

## MÔ PHỎNG MỘT SỐ ĐẶC TÍNH CỦA TRANSISTOR ỚNG NANO CACBON

Đinh Sỹ Hiền <sup>(1)</sup>, Thi Trần Anh Tuấn <sup>(2)</sup>, Nguyễn Thị Lương <sup>(3)</sup>

(1) Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, ĐHQG-HCM

(2) Trường Đại học Trà Vinh.

(3) Trường Sư phạm Kỹ thuật Tp. Hồ Chí Minh.

*(Bài nhận ngày 13 tháng 12 năm 2008, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 07 tháng 07 năm 2010)*

**TÓM TẮT:** Chúng tôi đưa ra mô hình CNTFET đồng trục, dùng ống Nano Cacbon (CNT) dạng đơn tường làm kênh dẫn. CNTFET có cổng hình trụ bao quanh ống CNT. Để mô phỏng về đặc tính dòng-thế của CNTFET, chúng tôi dùng thuật toán hàm Green (NEGF). Chương trình sử dụng giao diện GUI trong Matlab là phương tiện để tính toán và trình bày kết quả. Thêm vào đó, những ảnh hưởng của các thông số liên quan đến đặc trưng dòng thế như: đường kính, chiều dài CNT, độ dày cổng Oxit, những loại vật liệu làm nguồn-máng, thế cổng  $V_g$ , nhiệt độ, cũng được mô phỏng. Đặc tuyến dòng-thế cũng được trình bày bằng biểu thức giải tích.

**Keywords:** ống Nano Cacbon, transistor

## 1. MỞ ĐẦU

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

Vấn đề chế tạo sẽ đóng vai trò quyết định cuối cùng trong công nghệ điện tử CNT tương lai. Hiện nay, khó có thể nói trước CNTFET sẽ

đóng vai trò gì trong các hệ thống điện tử tương lai, nhưng những linh kiện này tạo điều kiện đặc biệt để phát triển công nghệ và hiểu sự vận chuyển, tiếp xúc, giao diện là hết sức quan trọng cho điện tử CNT nói chung.

Trong công trình này chúng tôi bắt đầu bằng tóm lược những tiến bộ trong công nghệ CNTFET. Chúng tôi mô tả ngắn gọn tiếp cận mô phỏng linh kiện. Một mô hình CNTFET đồng trục được hiện thực. Ở đây, chúng tôi tổng quan các khả năng của bộ mô phỏng. Những mô phỏng điển hình về đặc trưng dòng thế của CNTFET cũng như những thay đổi của đặc trưng này theo thế thiên áp, loại vật liệu và nhiệt độ được trình bày. Để mô phỏng đặc tính dòng-thế của CNTFET, chúng tôi dùng thuật toán hàm Green không cân bằng (non-equilibrium Green function, NEGF). Chương

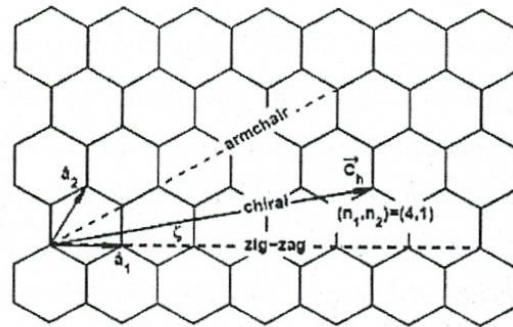
trình sử dụng giao diện GUI trong Matlab là phương tiện để tính toán và trình bày kết quả.

## 2. MÔ HÌNH VÀ MÔ PHỎNG CNTFET

### 2.1. Tính chất của ống nano cacbon

CNT có cấu tạo như một lá graphen cuộn tròn lại đường kính chỉ vào cỡ vài nanomet, dài

đến vài micromet, gồm hai loại đơn tường và đa tường [1]. Mặt ngoài, cơ bản là các nguyên tử Cacbon liên kết với nhau rất chặt bằng liên kết đồng hoá trị. Mỗi nguyên tử Cacbon có ba mối liên kết nối với ba nguyên tử Cacbon khác, từ đó tạo ra các hình lục giác.



**Hình 1.** Cấu trúc hình học của CNT. Các giá trị  $n_1, n_2$  tương đương với số nguyên  $m, n$  ở công thức (1) [2].

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

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

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

với :  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  là các vec tơ chỉ phương hướng. Khi  $m = 0$ , cấu trúc CNT là dạng zig-zag (bán dẫn). Khi  $m = n$ , cấu trúc CNT là dạng ghê bành (kim loại). Khi  $m \neq n$ , cấu trúc CNT là hình chieác ghê. Công thức về bán kính của CNT được cho bằng:

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

với  $a_{cc} = 1.42.10^{-10} m$  là khoảng cách của hai nguyên tử cacbon kề nhau. Hàm phân bố mật độ trạng thái (DOS) 1D trong CNT kim loại là hằng số và được cho bằng

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

với  $|t| = 3eV$  là năng lượng liên kết của các nguyên tử cacbon. Hàm phân bố mật độ trạng thái (DOS) 1D trong CNT bán dẫn được cho bằng

$$D(E) = 2x2x \frac{1}{L} \sum \delta[E - E'(\Delta k_r)] = D_0 \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - (E_g/2)^2}} \Theta(|E| - E_g/2) \quad (4)$$

với:  $\Theta(x) = \begin{cases} =1 & \text{ khi } x > 0 \\ =0 & \text{ khi } x < 0 \end{cases}$  và  $D_0 = \frac{8}{3\pi a_{cc}|t|}$  là hằng số

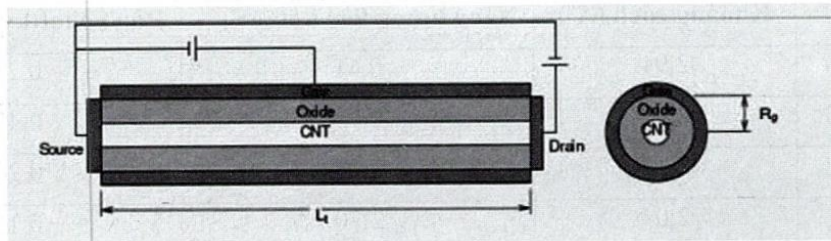
Năng lượng  $E_g$  được tính bằng

$$E_g = \frac{a_{cc}|t|}{2R_f} = \frac{2a_{cc}|t|}{d} = \frac{0.8 eV}{d} \quad (5)$$

## 2.2. Mô hình CNTFET đồng trục

Mô hình CNTFET đồng trục được trình bày trên hình 2 [2]. Về vật liệu, nguồn-máng làm bằng kim loại như Au, Pd hoặc Pt. Người ta thường cho chiều dài cổng oxit cách điện

bằng với chiều dài kênh dẫn (ở đây là chiều dài CNT). Một lớp điện môi oxit sẽ được phủ quanh CNT, người ta thường chọn vật liệu như  $Al_2O_3$ ,  $ZrO_2$ ,  $HfO_2$ ,  $TiO_2$ ,  $SrTiO_3$ . Số liệu về CNTFET đã được công bố theo tài liệu [3] được liệt kê trong bảng 1.



Hình 2. Mô hình CNTFET kênh n với ống CNT đơn tường, dạng zig zắc và đồng trục [2].

Bảng 1. Số liệu của các tác giả về mô hình CNTFET [3].

Tác giả	Vật liệu (K)	t (nm)	d (nm)	$C_g$ (pF/cm)	$g_m$ ( $\mu S$ )	$V_{ds}$ (V)	$g_m/d$ ( $\mu S/\mu m$ )
Bachtotch	$Al_2O_3$ (5)	2-5	1	0,7-1,0	0,3	-1,3	300
Appenzeller	$HfO_2$ (11)	20	1-2	1,1	0,6	-1,5	300-600
This work	$SrTiO_3$ (175)	20	1,0	3,4	8,9	-0,8	8900
Javey	$ZrO_2$ (25)	8	2	2,3	12	-1,2	6000
Nihey	$TiO_2$ (40-90)	2-3	1,5	3,0	8,7	-1	5800
Javey	$HfO_2$ (20)	8	2,3	1,7	20	-0,5	10000

với: K - hằng số điện môi tương đối của cổng oxit, t - độ dày cổng oxit, d - đường kính CNT,  $C_g$  - tụ cổng oxit,  $g_m$  - độ dẫn,  $V_{ds}$  - thế nguồn- máng,  $g_m/d$  - độ dẫn tính trên đơn vị  $\mu m$

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

$$C_g = \frac{2\pi k \epsilon_0 L}{\ln\left(\frac{r+t_{ox}}{r}\right)} = \frac{2\pi k \epsilon_0 L}{\ln\left(1+\frac{t_{ox}}{r}\right)} \quad (6)$$

với  $L$  là độ dài của ống CNT, tương đương với độ dài cổng oxit,  $\epsilon_0 = 8,854.10^{-12}$  F/cm (hằng số điện môi trong chân không),  $k$  là hằng số điện môi tương đối của vật liệu cách điện. Bán kính ngoài của bản tụ sẽ bằng  $(t_{ox} + r)$ . Bán kính trong của bản tụ là bán kính  $r$  của CNT.

Công thức (6) được tính gần đúng bằng

$$C_g = \frac{2\pi k \epsilon_0 L}{\ln(2t_{ox}/r)} \quad (7)$$

Để mô tả tính chất lượng tử của CNT khi cho tiếp xúc với nguồn và máng, người ta đã đưa ra mô hình rào thế. Ảnh hưởng của rào thế sẽ liên quan đến xác suất của điện tử qua rào. Rào thế xuất hiện ở các lớp tiếp xúc giữa vật liệu kim loại dùng làm nguồn - máng và CNT là rào Schottky. Vấn đề tiếp xúc giữa kim loại-bán dẫn (gọi là tiếp xúc rào Schottky) thường thấy trên chất bán dẫn loại n. Do đó, ta chú ý xét CNTFET loại này (bảng 2).

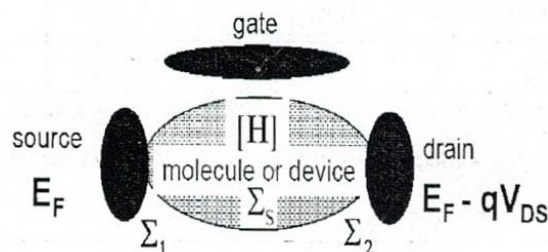
**Bảng 2.** Độ cao rào thế Schottky giữa vật liệu (Au, Pd, Pt) và CNT [4]

Kim loại	Khoảng cách (Å <sup>0</sup> )	Năng lượng liên kết (eV)	Rào Schottky (eV)
Au (1 1 1)	2,91	0,61	0.23
Au (1 0 0)	2,40	0,74	0.42
Pd (1 1 1)	2,12	2,00	0.26
Pd (1 0 0)	2,04	2,70	0.15
Pt (1 1 1)	2,12	1,69	0.35
Pt (1 0 0)	2,10	2,30	0.29

### 2.3. Thuật toán hàm Green không cân bằng

Có nhiều phương pháp để giải phương trình Schrodinger- Poisson. Một phương pháp mới, rất hữu hiệu bao hàm việc giải Schrodinger- Poisson, với việc kết hợp tìm thế cho CNT. Sau đó, tìm mối liên quan đến xác

suất truyền và tính được dòng qua nguồn-máng. Đó là thuật toán hàm Green không cân bằng NEGF (non-equilibrium Green function). Thuật toán này thường được áp dụng cho việc mô phỏng các linh kiện điện tử ở kích thước Nano.



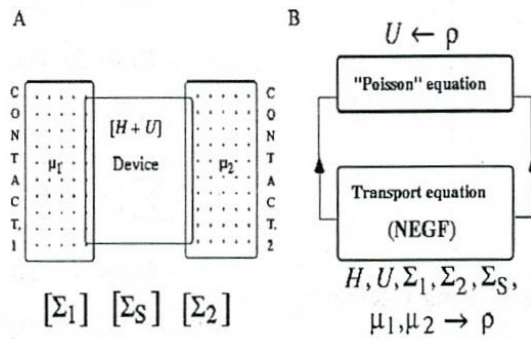
**Hình 3.** Mô hình NEGF cho Transistor

Mô hình thuật toán được trình bày trong hình 3. Hai vấn đề trọng yếu của thuật toán là: thứ nhất, đưa ra khái niệm, để xác định một ngôn ngữ riêng cho chuyển dời của các điện tử hoặc là dạng đạn đạo, hoặc là dạng tán xạ, ứng với mỗi chuyển dời là các phương trình toán học riêng. Thứ hai thuật toán với những công thức xây dựng dạng ma trận. Các thông số đưa vào theo thực nghiệm là các thông số gián đoạn, nhưng việc vẽ ra các đáp tuyến đòi hỏi phải liên tục. Vì vậy, việc xây dựng các

phương trình để mã hóa từ rời rạc sang liên tục, ứng dụng công cụ Matlab để tính toán là cơ sở hỗ trợ quan trọng cho thuật toán này [6].

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

$$H = -(\hbar/2m)\Delta^2 \quad (8)$$



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

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

$$[H + U]\Psi_\alpha(r) = \varepsilon_\alpha \Psi_\alpha(r) \quad (9)$$

Hàm phân bố Fermi được xây dựng:

$$f_0(E - \mu) = (1 + \exp[(E - \mu)/k_B T])^{-1} \quad (10)$$

$\mu$  tương đương với mức năng lượng Fermi ở nguồn và máng là  $\mu_1, \mu_2$ .

Có hai thuyết chuyển dời điện tử trong CNT: đạn đạo và tán xạ. Về ý nghĩa vật lí, điện

tử chuyển dời đạn đạo nghĩa là di chuyển với đường đi vòng cung, ít va chạm với các nút mạng hay các điện tử khác, động năng của điện tử gần như được bảo toàn suốt quá trình di chuyển.

Hàm Green  $G(E)$  trong thuyết đạn đạo được tính bằng [6]:

$$[G(E)] = [(E + i0^+)I - H_L]^{-1} \quad (11)$$

Ở hai mức Fermi khác nhau:

$$G(E) = [(E + i0^+)I - H - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \quad (12)$$

Tán xạ về mặt vật lí, các điện tử tương tác với nhau, trao đổi cho nhau một năng lượng nào đó. Các điện tử chuyển dời không liên tục,

chúng va chạm nhau tại các cực nguồn, máng (bao gồm va chạm đàn hồi và không đàn hồi) [6]. Hàm Green được mô tả cho tán xạ như sau:

$$G(E) = [(E + i0^+)I - H - \Sigma_1 - \Sigma_2 - \Sigma_S]^{-1} \quad (13)$$

Chúng tôi chọn thuyết chuyển dời đạn đạo để mô phỏng (độ dài CNT từ 20 nm đến 300 nm) nghĩa là cho  $\Sigma_S = 0$ .

### Tính toán các thông số mô phỏng

- **Bước 1:** Tính ma trận toán tử Hamilton.

Ma trận biểu diễn dạng  $n \times n$ .

$$H = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2^+ & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_1 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_2 & & \\ & & \beta_2^+ & \alpha_4 & \beta_2 & \\ & & & \beta_1 & \alpha_5 & \dots \\ & & & & & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (14)$$

Ở đây  $\alpha_i$  mô tả kết nối giữa vòng Cacbon thành phần,  $\beta_i$  mô tả kết nối các vòng Cacbon kề nhau.  $\alpha_i$  là ma trận đường chéo chính, phụ thuộc thể thành phần  $U_i$  trên CNT.

Ta có:  $\alpha_i = U_i \times I, \beta_1 = t \times I$

và

$$[\beta_2] = t \begin{bmatrix} 1 & \dots & \dots & 1 \\ 1 & 1 & & \\ & & 1 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (15)$$

với  $I$  là ma trận đơn vị và  $|t| = 3eV$  là năng lượng liên kết.

- **Bước 2:** Tính ma trận  $\Sigma_1, \Sigma_2$ , được xem là điều kiện biên của phương trình Schrodinger-Poisson. Ma trận cho các mức năng lượng ở nguồn-máng như sau:

$$\Sigma_s = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

với:  $\Sigma_{11}$  là ma trận con, tương tự cho  $\Sigma_D$

Ta viết lại hàm Green:

$$G = [(E + i0^+)I - H - \Sigma_s - \Sigma_D]^{-1}$$

Tiếp theo, tính hàm Gamma mô tả mức năng lượng tương tác ở nguồn hoặc máng:

$$\Gamma_{S(D)} = i(\Sigma_{1(2)} - \Sigma_{1(2)}^+)$$

- **Bước 3:** Hàm truyền  $T(E)$  sẽ được tính:

$T(E) = Trace(\Gamma_S G \Gamma_D G^+)$ ; (các ma trận  $\Sigma_{1(2)}^+, G^+$  là ma trận chuyển vị)

- **Bước 4:** Từ hàm truyền, kết hợp với hai hàm Fermi cho nguồn và máng, ta có biểu thức dòng giữa nguồn và máng,  $I_{ds}$ . Công thức tính dòng này còn được gọi là công thức Landauer [6].

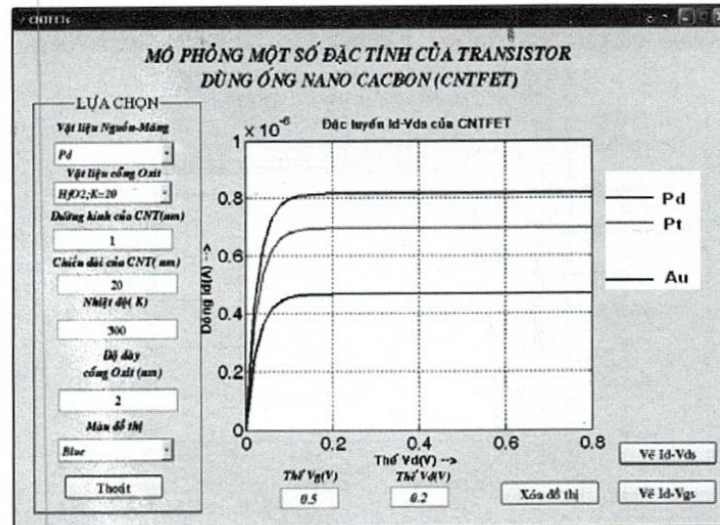
$$I = \frac{2q}{h} \int T(E) [f_S(E) - f_D(E)] dE \quad (16)$$

Ở đây,  $h$  là hằng số Plank.

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

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

Hình 5 trình bày ảnh hưởng của vật liệu làm nguồn máng tới đặc trưng  $I_d-V_d$  của CNTFET đồng trục.



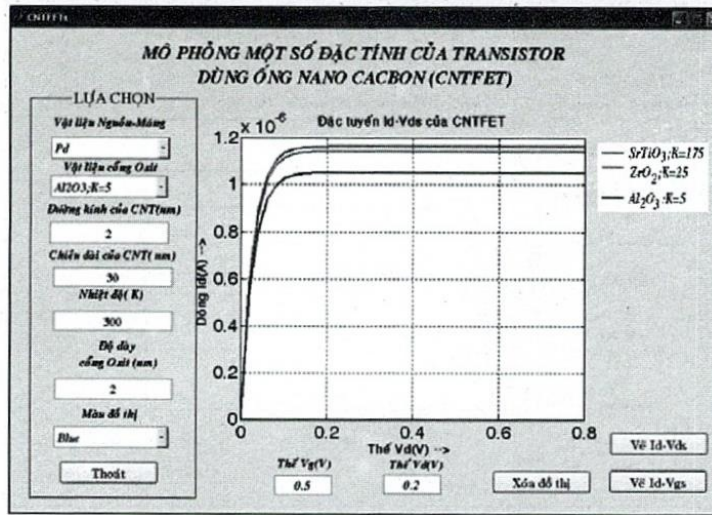
Hình 5. Đặc trưng  $I_d$ - $V_d$  với vật liệu nguồn – máng là Au, Pt và Pd. Thế cổng  $V_g = 0,5$  V, nhiệt độ là 300 K.

Vật liệu làm nguồn-máng thường dùng là kim loại. Trong mô hình, chúng tôi sử dụng ba kim loại chính đó là: Au, Pd và Pt. Độ cao rào thế Schottky theo thứ tự  $Au > Pt > Pd$ , có thể đoán được số điện tử vượt rào đối với nguyên liệu  $Pd > Pt > Au$ .

Từ hình 5, rõ ràng rằng dòng  $I_d$  của nguyên liệu Au là thấp nhất khoảng  $0,48 \mu A$ , của Pt là gần khoảng  $0,7 \mu A$ , và của Pd là khoảng  $8,2 \mu A$ .

So sánh 3 kết quả này, kết hợp với bảng 1, cho 3 loại vật liệu Au (1 0 0), Pt (1 0 0), Pd (1 0 0) với 3 mức rào lần lượt là  $0,42$  eV,  $0,29$  eV và  $0,15$  eV tương ứng. Ta nhận thấy kết quả khá phù hợp.

Dòng  $I_d$  hoạt động của CNTFET ở mức micro Ampe ( $10^{-6}$  A). Thế chuyển của CNTFET là khoảng  $0,18$  V –  $0,2$  V. Từ  $0,2$  V trở đi, CNTFET ở trạng thái dẫn ổn định, dẫn đến bão hòa. Chính xác suất truyền  $T(E)$  ảnh hưởng đến sự thay đổi đột ngột về dòng. Ban đầu, khi thế áp vào nhỏ, thì độ chênh lệch mức năng lượng giữa nguồn - CNT hay CNT - máng là ít nên dòng tăng dần. Đến khi thế  $V_d$  tăng gần  $0,18$  V thì độ chênh lệch hai mức Fermi giảm dần và đi đến cân bằng, khi đó dòng  $I_d$  sẽ bão hòa ở thế ngưỡng khoảng  $0,2$  V. Nguồn nuôi ở mức từ  $0,8$  V đến  $1$  V là đủ để CNTFET hoạt động.



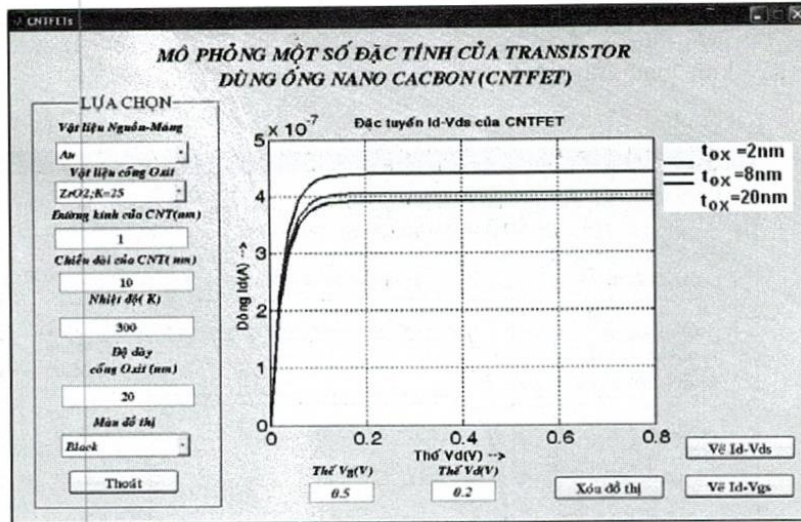
Hình 6. Đặc trưng  $I_d-V_d$  với vật liệu cổng oxit thay đổi  $Al_2O_3$  ( $K = 5$ );  $ZrO_2$  ( $K = 25$ );  $TiSrO_3$  ( $K = 175$ )

Hình 6 trình bày sự phụ thuộc của đặc trưng  $I_d-V_d$  vào vật liệu oxit cổng. Vật liệu làm cổng oxit được chọn sao cho khi đặt thế cổng  $V_g$  vào sẽ tạo ra độ dẫn cao cho kênh dẫn. Một số chất thường chọn là  $SiO_2$ ,  $HfO_2$ ,  $Al_2O_3$ . Từ hình 6 ta thấy rằng hằng số điện môi càng cao thì dòng càng tăng, phù hợp với công thức (7). Độ dày cổng oxit được chọn cho phù hợp với vật liệu của chất làm cực cổng. CNTFET có thể

hạ độ dày cổng oxit gần 2 nm. Độ dày oxit có thể biến thiên từ 2 nm – 20 nm. Từ hình 7, ta thấy khi độ dày cổng oxit tăng thì dòng giảm và ngược lại.

Khi chế tạo, người ta cố gắng hạ thấp độ dày oxit cổng đến mức tối ưu. Tuy nhiên, độ dày oxit quá nhỏ thì tụ điện cổng sẽ bị đánh thủng, khi đó ta chú ý vấn đề dòng rò. Người ta thường chọn  $ZrO_2$  làm vật liệu cổng oxit.

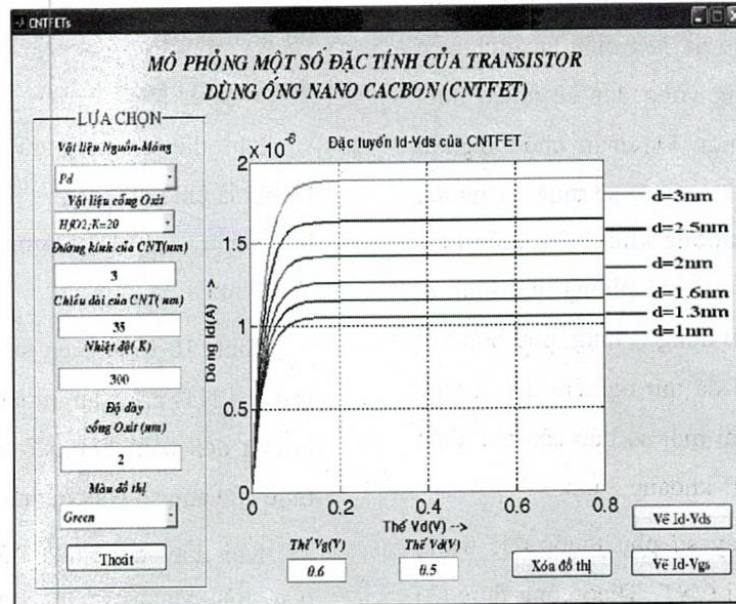




Hình 7. Đặc trưng  $I_d$ - $V_d$  với nguồn – máng là Au, cổng Oxit  $ZrO_2$ ( $K = 25$ ), độ dày cổng oxit thay đổi lần lượt là  $t_{ox} = 2$  nm,  $t_{ox} = 8$  nm và  $t_{ox} = 20$  nm

Hình 8 trình bày sự phụ thuộc của đặc trưng dòng thế CNTFET vào loại đường kính CNT. Chúng tôi khảo sát ống nano đơn tường

có đường kính trong khoảng từ 1 nm đến 3 nm dựa trên số liệu thực nghiệm chính là CNT bán dẫn loại zigzag.



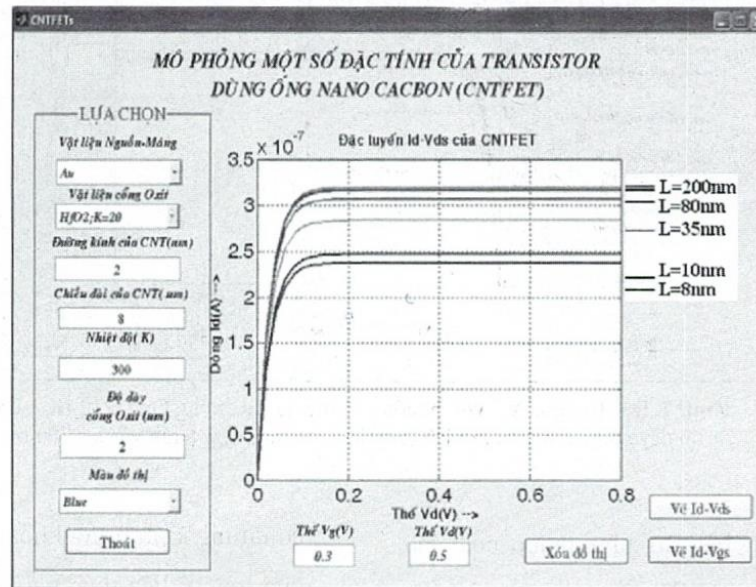
Hình 8. Họ đường cong  $I_d$ - $V_d$ , thế cổng  $V_g = 0,5$  V, nhiệt độ 300<sup>0</sup> K, đường kính biến thiên 1 nm – 3 nm.

Đường kính ảnh hưởng đến năng lượng  $E_g$ , đường kính lí tưởng 1 nm tương ứng với năng lượng vùng cấm  $E_g = 0.8$  eV. Khi đường

kính tăng thì  $E_g$  sẽ giảm và ngược lại (công thức (5)). Khi vùng cấm hẹp, lúc này CNT hoạt động như là dây dẫn kim loại. Một số kết quả

thực nghiệm cho thấy rằng CNT đa tường hoạt động như là một dây kim loại, còn CNT đơn

tường đôi khi là bán dẫn và đôi khi là kim loại.



**Hình 9.** Họ đường cong  $I_d$ - $V_d$ , với  $V_g = 0,3$  V, đường kính CNT bằng 2 nm và chiều dài biến thiên từ 8 nm - 200 nm.

Do đó, đường kính tăng thì  $E_g$  giảm, nghĩa là vùng cấm sẽ giảm đi, nên điện tử di chuyển từ vùng hóa trị sang vùng dẫn sẽ nhiều hơn, mật độ dòng sẽ lớn hơn. Dự đoán cho rằng khi đường kính tăng thì dòng  $I_d$  sẽ tăng và ngược lại. Chúng tôi cho đường kính biến thiên từ 1 nm đến 3 nm. Kết quả mô phỏng như hình 8, đường kính tăng thì dòng  $I_d$  tăng, phù hợp với dự đoán. Chúng tôi đã thử nghiệm đến đường kính 3 nm, trong khi một số báo cáo chỉ khảo sát đường kính CNT khoảng 2 nm.

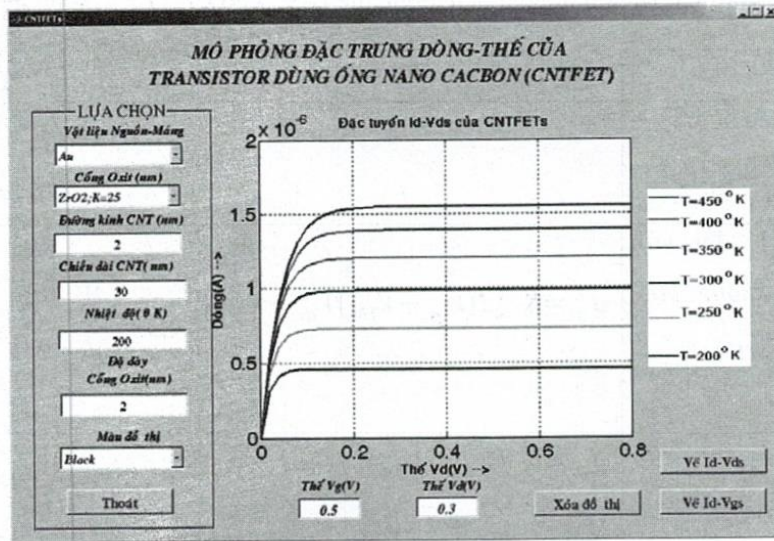
Hình 9 trình bày sự phụ thuộc đặc trưng dòng thế vào độ dài CNT. Theo công thức (3) khi L tăng, điện dung cổng  $C_g$  tăng. Do đó, thế thành phần tạo ra:  $U = \frac{q}{C_g}$  sẽ giảm. Thế U này, tính như thế từ phương trình Poisson, có ảnh hưởng của thế tĩnh trong CNT, tác dụng

ngược lại với thế cổng  $V_g$  khi áp vào. U giảm thì hiệu thế  $V_g - U$  sẽ tăng, tác động đến dòng điện  $I_d$  qua nguồn-máng.

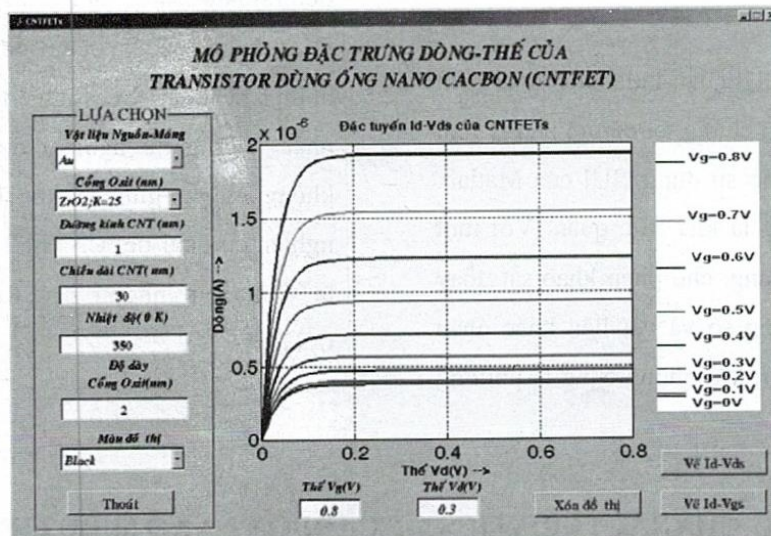
Khi thế U giảm dẫn đến dòng  $I_d$  tăng. Nghĩa là chiều dài tăng thì dòng tăng và ngược lại. Chiều dài CNT thường chọn trong phạm vi từ 20 nm – 250 nm.

Hình 10 biểu diễn sự phụ thuộc của đặc trưng CNTFET vào nhiệt độ. Nhiệt độ ảnh hưởng đến hàm Fermi ở nguồn-máng từ biểu thức có hằng số Boltzmann:  $K_B T$ .

Khi thay đổi nhiệt độ thì thế ngưỡng sẽ thay đổi. Nhiệt độ tăng, bổ sung thêm năng lượng nhiệt cho điện tử và làm dịch chuyển các mức Fermi trong kênh dẫn của CNT lên cao hơn, các điện tử trở nên linh động hơn, di chuyển với tốc độ cao hơn. Vì vậy, đặc trưng sẽ tăng (hình 10).



Hình 10. Họ đường cong  $I_d$ - $V_d$  với nhiệt độ biến thiên từ 200 K – 450 K



Hình 11. Họ đường cong  $I_d$ - $V_d$  với  $V_g$  biến thiên từ 0.1 V- 0.8 V

Hình 11 trình bày sự phụ thuộc của đặc trưng dòng thể  $I_d$ - $V_{ds}$  của CNTFET vào thế  $V_g$ . Khi  $V_g$  tăng từ 0,1 V đến 0,8 V, dòng  $I_d$  tăng.

### 2.6. Biểu thức giải tích

Kết quả mô phỏng ở trên tính theo thuật toán NEGF, theo xác suất truyền, dòng nguồn-máng tính từ biểu thức Landauer, chỉ mang tính chất gần đúng.

Vi đặc tuyến của CNTFET giống như họ FET thông thường [7], dựa vào tính chất này, chúng tôi suy luận cho cả hai vùng bão hòa, không bão hòa. Chúng tôi đề xuất biểu thức giải tích chung cho CNTFET kênh n như bảng 3.

Bảng 3. Biểu thức giải tích dòng thể  $I_d$ - $V_d$  cho CNTFET kênh n

Vị trí thế $V_{ds}$	Dòng $I_d$	Độ dẫn
- Điểm chuyển bão hòa: $V_{ds}(sat) = (V_{gs} - V_{TN})$		
- Dòng máng $I_d$ đối với thiên áp vùng không bão hòa $V_{ds} < V_{ds}(sat)$	$I_d = K_n [2(V_{gs} - V_{TN})V_{ds} - V_{ds}^2]$	$g_m = \frac{W}{L} \mu C_{OX} V_{ds}$
- Dòng máng $I_d$ đối với thiên áp vùng bão hòa: $V_{ds} \geq V_{ds}(sat)$	$I_d = K_n (V_{gs} - V_{TN})^2$ Với : $K_n = \frac{W}{L} \mu \frac{C_{OX}}{2}$	$g_{m(sat)} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} (V_{gs} - V_{TN})$

### 3. KẾT LUẬN

Với công cụ GUI của Matlab, kết hợp thuật toán mới là NEGF, chúng tôi đã mô phỏng linh kiện CNTFET. Nhờ sử dụng GUI của Matlab, kết quả mô phỏng là khá trực quan. Với một chương trình đa dạng, cho phép khảo sát, thay thế với nhiều thông số và vật liệu khác nhau một cách đơn giản. Mô phỏng cũng là phương

tiện rất hữu ích để làm giảm chi phí của những thí nghiệm điện tử nano đắt tiền và có được những đề xuất thực nghiệm tập trung và tốt nhất. Những thí nghiệm dựa trên mô phỏng không những giúp ta khả năng định hướng, nghiên cứu chi tiết CNTFET mà còn cho phép ta tiên đoán những đặc trưng hấp dẫn của CNTFET.

## SIMULATING CHARACTERISTICS OF CARBON NANOTUBE FIELD-EFFECT TRANSISTOR (CNTFET)

Dinh Sy Hien <sup>(1)</sup>, Thi Tran Anh Tuan <sup>(2)</sup>, Nguyen Thi Luong <sup>(3)</sup>

(1) University of Natural Sciences, VNU-HCM

(2) Tra Vinh University.

(3) University of Technical Education, HCM city

**ABSTRACT:** We provide a model of coaxial CNTFET, using single wall nanotube. These devices would exhibit wrap-around gates that maximize capacitive coupling between the gate electrode and the nanotube channel. The results of simulations of I-V characteristics for CNTFETs are presented. Here we use non-equilibrium Green's function (NEGF) to perform simulation for CNTFET. This

simulator also includes a graphic user interface (GUI) of Matlab that enables parameter entry, calculation control, display of calculation results. In this work, we review the capabilities of the simulator, summarize the theoretical approach and experimental results. Current-voltage characteristics are a function of the variables such as: diameter of CNT, the length of CNT, the gate oxide thickness, gate voltage of  $V_g$ , types of materials of Source-Drain, Gate, and temperature. The obtained  $I$ - $V$  characteristics of the CNTFET are also presented by analytical equations.

**Keywords:** coaxial CNTFET, nanotube, transistor

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Đinh Sỹ Hiền, *Điện tử Nano: Linh kiện và công nghệ*, NXB ĐHQG Tp Hồ Chí Minh, (2005)
- [2]. Jing Guo, *Carbon Nanotube: Modeling, Physics and Applications*, PhD.Thesis, Purdue University, (2004).
- [3]. T. Brintlinger, B.M. Kim, E. Cobas, and M. S. Fuhrer, *Gate-Field-Induced Schottky Barrier Lowering in a Nanotube Field-Effect Transistor*, University of Maryland, College Park, MD 20742-4111, USA (2005).
- [4]. Javey, H. Kim, M. Brink, Q. Wang, A. Ural, J. Guo, P. McIntyre, P. McEuen, M. Lundstrom, and H. J. Dai, High-k dielectrics for advanced carbon nanotube transistors and logic gates, *Nature Materials*, vol. 1 (2002).
- [5]. Leonardo de Camargo e Castro, *Modeling of carbon nanotube field-effect transistors*, PhD. Thesis, The University of British Columbia (2006).
- [6]. Supriyo Datta, Nanoscale device modeling: the Green's function method, *Superlattices and Microstructures*, vol. 28, No. 4 (2000).
- [7]. Đinh Sỹ Hiền, *Linh kiện bán dẫn*, NXB Đại học Quốc Gia Tp Hồ Chí Minh (2008).