по напряжению на стоке и постоянное значение напряжения на затворе или наоборот в зависимости какую характеристику нужно получить;
  - o подсчёт электрохимических потенциалов исток и стока;
  - o расчёт потенциала канала;
  - o указывается условие самосогласованного поля ( $U = 0$ ), а также переменную  $dU$  для самосогласованного расчёта.
- в под зоне II.2:
  - o вычисление:
    - функций ферми  $f_1$  и  $f_2$ ;



- количество электронов;
  - потенциал
  - перерасчёт переменной  $dU$ .
- в под зоне II.3 происходит расчёт силы тока.

Моделирование одноуровневого транзистора производилась на языке Python с использованием библиотек Numpy и Scipy. Результаты моделирования показаны на рисунке 4.

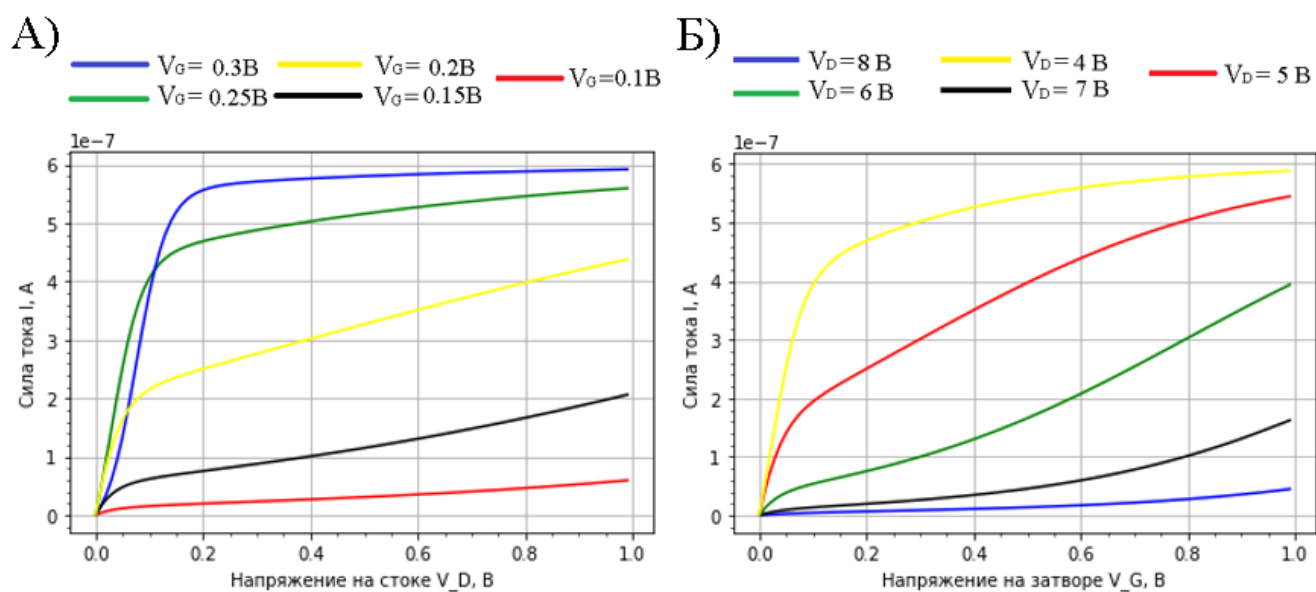


Рис. 4. ВАХ воспроизведённой модели наноразмерного транзистора: а) Зависимость силы тока от напряжения на стоке при фиксированных значениях напряжения на затворе; б) Зависимость силы тока от напряжения на затворе при фиксированных значениях напряжения на стоке.

### РАЗДЕЛ 3. Транзистор на основе графеновой наноленты.

Во втором разделе пойдет речь о статье “Transport Properties of Graphene Nanoribbon Transistors on Chemical-Vapor-Deposition Grown Wafer-Scale Graphene”. В ней описывается наноразмерный полевой транзистор, метод его изготовления и результаты, полученные входе измерений.

На рисунке 5 представлено схематическое 2D изображение нанотранзистора (а)–вид сверху; (б)–в разрезе. Данное устройство изготовленный с помощью электронно-лучевой литографии. Исток сделан из хрома (Cr), сток – из золота (Au). Канал (рисунок 5(в)) в этом устройстве представлен графеновой лентой длиной около микрона и шириной 12 нм, которая соединена с обеих сторон с листами графена шириной от 12нм до нескольких микрон при помощи линейной литографической вспышки. Electroды располагаются поверх листов графена. Вся конструкция находится на подложке, сделанной из диоксида кремния( $\text{SiO}_2$ ) толщиной 90нм. Сверху покрыта водородом силесквиоксаном (HSQ).

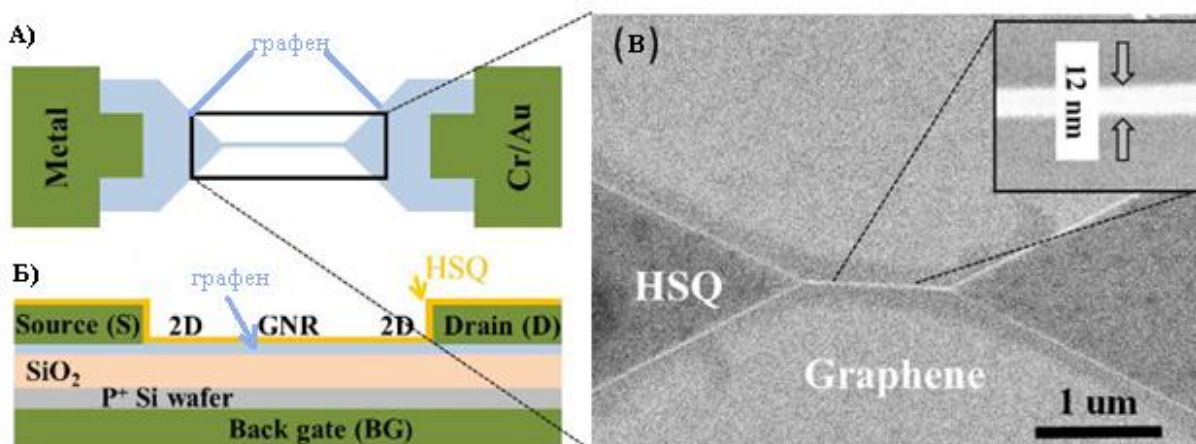


Рис.5 (а) – Схематическое изображение транзистора вид сверху; (б) – в разрезе; (в) – изображение канала, полученное электронным микроскопом [2].

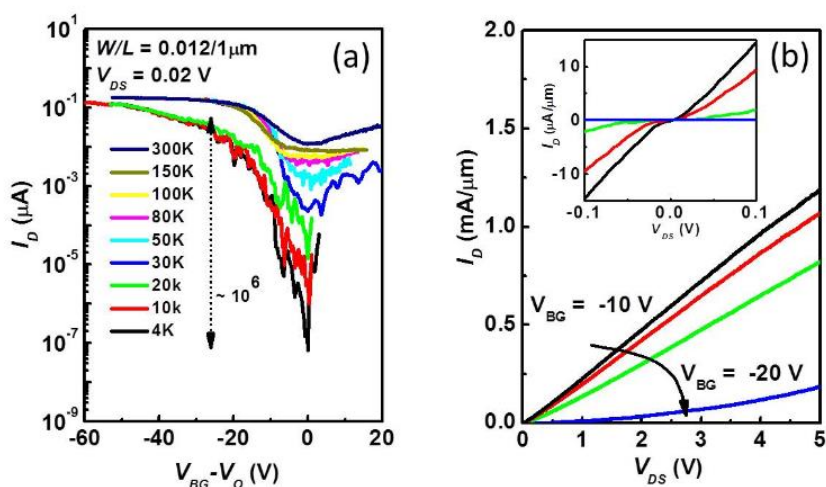


Рис.5. Транспортные свойства транзистора шириной 12 нм. (а) Зависимость тока стока от напряжения на затворе и от температуры; (б) Зависимость тока стока от напряжения на стоке при фиксированных значениях напряжения на затворе при 4 К [2].

#### РАЗДЕЛ 4 Моделирование транзистора на основе графеновой наноленты.

Модель канала, представленная на рисунке 6, была спроектирована в программном пакете KVAZAR. Количество атомов используемой моделью составляет 17206.

Область, выделенная красным цветом, транслируется влево и вправо для достижения необходимой длины ленты. В данном случае рассматривалась нанолента длиной около 900 нм. Вектор трансляции по  $x$  составляет  $4.26\text{\AA}$ . По бокам указаны “трапецевидные” листы графена определённого размера, которые влияют на конечный вид DOS. С обеих сторон структура прикреплена к графеновым листам, которые транслируются в бесконечность.

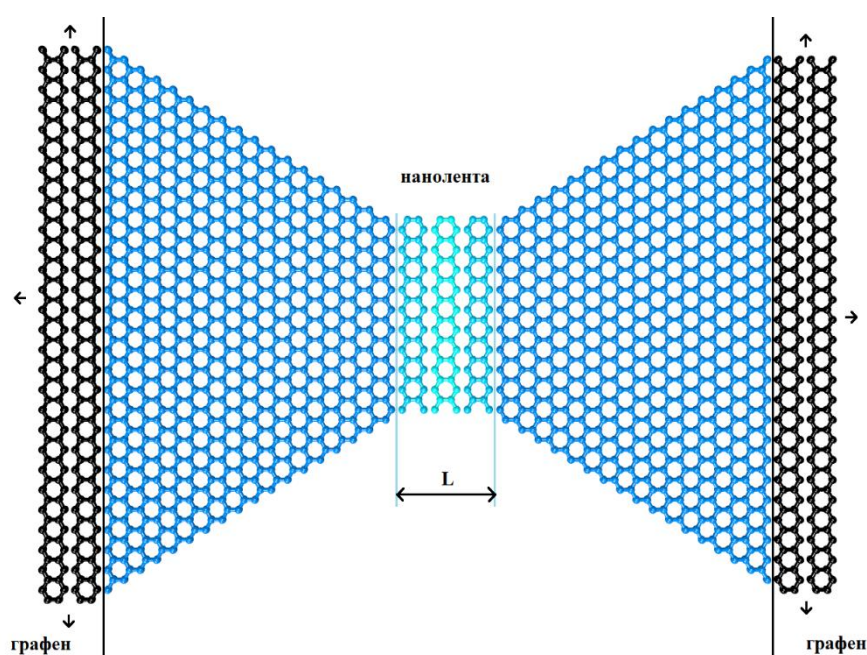


Рис. 6. Модель канала, сделанная в программном пакете KVAZAR.

Вычисления плотности электронных состояний проводились с помощью программного пакета MIZAR. Для расчёта данное ПО использует функции Грина.

Произвел вычисления DOS для графеновой наноленты шириной 12 нм и длиной  $\sim 900\text{ нм}$ . Результат представлен на рисунке 7.

DOS полученный ранее для канала наноразмерного транзистора был интерполирован с помощью библиотеки Scipy модуля interpolate метод Akima(рисунки 8).

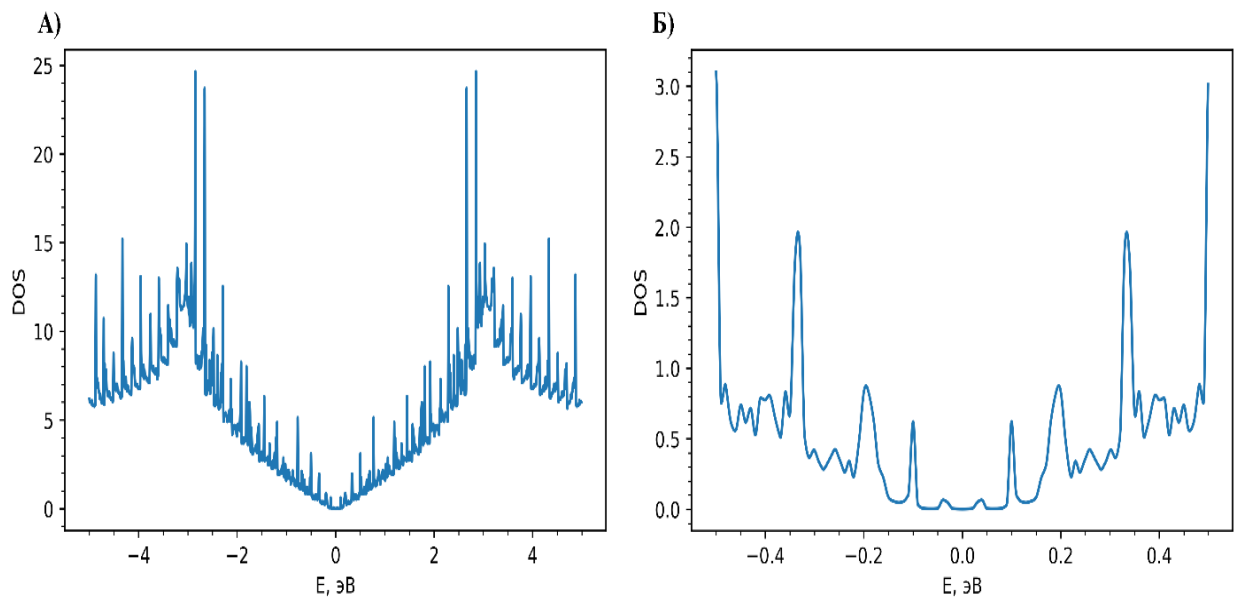


Рис. 7. DOS графеновой ленты: А) – полный вид; Б) – масштабированный вид

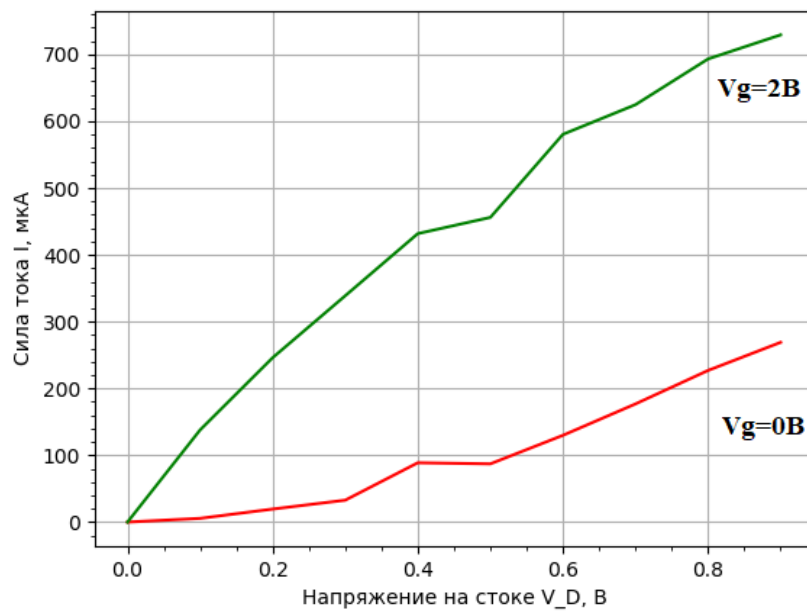


Рис. 8. ВАХ модели нанотранзистора при фиксированных значениях напряжения затвора.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выпускной квалификационной работы был разработан алгоритм вычисления ВАХ для одноуровневого нанотранзистора, а затем реализован на языке программирования Python. Затем данный алгоритм был обобщён для возможности моделирования устройств с произвольной плотностью электронных состояний.

Построена полноатомная модель устройства, приведённого в работе [2] в программном пакете KVAZAR. Вычислена плотность электронных состояний проводящего канала на основе построенной модели в рамках метода неравновесных функций Грина с использованием ПО MIZAR.

Вычислена ВАХ в рамках построенной модели. К сожалению, добиться количественного совпадения с экспериментальными результатами не удалось, но построенная модель имеет ту же величину запрещённой зоны и демонстрирует переключающий эффект.

## Список используемой литературы

- 1) С. Датта. Квантовый транспорт от атома к транзистору. –М., –Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2009. -532 с.
- 2) Wan Sik Hwang, Kristof Tahy, Xuesong Li, Huili (Grace) Xing, Alan C. Seabaugh, Chun Yung Sung, and Debdeep Jena/ Transport Properties of Graphene Nanoribbon Transistors on Chemical-Vapor-Deposition Grown Wafer-Scale Graphene / Department of Electrical Engineering, University of Notre Dame, Notre Dame/ -8 с
- 3) О.Е. Глухова, А.С. Колесников, Г.В. Савостьянов. ПО “KVAZAR” платформа для прогностического моделирования в области нано- и биомедицинских технологий. Саратов: Саратовский источник, 2015.
- 4) О.Е. Глухова, Г.В. Савостьянов. Многопроцессорный программно-информационный комплекс моделирования молекулярных систем для супер-ЭВМ “MIZAR”. Свид№201661289. РФ. 2016
- 5) Ryndyk D. A.Theory of Quantum Transport at Nanoscale. An Introduction. —Springer International Publishing AG, 2016. — 246 pp. — (Springer Series inSolid-State Sciences)