

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**PROJETO AUXILIADO POR COMPUTADOR
DE UM TRANSISTOR RECONFIGURÁVEL (RFET)
DE NANOTUBOS DE CARBONO (CNT)**

Rebeca dos Santos de Moura

Brasília, dezembro de 2015

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
Faculdade de Tecnologia

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO
**PROJETO AUXILIADO POR COMPUTADOR
DE UM TRANSISTOR RECONFIGURÁVEL (RFET)
DE NANOTUBOS DE CARBONO (CNT)**

Rebeca dos Santos de Moura

*Relatório submetido ao Departamento de Engenharia
Elétrica como requisito parcial para obtenção
do grau de Bacharel em Engenharia de Computação*

Banca Examinadora

Prof. Stefan Michael Blawid, ENE/UnB
Orientador

Prof^a. Artemis Marti Ceschin, ENE/UnB
Examinador interno

Prof. José Edil Guimarães de Medeiros,
ENE/UnB
Examinador interno

Dedicatória

Dedico este trabalho à minha mãe Arlete e minhas irmãs Rayssa e Raquel

Rebeca dos Santos de Moura

Agradecimentos

Agradeço à minha mãe e minhas irmãs, que não mediram esforços para que eu chegasse até esta etapa de minha vida.

Ao Prof. Stefan, pela paciência na orientação e incentivo que tornaram possível a conclusão deste trabalho.

Ao grupo de estudos da Universidade de Dresden por me concederem acesso ao Simulador COOS e ao suporte fornecido, especialmente pelo Prof. Martin Claus.

A minha amiga Layane, a Química, que me indicou livros sobre nanotubos de carbono, essenciais ao levantamento bibliográfico necessário para este trabalho.

Aos familiares que sempre demonstraram carinho e apoio fundamental: meu pai, tia Sandra, tio Roberto, tia Neide e primas-irmãs Jessika e Júlia.

Aos meus avós: Vó Carmélia, Vó Clemildes, Vô Nilo e falecido Vô Raimundo que sempre acreditaram no meu melhor e continuamente me ensinam valiosas lições.

Aos meus amigos Igor, Rafael, André, Matheus, Karine, Ciro e Gustavo, que dividem essa conquista comigo, pelas experiências acadêmicas e pessoais compartilhadas dentro e fora da UnB, e até em outros países (pessoalmente ou via Skype).

E aos meus amigos Ana Paula e Pedro, que acompanharam de perto todo o processo da minha graduação (desde o primeiro dia de aula!) e participaram ativamente de diversos feitos, inclusive este em mãos.

Tenham minha sincera gratidão!

Rebeca dos Santos de Moura

RESUMO

Transistores reconfiguráveis baseados em nanotubos de carbono (CNT-RFET) são uma alternativa à tecnologia CMOS a base de Silício amplamente usada nos dispositivos de hoje. Este trabalho é um projeto de um CNT-RFET com duas portas que circundam o nanotubo, que podem ser programadas através de um sinal elétrico. Dessa forma, o transistor pode apresentar tanto o comportamento p-FET quanto n-FET dependendo da tensão de polarização. O simulador COOS, um *framework* para simulação numérica de dispositivos, foi usado para a solução de um modelo que descreve a injeção de cargas no canal do transistor através de tunelamento e o movimento balístico das cargas injetadas ao longo do canal. Começando com uma primeira hipótese de possível arquitetura do dispositivo, o CNT-RFET foi moldado e aprimorado, com base em diversas simulações para investigar o funcionamento do transistor e o efeito de variações na geometria do dispositivo e nos materiais, até a obtenção do protótipo apresentado. Várias curvas de transferência, curvas de saída e diagramas de banda foram calculados, analisados e comparados com um CNTFET tradicional para melhor avaliação do dispositivo simulado.

ABSTRACT

Carbon nanotube reconfigurable transistors (CNT-RFETs) are a possible alternative to Silicon-based CMOS technology widely used in devices nowadays. This work projects a CNT-RFET with two wrap-around gate structures, that can be programmed via an electrical signal. Thus, the transistor can behave as a p-FET or n-FET depending on the bias voltage. COOS, a framework for numerical device simulations, was used to solve a model describing the injection of charges into the transistor channel via tunneling and the ballistic movement of the injected charges along the channel. Starting with a first guess of a possible device architecture, the CNT-RFET was shaped and refined based on several simulations to investigate the basic operation of the transistor and the effect of changes in the geometry and materials of the device, to obtain the presented prototype. Various transfer curves, output curves and band diagrams were calculated, analyzed and compared with a normal CNTFET, for a better evaluation of the simulated device.

SUMÁRIO

1	Introdução	1
1.1	CONTEXTUALIZAÇÃO	1
1.2	OBJETIVOS DO PROJETO	2
1.3	ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	2
2	Revisão Bibliográfica	3
2.1	TRANSISTORES RECONFIGURÁVEIS	3
2.2	NANOTUBOS DE CARBONO (CNTs)	4
2.2.1	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE CNTs	5
2.2.2	MÉTODOS DE CRESCIMENTO DE CNTs	7
2.3	TRANSISTORES DE EFEITO DE CAMPO DE CNTs	7
2.4	EQUAÇÃO DE POISSON	8
2.4.1	CONDIÇÕES DE FRONTEIRA	9
2.5	DETERMINAÇÃO DA DENSIDADE DE CARGAS	10
2.5.1	DENSIDADE DE ESTADOS DE UM CNT	10
2.5.2	FUNÇÃO DE FERMI	11
2.5.3	PROBABILIDADE DE TRANSMISSÃO	12
2.6	CÁLCULO DA CORRENTE	13
3	Metodologia	15
3.1	SIMULADOR COOS	17
3.2	SIMULAÇÃO DE CNT-TFETs	18
3.3	SIMULAÇÃO DE CNTFETs	20
3.4	SIMULAÇÃO DE CNT-RFETs	20
4	Resultados e Análises	22
4.1	SIMULAÇÃO DO CNTFET	23
4.2	FUNCIONAMENTO DO CNT-RFET	25
4.2.1	DIAGRAMAS DE BANDAS PARA CONFIGURAÇÃO TIPO P	29
4.2.2	DIAGRAMA DE BANDAS PARA CONFIGURAÇÃO TIPO N	31
4.2.3	ASSIMETRIA DEVIDO À ALTURA DA BARREIRA DE SCHOTTKY	33
4.3	VARIAÇÃO DO COMPRIMENTO DO CANAL DO CNT	33
4.4	OTIMIZAÇÃO DA GEOMETRIA	35

4.4.1	TAMANHO DAS PORTAS	35
4.4.2	DISTÂNCIA ENTRE PORTAS E CONTATOS DE DRENO/FONTE.....	40
4.5	OTIMIZAÇÃO DOS MATERIAIS	44
4.5.1	DIÂMETRO DO CNT	44
4.5.2	PERMISSIVIDADE.....	46
4.6	RESUMO DOS RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES	47
5	Conclusões.....	49
5.1	TRABALHOS FUTUROS	50
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	51
	Anexos.....	53
I	Apêndice	54
I.1	CÓDIGO DE ENTRADA COMENTADO.....	54
I.2	COMANDOS DO SIMULADOR COOS	57

LISTA DE FIGURAS

2.1	Célula de 8-Portas lógicas dinamicamente reconfiguráveis	4
2.2	Esboço da forma de produção de um SWNT	5
2.3	Esboço de três estruturas SWNT diferentes.....	6
2.4	Dependência do diâmetro de E_g para tubos semicondutores.....	6
2.5	Transistor de efeito de campo (FET) feito de um único nanotubo de carbono	7
2.6	Curvas características de um CNTFET tipo p.....	8
2.7	Transistor com simetria azimutal.....	9
2.8	Diagrama de bandas no espaço real.....	11
2.9	Exemplos de tunelamento para uma única barreira	12
2.10	Barreira de potencial para visualização do método WKB.....	13
3.1	Fluxograma do projeto	15
3.2	Fluxograma para simulação das características de saída	16
3.3	Primeiro teste.....	19
3.4	Segundo teste	19
3.5	Esquemático do CNT-RFET simulado	20
4.1	Fluxograma de apresentação dos resultados das simulações.....	22
4.2	Curvas de transferência e de saída medidas para o CNTFET simulado	23
4.3	Diagrama de bandas para CNTFET	24
4.4	Curva de transferência medida para o CNT-RFET	26
4.5	Curva de transferência em escala logarítmica medida para o CNT-RFET	27
4.6	Curvas de saída medidas para o CNT-RFET simulado	28
4.7	Curvas de transcondutância	28
4.8	Polarização de tensão para diagrama de bandas do tipo p	29
4.9	Diagrama de bandas para RFET tipo p	30
4.10	Polarização de tensão para diagrama de bandas do tipo n	31
4.11	Diagrama de bandas para RFET tipo n	32
4.12	Variação da altura da barreira de Schottky	34
4.13	Curvas de transferência para diversos comprimentos de CNT	36
4.14	Curvas de transferência para diversos comprimentos de porta.....	38
4.15	Curvas de transferência para diversos comprimentos de porta em escala logarítmica	39
4.16	I_{on} e I_{off} vs L_{gate}	40
4.17	Curvas de saída medidas para o CNT-RFET com $L_{gate} = 17$ nm	41

4.18	Diagrama de bandas para $L_{gate} = 66nm$ e $L_{gate} = 17nm$	42
4.19	Diagrama de bandas para $L_{gate} = 66nm$ e $L_{gate} = 84nm$	43
4.20	Curvas de transferência para diferentes $s_{s,d}$	44
4.21	Curvas de transferência para diferentes valores de d_{cnt}	45
4.22	Curvas de transferência para diferentes valores de d_{cnt} em escala logarítmica.....	46
4.23	Curvas de transferência para diferentes valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp}	47

LISTA DE TABELAS

3.1	Parâmetros constantes para todas as simulações	21
4.1	Parâmetros da simulação do CNTFET	23
4.2	Parâmetros da simulação do CNT-RFET	25
4.3	Polarização de tensão	26
4.4	Pontos de operação para o diagrama de bandas da configuração p	29
4.5	Pontos de operação para o diagrama de bandas da configuração n	31
4.6	Parâmetros da simulação de assimetria	33
4.7	Parâmetros da simulação de variação do comprimento canal	35
4.8	Parâmetros da simulação de variação do tamanho das portas	37
4.9	Pontos de operação para diagrama de bandas de $L_{gate} = 17, 66$ e 84 nm	37
4.10	Parâmetros da simulação de distância entre portas e contatos de dreno/fonte	41
4.11	Parâmetros da simulação de variação do diâmetro do CNT	44
4.12	Parâmetros da simulação de variação da permissividade	46
4.13	Valores ótimos para o transistor estudado	48
4.14	Valores obtidos para transistor estudado simulado com os valores ótimos	48

LISTA DE SÍMBOLOS, NOMENCLATURAS E ABREVIACÕES

Variáveis

d	Diâmetro	[nm]
E	Energia	[eV]
E_c	Energia da banda de condutância	[eV]
E_g	Largura da banda proibida	[eV]
E_v	Energia da banda de valência	[eV]
ϕ_{sb}	Altura da barreira de Schottky	[eV]
I	Corrente de cargas	[A]
I_D	Corrente de dreno	[μ A]
I_{on}	Corrente no estado <i>on</i>	[μ A]
I_{off}	Corrente no estado <i>off</i>	[μ A]
L	Comprimento	[nm]
ρ	Densidade	[m ³ /kg]
s	Comprimento de espaçador de óxido	[nm]
V	Tensão elétrica	[V]
V_{G1}	Tensão entre porta 1 e fonte	[V]
V_{G2}	Tensão aplicada na porta 2	[V]
V_{DS}	Tensão entre dreno e fonte	[V]
V_{GS}	Tensão na porta	[V]

Constantes

ϵ_0	Permissividade do vácuo $\approx 8,854 \times 10^{-14}$	[F/cm]
h	Constante de Planck = $6,626 \times 10^{-34}$	[J \times s]
k	Constante de Boltzmann $\approx 8,617 \times 10^{-5}$	[eV/K]
q	Carga de um elétron = $1,6 \times 10^{-19}$	[C]

Grupos Adimensionais

$f(E)$ Função de Fermi

Siglas

BTE	Boltzmann Transport Equation
BTBT	Band-To-Band Tunneling
CNTFET	Carbon Nanotube Field-Effect Transistor
CMOS	Complementary Metal-Oxide-Semiconductor
CNT	Carbon Nanotube
CVD	Chemical Vapor Deposition
DOS	Density Of States
FET	Field-Effect Transistor
MOS	Metal Oxide Semicondutor
RFET	Reconfigurable Field-Effect Transistor
SWNT	Single-Walled Nanotubes
TFET	Tunneling Field-Effect Transistor
WKB	Wentzel-Kramer-Brillouin

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contextualização

A tendência técnica mais significativa economicamente dos últimos anos tem sido a Lei de Moore: a observação feita por Gordon Moore de que a densidade de transistores no microchip mais avançado dobra a cada 18 meses [1]. O rápido aperfeiçoamento de computadores e de *hardware* de comunicações tem sido fundamental para a implementação de novas aplicações de *software*, *networking* e de tecnologia da informação em geral. Estas, por sua vez, tem sido responsáveis por grande parte do crescimento econômico.

Entretanto, a indústria de semicondutores está se aproximando dos limites físicos dos métodos tradicionais de implementar circuitos integrados. Em busca de novos materiais para substituir o Silício em algumas aplicações e para reduzir o tamanho dos dispositivos construídos, os cientistas e engenheiros de todo o mundo já começaram a pesquisar ativamente sobre nanotubos de carbono (CNTs).

Filamentos de carbono de diâmetros nanométricos (de aproximadamente 10 nm) foram extensivamente cultivados em meados dos anos 70 e 80, mas somente após o trabalho pioneiro de Sumio Iijima em 1991 [2], o potencial de CNTs como material de dispositivos eletrônicos foram reconhecidos e estudados.

Devido às suas excelentes propriedades elétricas, mecânicas e térmicas, os pesquisadores identificaram uma variedade de aplicações potenciais para os CNTs. Mesmo em um curto período desde a sua criação, transistores de efeito de campo, diodos, emissores de raios óticos e catódicos, bio-sensores e elementos de armazenamento de energia foram demonstrados [3].

Outra abordagem para superar os limites físicos dos transistores existentes é o uso de circuitos reconfiguráveis. Atualmente, as aplicações eletrônicas são predominantemente fabricadas com a tecnologia CMOS (*Complementary Metal-Oxide-Semiconductor*), que combina os dois tipos transistores de efeito de campo (FET tipo p e FET tipo n) para realizar funções lógicas. No entanto, as características elétricas de transistores CMOS não podem ser alteradas depois da fabricação. A reconfiguração dinâmica do dispositivo permite a integração de novas funcionalidades e todo o

sistema se beneficia da reutilização de componentes.

Atualmente, já é possível encontrar na literatura estudos sobre dispositivos reconfiguráveis baseados em transistores de efeito de campo de nanotubos de carbono (CNTFETs) [4, 5], que usam a estrutura de duas portas (uma *back-gate* e uma *front-gate* de metal posta entre embaixo do nanotubo entre os contatos de dreno e fonte). Também há um estudo sobre FETs reconfiguráveis, mas baseado em nanofios de silício [6], onde a estrutura de duas portas que circundam o canal (arquitetura *wrap-around gate*) é usada.

1.2 Objetivos do projeto

O objetivo deste trabalho é projetar um transistor reconfigurável baseado em CNT (CNT-RFET) com duas portas que circundam o canal (arquitetura *wrap-around gate*) e propor um protótipo para fabricação (mas não faz parte do trabalho implementar um modelo compacto do CNT-RFET). Para esse fim, será usado um *framework* de simulação numérica de dispositivos (em especial transistores de efeito de campo de CNTs), que permite aprofundar os conhecimentos de RFETs.

1.3 Organização do trabalho

No capítulo 2 encontra-se uma revisão teórica necessária à correta compreensão deste trabalho, com foco em nanotubos de carbono e nas equações usadas pelo simulador numérico de dispositivos. Também são abordados conceitos referentes à reconfiguração de dispositivos e a CNTFETs.

O capítulo 3 descreve a metodologia empregada no desenvolvimento do projeto, explanando cada uma das etapas seguidas para a implementação do CNT-RFET.

No capítulo 4 são apresentados e discutidos os resultados das investigações feitas através de simulação dos transistores.

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 esboço do código de entrada usado no simulador de dispositivos.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo são expostos conceitos e técnicas essenciais para a realização do projeto, que está organizado da seguinte forma: na Seção 2.1 são abordados transistores reconfiguráveis e métodos de granularidade, na Seção 2.2 a teoria de nanotubos de carbono é explanada, uma breve descrição de CNTFETS é feita na Seção 2.3. A matemática usada no simulador numérico de dispositivos é detalhada em três seções: equação de Poisson (Seção 2.4), determinação da densidade de cargas (Seção 2.5) e cálculo da corrente (Seção 2.6).

2.1 Transistores reconfiguráveis

A capacidade de configurar eletrônicos para realizar funções personalizadas após a fabricação é fornecida por circuitos reconfiguráveis. Duas estratégias diferentes podem ser usadas para realizar a reconfiguração de funções lógicas [6]:

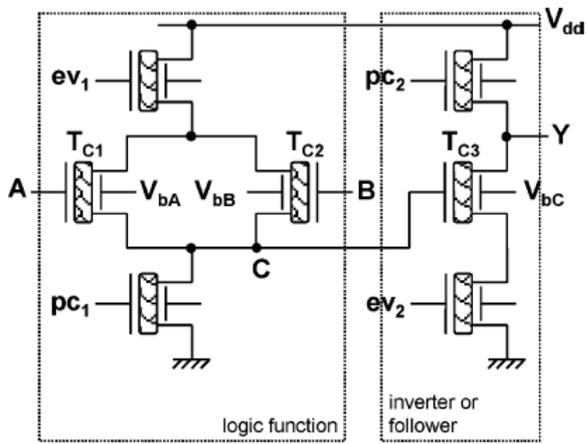
Método de granularidade grossa consiste em criar um caminho de informação entre os dispositivos estáticos ou unidades funcionais desejadas. O usuário final cria o caminho entre as unidades, existentes desde a fabricação. Este método é implementado em FPGAs (Arranjo de Portas Programáveis em Campo) desde 1984.

Método de granularidade fina consiste em reconfigurar a função lógica de cada unidade funcional. O exemplo mais proeminente de um dispositivo reconfigurável atualmente é o *memristor*¹, que pode se comportar como um perfeito *memristor* para um determinado intervalo de uma variável de estado, ou como um sistema *memristive*² para outro outro intervalo [8].

O método de granularidade fina pode ser aplicados a transistores, no sentido de mudar sua funcionalidade para tipo n-FET ou p-FET dependendo da tensão aplicada. Tal dispositivo é cha-

¹Também chamado de *memory resistor*, o *memristor* é um componente elétrico passivo não-linear de dois terminais que relaciona carga elétrica e fluxo magnético. Da mesma forma que o resistor, o capacitor e o indutor, ele pode ser definido por variáveis fundamentais da eletrônica, e portanto, é considerado o quarto componente eletrônico passivo [7].

²Sistema *memristive* foi definido em [7] como uma classe muito mais ampla de sistemas dinâmicos não-lineares.



(a) Célula de 8 portas lógicas

V_{bA}	V_{bB}	V_{bC}	Y
+V	+V	+V	$\overline{A+B}$
+V	+V	-V	$A+B$
-V	-V	+V	$A \cdot B$
-V	-V	-V	$\overline{A \cdot B}$
+V	-V	+V	\overline{AB}
+V	-V	-V	$A+\overline{B}$
-V	+V	+V	\overline{AB}
-V	+V	-V	$B+\overline{A}$

(b) Tabela verdade da célula de 8 portas.

Figura 2.1: Célula de 8 portas lógicas dinamicamente reconfiguráveis composta por 7 DG-CNTFETs e sua tabela verdade. Extraído de [4].

mado de transistor reconfigurável e sua implementação promete um projeto de circuito ainda mais compacto e flexível.

Por exemplo, em [4], uma célula de 8 portas lógicas dinamicamente reconfigurável é proposta (seu esquemático pode ser visto na Figura 2.1a). Ela é composta por 7 DG-CNTFETs (*Double Gate* CNTFETs), que usam a estrutura de duas portas: uma *back-gate* e uma *front-gate* de metal posta entre embaixo do nanotubo entre os contatos de dreno e fonte.

A polaridade de cada DG-CNTFET é controlada pela tensão aplicada na *back-gate*. Tensões negativas definem o comportamento do DG-CNTFET como p-FET e tensões positivas, como n-FET. Cada combinação das tensões da *back-gate* resultam em uma função lógica envolvendo as entradas booleanas A e B. De forma que a célula pode ser configurada em até oito modos, descritos na tabela verdade da Figura 2.1b.

2.2 Nanotubos de carbono (CNTs)

Os nanotubos de carbono (CNTs) são, provavelmente, os mais conhecidos dos nanomateriais. Eles foram descobertos por Sumio Iijima em 1991 [2] que os observou ao analisar imagens de alta resolução, feitas com um microscópio eletrônico, dos subprodutos da combustão de materiais carbonáceos.

Um nanotubo de carbono de parede simples (SWNT) é uma folha de grafeno enrolada em forma de cilindro, de forma que os anéis hexagonais colocados em contato juntem-se coerentemente, e as pontas são fechadas por duas tampas, sendo que cada tampa é um hemi-fulereno com o diâmetro adequado [3].

Enquanto o comprimento de um SWNT pode ser macroscópico, o diâmetro tem uma dimensão molecular. Tal como uma molécula, as propriedades são intimamente influenciadas pela forma

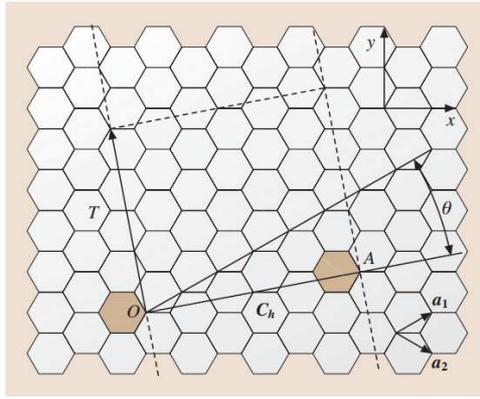


Figura 2.2: Esboço da forma de produção de um SWNT, a partir de uma folha de grafeno. Extraído de [3].

como os átomos estão dispostos ao longo do diâmetro. O comportamento físico e químico de nanotubos de carbono são, portanto, relacionados com as suas características estruturais únicas.

Com essa extraordinária proporção de aspecto, forte estrutura covalente local, e com estrutura de longo alcance que é essencialmente livre de defeitos, estes tubos têm propriedades notáveis [9].

2.2.1 Propriedades eletrônicas de CNTs

As propriedades eletrônicas de CNTs decorrem das propriedades eletrônicas de seu elemento fundamental: a folha de grafeno. Grafeno é uma camada poliaromática mono-atômica feita de uma tela hexagonal de átomos de carbono sp^2 -híbridos (a mesma usada na construção de grafite) [3]. Mas enquanto o grafeno não tem banda proibida intrínseca e é um semi-metal, as características elétricas de um nanotubo de carbono dependem em grande parte da estrutura cristalográfica que pode resultar em comportamento metálico ou semicondutor [10].

Quando a folha de grafeno é enrolada em forma de tubo, como visto na Figura 2.2, a componente do vetor de onda ao longo do eixo do tubo pode assumir qualquer valor.

A geometria do tubo dobrado é matematicamente definida por um vetor de quiralidade que liga os átomos que coincidem no tubo ao longo da folha. Esse vetor de quiralidade C_h (Equação (2.1)) é descrito por uma combinação linear dos vetores de base a_1 e a_2 da folha de grafeno, onde (n, m) é o índice de quiralidade [3, 9].

$$OA = C_h = \mathbf{n}a_1 + \mathbf{m}a_2 \quad (2.1)$$

Dessa forma, existem infinitas possibilidades de enrolar uma folha de grafeno em um SWNT, alguns exemplos estão ilustrados na Figura 2.3. Uma certa quantidade dos CNTs resultantes não apresentam simetria espelhada ao eixo de nanotubos e são chamados de “nanotubos quirais”.

A quiralidade liga diretamente as propriedades de estrutura cristalográfica com propriedades geométricas e propriedades elétricas dos nanotubos [10]. Assim, diferentes quiralidades proporci-

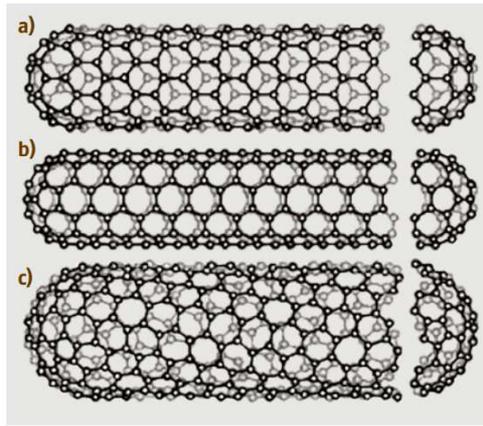


Figura 2.3: Esboço de três estruturas SWNT diferentes: (a) um nanotubo do tipo *zig-zag*, (b) um nanotubo do tipo poltrona, (c) um nanotubo helicoidal. Extraído de [3].

onam diferentes diâmetros, larguras de banda e massas eficazes. Além de definirem se o CNT será semicondutor ou metálico.

O diâmetro de um CNT pode variar de menos de 0.5 nm até vários nanômetros, mas com comprimentos que chegam até milímetros ou mais. A Figura 2.4 demonstra como o diâmetro depende da largura da banda proibida (E_g) para tubos semicondutores. Tal efeito é proveniente de resultados experimentais por meio de espectroscopia de tunelamento que verificam aproximadamente a dependência de $1/d_{\text{cnt}}$ [10], ou seja, quanto menor o diâmetro do tubo, maior é o tamanho da *bandgap* (banda proibida).

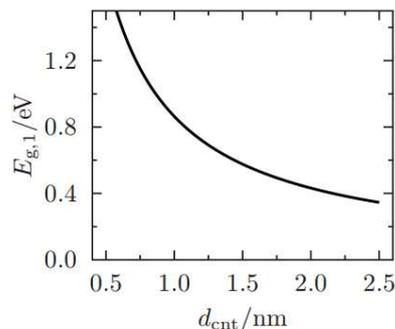


Figura 2.4: Dependência do diâmetro de E_g para tubos semicondutores. Extraído de [10]

Na fabricação de CNTs em grande escala, tipicamente se fabrica um conjunto de tubos semicondutores e metálicos. Os nanotubos de carbono semicondutores com uma única camada atômica (SWNT) são utilizados para fazer canais de transistores de efeito de campo (CNTFETs) [10], como ilustrado na Figura 2.5 e melhor discutido mais a frente.

Atualmente, no entanto, não existe uma técnica estabelecida para eliminar os metais, e embora tubos metálicos sejam usados para realizar interconexões entre outros componentes eletrônicos [9] (em razão de criarem um curto entre os contatos de fonte e dreno), eles ainda apresentam parasitas no canal, que podem degradar o desempenho de um transistor, e por isso precisam ser melhorados para essa finalidade.

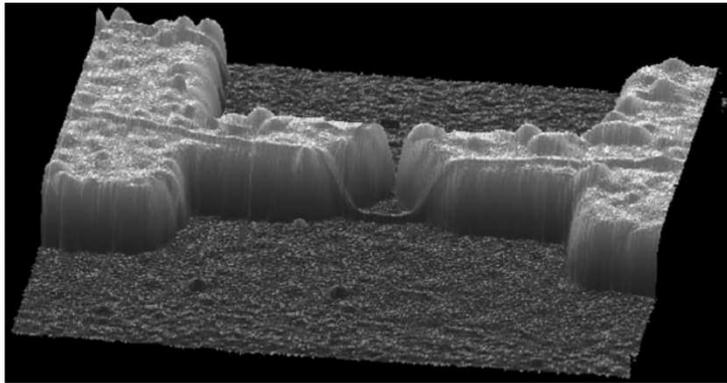


Figura 2.5: Transistor de efeito de campo (FET) feito de um único nanotubo de carbono que liga os conectores de fonte e dreno. Extraído de [9]

O espalhamento das cargas em um CNT é limitado pela sua característica unidimensional, além de ser diretamente ligado ao caminho médio livre efetivo de elétrons λ_{eff} . Para um nanotubo de carbono semiconductor, observa-se um valor de $\lambda_{eff} \approx 100$ nm [11].

2.2.2 Métodos de crescimento de CNTs

Os métodos de crescimento de nanotubos de carbono ainda são bastante debatidos dentre os pesquisadores. Há várias hipóteses sobre os métodos, uma vez que as condições que permitem o crescimento são muito diversas [3]. Os processos mais comuns de fabricação de CNTs são: descarga por arco, ablação à laser e deposição por vapor químico.

O método de deposição por vapor químico (CVD) é o mais disseminado. Nele, a decomposição térmica de um vapor de hidrocarboneto é alcançada na presença de um catalisador de metal. Por isso, ele também é conhecido como CVD térmico ou catalítico (a fim de distingui-lo de muitos outros tipos de CVD usados para várias finalidades) [12].

Mecanismos de crescimento que envolvem catalisadores são mais difíceis de verificar, visto que apresentam uma maior diversidade. Inclusive no CVD é difícil encontrar explicações compreensíveis e plausíveis capazes de levar em conta tanto as várias condições utilizadas e os diferentes morfologias observadas.

2.3 Transistores de efeito de campo de CNTs

Os CNTs têm excelentes propriedades mecânicas e estabilidade química, além de propriedades elétricas potencialmente sintonizáveis, tornando-os materiais altamente desejáveis para aplicações nanoeletrônicas [13]. Em vista disso, CNTs foram incorporados em FETs (Transistor de Efeito de Campo) e em outras estruturas eletrônicas moleculares [3].

Dependendo da física do contato e das propriedades do nanotubo, a característica de transferência de um CNTFET pode ter uma configuração p ou n. Tipicamente, um CNTFET com corrente

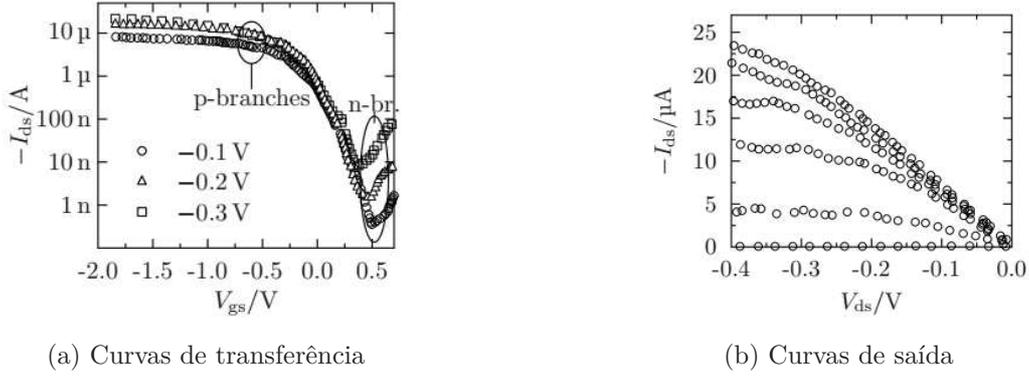


Figura 2.6: Características características medidas para um CNTFET do tipo p. Extraído de [14].

de lacunas mais pronunciada é chamado de p-FET ou, do mesmo modo, um n-FET se a corrente de elétrons é a dominante. Se nem a corrente de lacunas nem a de elétrons domina, o CNTFET é chamado de FET ambipolar.

A Figura 2.6 mostra curvas de transferência e de saída medidas experimentalmente para um CNTFET do tipo p, com porta de arquitetura *wrap-around gate* por todo o comprimento do tubo com comprimento de 50 nm [14].

2.4 Equação de Poisson

A solução da equação de Poisson determina o potencial eletrostático ψ dentro de um dispositivo semiconductor. Conseqüentemente, a estrutura geral do dispositivo, os potenciais de contato e a distribuição de carga no interior do dispositivo são levados em conta.

Devido a característica unidimensional do CNT, simulações eletrostáticas simples em 1D ou 2D, comuns à transistores bipolares ou MOS, não são suficientes para capturar o correto acoplamento eletrostático entre o nanotubo e os contatos. Se, adicionalmente, a distância entre tubos vizinhos é baixa (conforme é esperado em futuros transistores multi-tubo), o acoplamento eletrostático inter-tubo pode alterar significativamente o comportamento do dispositivo. Apenas geometrias de contato em 3D permitem estudar os efeitos de acoplamento eletrostático entre o tubo e os contatos e, portanto, precisam da implementação de uma equação de Poisson em 3D (descrita na Equação (2.2)) com a permissividade ϵ espacialmente dependente, e com a densidade de carga ρ que depende tanto do domínio do tempo quanto do espaço [10].

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = -\rho \quad (2.2)$$

A Equação (2.3) denota a densidade de portadores ao longo do tubo em um domínio de simulação tridimensional [10]. Ela compreende os portadores de carga móveis e os possíveis íons ($N_D^+(x)$ e $N_A^-(x)$) que aderem à superfície, mas são atribuídos a essa densidade de carga unidimensional. Em contraste com materiais semicondutores convencionais como o Silício, a densidade de carga em um CNT é unidimensional.

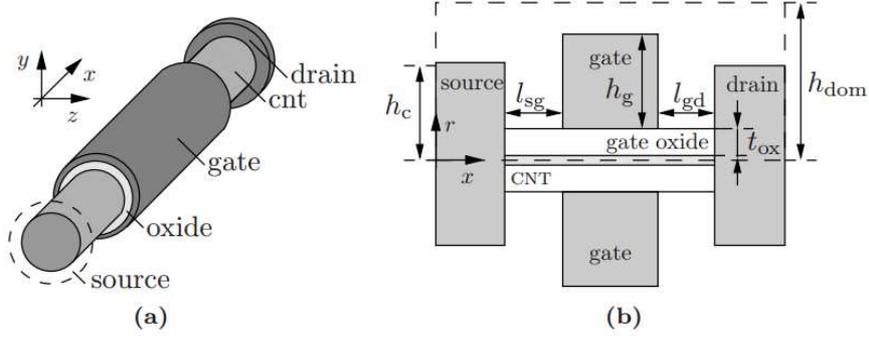


Figura 2.7: (a) Esquemático da estrutura do dispositivo e (b) seção transversal de um CNTFET com um único tubo coaxial parcialmente envolto pelo contato de porta, com simetria azimutal para a qual é suficiente simular o domínio marcado com a linha tracejada. Imagem extraída de [10].

$$\rho_{3d}(x, t) = q \left(N_D^+(x) - N_A^-(x) + p(x, t) - n(x, t) \right) \quad (2.3)$$

Em muitos estudos de simulação, transistores com simetria azimutal (contato de porta coaxial), visto na Figura 2.7, são analisados devido ao seu comportamento eletrostático ideal. Para estes dispositivos, o cálculo do potencial eletrostático pode ser reduzido a uma análise bi-dimensional da equação de Poisson em coordenadas cilíndricas, vista na Equação (2.4), onde r é o raio.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\epsilon r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -\rho \quad (2.4)$$

Resolver a equação de Poisson neste sistema de coordenadas bidimensional exige que a densidade de portadores unidimensional ao longo do tubo seja escalonada pela circunferência do tubo com um diâmetro de d_{cnt} , pois apenas um segmento do invólucro de tubo é considerado. Essa densidade de portadores é vista na Equação (2.5)

$$\rho_{2d}(x, t) = \frac{q}{\pi d_{\text{cnt}}} \left(N_D^+(x) - N_A^-(x) + p(x, t) - n(x, t) \right) \quad (2.5)$$

Em ambas as abordagens, o nanotubo é incluído por meio de uma interface de carga unidimensional com densidade ρ_{3d} ou ρ_{2d} .

Quando uma equação de Poisson bidimensional em coordenadas cartesianas é necessária para descrever a eletrostática no interior do dispositivo com determinada precisão, a densidade de carga unidimensional também é dada pela Equação (2.5), e o motivo é o mesmo explicado nesta Equação.

2.4.1 Condições de fronteira

As condições de fronteira (também chamadas de condições de contorno) são especificadas para estabelecer a unicidade na solução da equação de Poisson.

As portas metálicas são superfícies eletrostaticamente equipotenciais, com valor ψ determinado pela tensão aplicada na porta. Semelhantemente os contatos também apresentam essa condição de potencial eletrostático de valor constante, o que implica que o campo elétrico é perpendicular em todas essas superfícies.

A geometria do dispositivo determina as condições de fronteira na interface entre os contatos de metal e o CNT. Para ψ ao longo dos contatos metálicos a condição de contorno é:

$$q\psi = \frac{1}{2}E_{g,1} - \phi_{sb,n} + qV_c \quad (2.6)$$

Onde V_c é a tensão aplicada no contato c e $E_{g,1}$ é o *bandgap* da primeira sub-banda do CNT. Já $\phi_{sb,n}$ é definida por:

$$\phi_{sb,n} = \phi_m - \mathcal{X}_{cnt} \quad (2.7)$$

A Equação (2.7) segue o modelo de Schottky e Mott [15, 16], que define a altura da barreira de Schottky ϕ_{sb} como a diferença entre a função de trabalho do metal ϕ_m e a afinidade eletrônica \mathcal{X}_{cnt} do CNT.

No dispositivo, diferentes condições de fronteira são usadas, dependendo do material da região em questão. Para as regiões metálicas (como os contatos) a condição de Dirichlet [17] é usada para determinar diretamente o valor do potencial eletrostático. Já para as regiões não-metais e para os limites exteriores do dispositivo, a condição de Neumann [17] é usada para demonstrar que o gradiente perpendicular da superfície tem valor constante.

2.5 Determinação da densidade de cargas

Para condições de estado estacionário, a densidade de elétrons $n_{s,d}$ (injeção na fonte e no dreno) é calculada pela Equação (2.8). Onde $D_{cnt}(E, E_c(x))$ é a densidade de estados do nanotubo, $f_{s,d}(E)$ a função de Fermi nas regiões de contato e $\mathcal{T}_{s,d}(E)$ é a probabilidade ocupacional da carga.

$$n_{s,d}(x) = \frac{2}{\pi} \cdot \int_{E_{s,d}^{min}}^{E_{s,d}^{max}} \mathcal{T}_{s,d}(E) \cdot D_{cnt}(E, E_c(x)) \cdot f_{s,d}(E) dE \quad (2.8)$$

Para determinar o número de cargas no canal é necessário somar as duas contribuições: as cargas injetadas no canal pelo contato de fonte (n_s), e as injetadas pelo contato de dreno (n_d).

2.5.1 Densidade de estados de um CNT

A densidade de estados (DOS) é uma medida dos estados disponíveis dentro de um pequeno intervalo de energia, por unidade de comprimento L (para um dispositivo de uni-dimensional) [10].

$D_{cnt}(E, E_c(x))$ é a densidade de estados do CNT. Ela é dependente da energia da banda de condutância (ou valência) na posição x do dispositivo. E_c é o mínimo de energia da banda de

condutância e E_v é o máximo de energia da banda de valência, mas basta descrever a modulação para uma das duas, já que a diferença entre $E_c - E_v = E_g$, e E_g é valor da banda proibida.

O parâmetro de energia de banda não é relevante para a integração da densidade de cargas, mas indica que a DOS é diferente de acordo com a posição dentro do dispositivo. Ou seja, a D_{cnt} pode ter mais estados perto da fronteira (que por sua vez é perto do valor mínimo de E_c ou perto do valor máximo de E_v), de acordo com a posição.

Uma vez que o CNT apresenta características de transporte balístico, as cargas quando injetadas no canal mantêm a sua energia total. Isto é, as propriedades das cargas, como as estatísticas dentro dos contatos, são repassadas às cargas injetadas e de uma certa forma, as cargas as memorizam [10].

2.5.2 Função de Fermi

A probabilidade de elétrons, a uma temperatura particular, ocuparem os níveis de energia disponíveis segue a distribuição de Fermi [18]:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_f)/kT]} \quad (2.9)$$

Onde E_f é uma energia de referência, chamado de nível de Fermi e k é a constante de Boltzmann, igual a $1,38 \times 10^{-23}$ J/K ou $8,617 \times 10^{-5}$ eV/K.

O nível de Fermi é definido como um nível de energia que tem probabilidade de ser preenchido com elétrons [19]. Na Figura 2.8 um diagrama de bandas no espaço real é ilustrado. O eixo x define a distância física no dispositivo, o máximo de energia da banda de valência é E_v , o mínimo de energia da banda de condutância é E_c , e a largura da banda proibida é E_g .

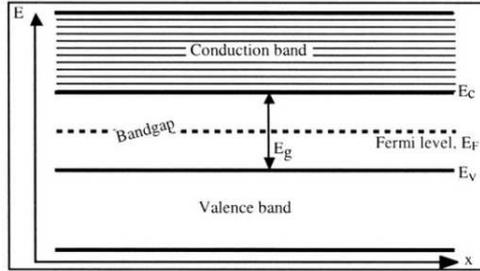


Figura 2.8: Diagrama de bandas no espaço real. Extraído de [19].

No cálculo de densidade de cargas, a estatística de carga f para cada contato é a função de Fermi (Equação (2.9)) que utiliza o nível de Fermi do contato em questão. Então para o contato de fonte (*source*) denota-se:

$$f_s(E) = f(E - E_f^s) \quad (2.10)$$

E para o contato de dreno (*drain*):

$$f_d(E) = f(E - E_f^d) \quad (2.11)$$

A probabilidade de uma lacuna ocupar o nível de energia disponível é a mesma coisa de tal nível não ser ocupado por um elétron. Assim, partindo das Equações (2.10) e (2.11), pode-se definir a estatística de carga g para o estado desocupado de cada contato, demonstrada nas Equações (2.12) e (2.13).

$$g_s(E) = 1 - f_s(E) \quad (2.12)$$

$$g_d(E) = 1 - f_d(E) \quad (2.13)$$

2.5.3 Probabilidade de transmissão

A situação de tunelamento para uma única barreira situada entre x_1 e x_2 e uma carga com probabilidade de transmissão T_s originada no contato de fonte é mostrada na Figura 2.9a. Para uma carga originada no contato de dreno, a situação é simétrica, e a probabilidade de transmissão T_d está ilustrada na Figura 2.9b.

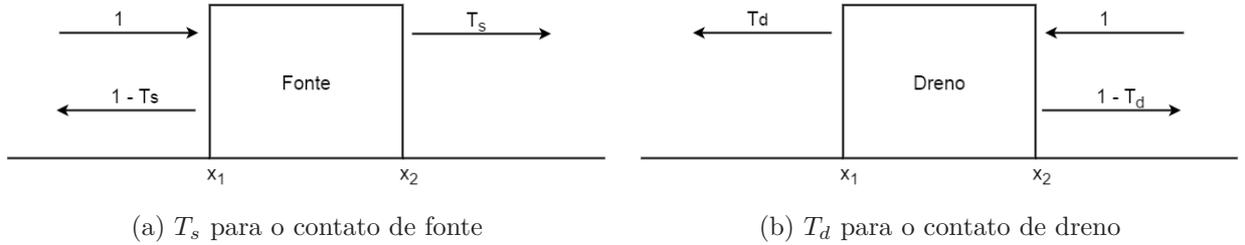


Figura 2.9: Exemplos de tunelamento para uma única barreira

Cada T é então dependente da posição x . As cargas tem $(1 - T)$ chances de serem refletidas, mas como o elétron tem dois *spins*³, usa-se $(2 - T)$.

Para $T_s(x)$ e $T_d(x)$, a parte injetada pode ser calculada da seguinte forma:

$$T_s(x) = \begin{cases} 2 - T_s & \text{se } x < x_1 \\ 0 & \text{se } x_1 < x < x_2 \\ T_s & \text{se } x > x_2 \end{cases} \quad T_d(x) = \begin{cases} 2 - T_d & \text{se } x > x_2 \\ 0 & \text{se } x_1 < x < x_2 \\ T_d & \text{se } x < x_1 \end{cases}$$

A probabilidade de transmissão em função da energia $\mathcal{T}(E)$ descreve a probabilidade de uma carga tunelar através de potenciais barreiras dentro de um dispositivo. No caso especial de um CNTFET, assume-se que as regiões de fonte e dreno estão em equilíbrio termodinâmico com os contatos de metal [10].

O método WKB é uma alternativa para superar a restrição para canais de curto comprimento. Ele calcula \mathcal{T} com uma solução WKB semi-analítica da equação de Schrödinger, evitando uma solu-

³ Além de uma carga, o elétron tem também uma rotação, que pode ser para direita ou para esquerda. O fator de dois leva em conta a dupla degeneração de cada nível decorrente da rotação do elétron [20].

ção numérica demorada desta equação [10]. A aproximação WKB da probabilidade de transmissão \mathcal{T} é vista na Equação (2.14).

$$\mathcal{T} \approx \mathcal{T}^{\text{wkb}}(E) = \exp \left(-2 \int_{x_l}^{x_r} \sqrt{\frac{8\pi^2 m^*}{h^2} (V(x) - E)} dx \right) \quad (2.14)$$

Em geral, o esse método considera a transmissão \mathcal{T} através de uma única barreira, como é ilustrado na Figura 2.10. Para um formato de barreira mais realístico, a posição x influencia na distribuição de energia. Um elétron com baixa energia, que tenta atravessar a barreira na parte mais baixa tem menor probabilidade de ser transmitido que um elétron com maior energia, que tenta atravessar a barreira no pico. A integral de (2.14) é quase proporcional ao comprimento $(x_r - x_l)$. A probabilidade \mathcal{T}^{wkb} de um elétron atravessar a barreira aumenta exponencialmente partindo de energias mais baixas até o pico de energia E_{max} .

Quando um elétron tem energia maior que E_{max} , ocorre a injeção termiônica. Ou seja, o elétron tem energia térmica suficiente para atravessar a barreira sem tunelamento. Nesse caso, considera-se que o tamanho da barreira é zero e $\mathcal{T}^{\text{wkb}} = 1$.

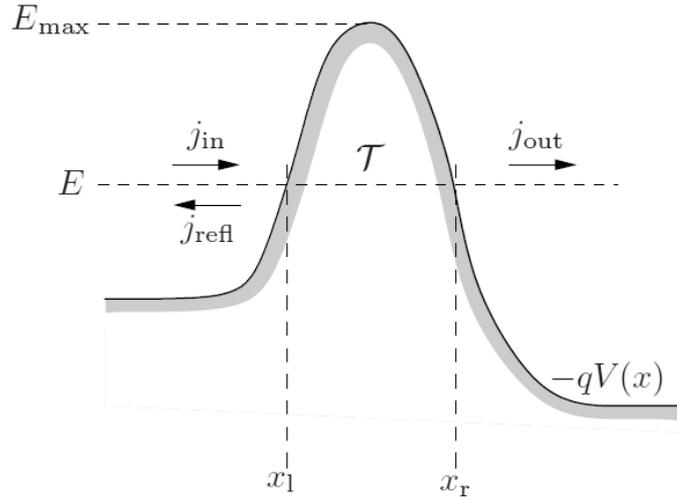


Figura 2.10: Barreira de potencial para visualização do método WKB para uma única barreira. As setas indicam os componentes do fluxo das cargas. Extraído de [10].

2.6 Cálculo da corrente

Para compreensão de fenômenos quânticos de transporte balístico é útil relacionar a corrente com as propriedades de transmissão de um dispositivo em nanoescala. Uma descrição apropriada é dada pela fórmula Landauer-Büttiker [21]:

$$I = \frac{4q}{h} \int \mathcal{T}(E)(f_s - f_d)dE \quad (2.15)$$

Em que q é a carga do elétron, h é a constante de Planck, $\mathcal{T}(E)$ é a probabilidade de transmissão e f_s e f_d são as funções de Fermi para os contatos. A corrente na Equação (2.15) é escalonada por um fator de dois para o *spin* do elétron e um outro fator de dois para a degenerescência vale [20].

Esta é uma outra forma de se interpretar a incidência de corrente, especialmente útil na discussão de nanodispositivos. Em outros dispositivos semicondutores, a corrente é o fluxo de elétrons que se movem devido a força exercida por um campo elétrico, gerado pela diferença entre dois potenciais.

Já neste caso, considera-se a existência de uma bomba que começa a adicionar elétrons no contato de fonte e a subtrair elétrons do contato dreno [22], mantendo assim, a diferença entre f_s e f_d , que dá origem à corrente. Os elétrons têm a tendência de manter o equilíbrio e então tentam aumentar o nível de Fermi no dreno, mas a bomba não permite.

Quando a injeção ocorre na banda de valência, usam-se as estatísticas de carga para lacunas, onde $(f_s - f_d) = (g_s - g_d)$. Similarmente, a corrente é calculada por:

$$I = \frac{4q}{h} \int \mathcal{T}(E)(g_d - g_s)dE \quad (2.16)$$

Capítulo 3

Metodologia

Com o intuito de implementar e avaliar um CNT-RFET, foram seguidos os passos do fluxograma da Figura 3.1.

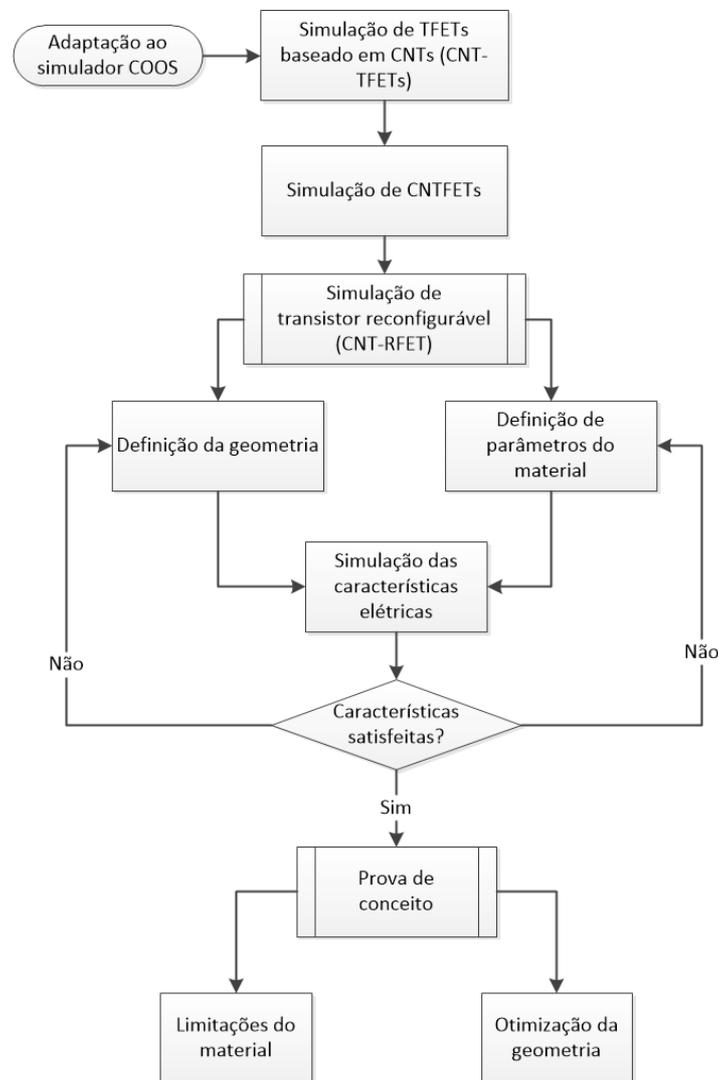


Figura 3.1: Fluxograma do projeto

O primeiro passo de adaptação ao simulador COOS abrangeu as etapas de conexão ao servidor Linux, acesso ao simulador COOS e à sua documentação online, e contato inicial com o arquivo de entrada e comandos de uso do COOS.

Em seguida, foram realizadas simulações de transistores de efeito de campo de tunelamento (*Tunneling Field Effect Transistors*, TFETs) baseados em CNTs (CNT-TFETs), tomando por base os códigos de entrada encontrados no trabalho de pesquisa *Semiclassical modeling and analysis of the electric characteristic of carbon nanotube transistors* feito por Michael Hoffmann da Technischen Universität Dresden [23], com a intenção de reproduzir os resultados e aprofundar a familiarização com o arquivo de entrada usado no COOS.

Após as etapas de ambientação com a ferramenta de simulação, foi realizada a simulação de um simples CNTFET tipo n. E depois teve início o processo de simulação de um transistor reconfigurável baseado em CNT (CNT-RFET), que é o objetivo central deste trabalho. Na sequência deste processo, primeiramente foram definidos os parâmetros de geometria e de material do dispositivo.

- Parâmetros de geometria: comprimento do nanotubo, comprimento dos contatos de porta e distância entre os contatos metálicos e as portas.
- Parâmetros do material: diâmetro do nanotubo, valor da barreira de Schottky e permissividades do dielétrico de portas e dos espaçadores de óxido.

Logo depois, o dispositivo concebido foi simulado para obtenção das características elétricas (curvas de transferência e de saída). Esta etapa é detalhada em outro fluxograma, visto na Figura 3.2.

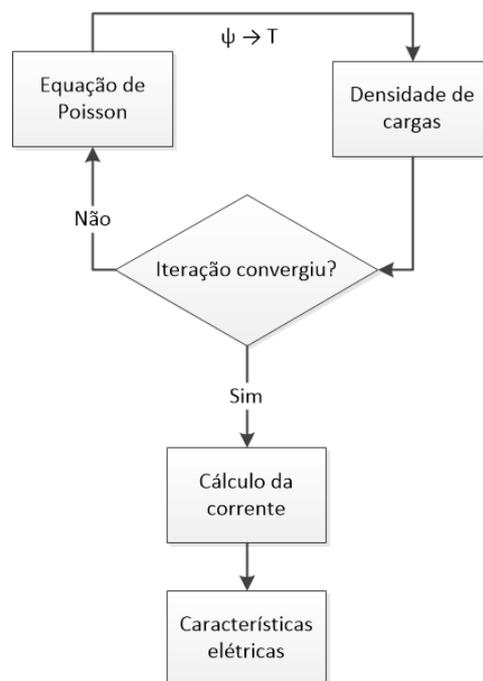


Figura 3.2: Fluxograma para simulação das características de saída

Basicamente, ocorre uma interação entre a equação de Poisson (Equação (2.4)) e equação de densidade de cargas (Equação (2.8)). A equação de Poisson é usada para determinar o potencial eletrostático ψ que, junto com a probabilidade de transmissão \mathcal{T}^{wkb} , definem uma barreira de potencial que é empregada no cálculo da densidade de cargas.

Para um único ponto de trabalho, a interação entre as duas equações ocorre repetidas vezes até que seja atingida a convergência do perfil de saída (que é a densidade de cargas). Cada iteração neste laço é comparada com a anterior e a diferença entre as duas é um parâmetro que mede a convergência. O perfil gerado por cada iteração é sempre diferente, mas a diferença diminui durante o processo, e assim um critério de erro absoluto ou relativo é assumido para a comparação.

Se a convergência foi atingida, a densidade de cargas computada é usada para calcular a corrente. Caso contrário, o laço entre interações é repetido. Depois de vários pontos de operação, as características elétricas são encontradas.

De volta ao processo central, caso as características elétricas não forem satisfeitas, o processo é repetido. Se não, a simulação é tida como completa.

Como resultado e passo final, sucede-se a etapa de prova de conceito, onde as características elétricas são avaliadas com embasamento na análise de um CNTFET tipo n simples. O propósito é verificar a possibilidade de construção de um CNT-RFET. Durante a avaliação, as restrições encontradas no material são delineadas e melhoras na geometria são investigadas.

As subseções a seguir detalharão as ferramentas usadas e o passo a passo do projeto.

3.1 Simulador COOS

COOS é um simulador que se baseia em funções de onda para a modelagem de transistores de CNT a partir da equação de Schrödinger [24]. Ele também pode ser usado para simular outros materiais inorgânicos baseados em nanotubos, caso a estrutura de bandas do tubo e os parâmetros dos modelos de contatos forem cuidadosamente ajustados.

A licença de uso do COOS foi concedida pela Technische Universität Dresden¹, bem como acesso à documentação online [25]. O servidor Linux, onde o simulador é acessado remotamente, se encontra no Laboratório de Dispositivos e Circuitos Integrados (LDCI), do Departamento de Elétrica da UnB.

Nesse estudo, este simulador foi usado para resolver o modelo de transporte balístico apresentado na Seção 2. Especificamente, o fluxograma 3.2 descrito no início deste Capítulo retrata como o COOS calcula a equação de Poisson e a densidade de cargas para determinar a corrente.

No entanto, o COOS também pode realizar vários outros tipos de simulação, já que os parâmetros especificados no arquivo de entrada estabelecem qual modelo de transporte será empregado. Estão listados na documentação online [25] do simulador os parâmetros que podem ser usados na

¹Grupo de Modelagem para Eletrônicos Emergentes no Cluster de Excelência “Center for advancing electronics Dresden (Cfaed)”, liderado por Martin Claus.

solução das equações internas:

- parâmetros para a BTE com o método Monte Carlo
- parâmetros para a solução da equação de Poisson
- parâmetros para o solucionador balístico (DC)
- parâmetros para solucionador balístico (transiente)
- parâmetros para o cálculo numérico da distribuição de Fermi
- parâmetros para considerar o bloqueio Pauli para o espalhamento
- solução WKB
- detecção de estado estacionário
- parâmetros para solucionador de difusão e deriva

Muitos outros parâmetros são definidos para cada simulação. Neste estudo, o *framework* usado compreende a equação de Poisson bidimensional em coordenadas cilíndricas e aplica o método de Newton com 50 iterações na solução balística das equações.

No código de entrada são determinados os materiais usados, os parâmetros para a diferentes estruturas, o modelo de estrutura de bandas, o perfil de dopagem, as tensões a serem aplicadas e como serão salvas as saídas de cada simulação. O esboço do código de entrada usado no COOS está detalhado no Anexo I.1.

O arquivo de entrada é enviado ao servidor com o auxílio de um cliente SFTP (*SSH File Transfer Protocol*, protocolo de transferência de arquivos com segurança SSH). O comando de uso do COOS, que está melhor explicado no Anexo I.2, é usado para dar início à simulação.

O tempo de duração médio para os primeiros testes foi de 3 horas, mas com a ampliação do detalhamento de cada simulação e do uso das diversas ferramentas do simulador, o tempo médio aumentou para 8 horas, chegando a mais de 15 horas em alguns casos.

Os arquivos de saída da simulação são resgatados do servidor novamente pelo uso de um cliente SFTP. Por fim, todos os resultados numéricos obtidos são visualizados usando a ferramenta MATLAB.

3.2 Simulação de CNT-TFETs

Algumas simulações de CNT-TFETs encontradas em [23] foram recriadas no simulador COOS (visto na Seção 3.1).

O primeiro teste feito foi reproduzir a variação da concentração de dopagem N_d no lado do dreno, enquanto N_a foi mantido constante. Tanto a versão original (Figura 3.3a), contida em [23], e a versão reproduzida com sucesso (Figura 3.3b) podem ser vistas na Figura 3.3.

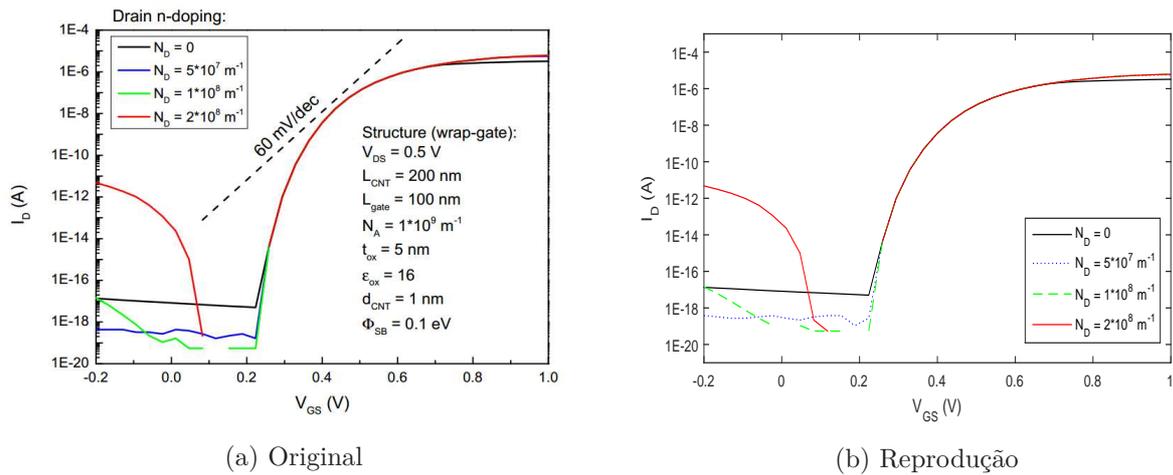
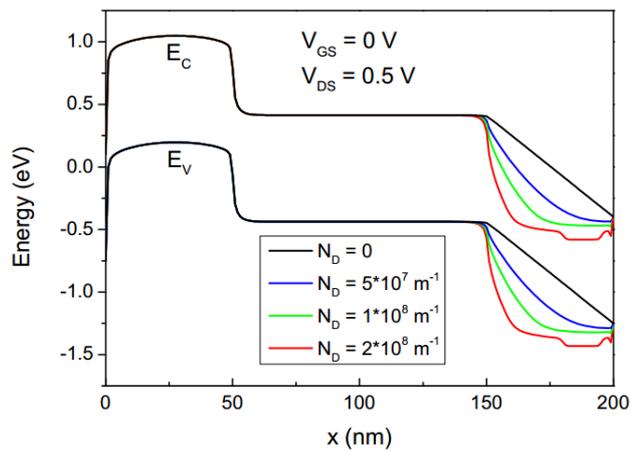
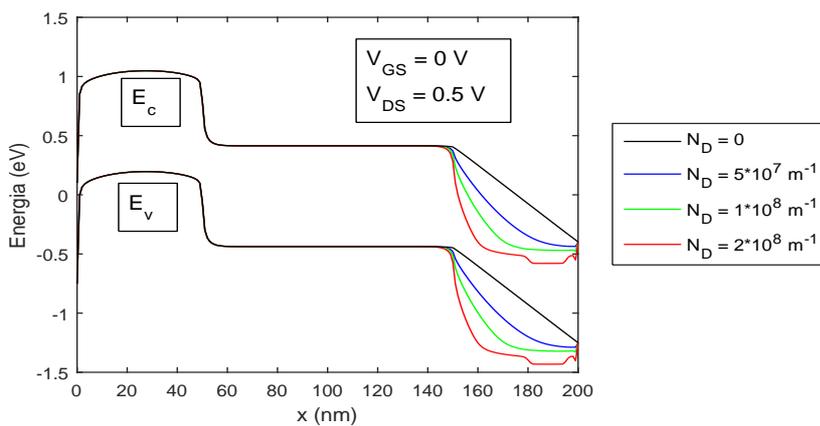


Figura 3.3: Primeiro teste



(a) Original



(b) Reprodução

Figura 3.4: Segundo teste

As figuras mostram que o comportamento ambipolar do CNT-TFET pode ser significativamente reduzido quando N_d é menor que N_a . Ao mesmo tempo, I_{on} diminui ligeiramente para concentrações N_d menores. Esta diminuição é mais significativa para $N_d = 0$ e I_{off} também aumenta novamente para $N_d < 108m^{-1}$.

O segundo teste visava reproduzir o diagrama de bandas da mesma simulação anterior. A versão original (Figura 3.4a) e a versão reproduzida (Figura 3.4b) encontram-se na Figura 3.4.

O diagrama de bandas mostra que o aumento da inclinação da banda de curvatura para maior dopagem leva à ocorrência de tunelamento de banda para banda (*band-to-band-tunneling*, BTBT) no lado do dreno ($x \approx 150$ nm). Os elétrons injetados no canal por BTBT da fonte encontram uma barreira maior no lado do dreno para concentrações N_d pequenas.

O código de entrada dessas simulações foi disponibilizado em [23] e sua maior diferença para com os códigos do restante deste estudo é a definição do perfil de dopagem.

3.3 Simulação de CNTFETs

Para melhorar a avaliação dos resultados esperados para o CNT-RFET, um CNTFET tipo n foi simulado usando o COOS. A estrutura usada foi semelhante ao transistor apresentado na Seção 2.4 da Revisão Bibliográfica, ou seja, um transistor com simetria radial e uma estrutura de porta circundante, ilustrado na Figura 2.7.

Os resultados e análise dessa simulação serão apresentados no Capítulo 4.

3.4 Simulação de CNT-RFETs

Após a recriação com êxito dos resultados da simulação de CNT-TFETs, foram feitas diversas simulações para investigar o comportamento de um transistor reconfigurável baseado em nanotubos de carbonos (CNT-RFET) e aperfeiçoá-lo.

A seção transversal do dispositivo simulado e a definição dos parâmetros geométricos são mostrados na Figura 3.5.

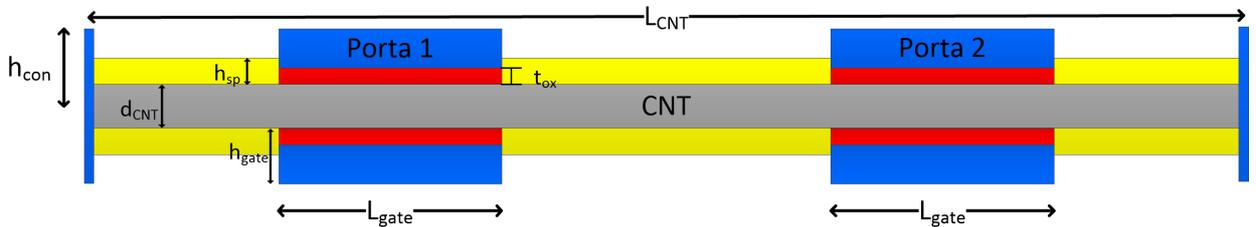


Figura 3.5: Esquemático do CNT-RFET simulado

Os parâmetros retratados são:

- h_{con} : largura radial dos contatos de fonte e dreno.

- L_{gate} : comprimento dos contatos de porta.
- h_{gate} : largura radial dos contatos de porta.
- L_{cnt} : comprimento do CNT.
- d_{cnt} : diâmetro do CNT.
- t_{ox} : espessura do óxido de porta.
- h_{sp} : altura dos espaçadores de óxido.

Outros parâmetros de simulação foram a altura da barreira de Schottky (ϕ_{sb}) dos contatos de fonte e dreno, a distância entre os contatos metálicos e as portas (chamada de s , *spacer* ou espaçador de óxido) e as permissividades relativas ϵ_{ox} e ϵ_{sp} dos dielétrico de portas e dos espaçadores de óxido, respectivamente.

Por decisão de projeto, alguns parâmetros foram definidos e mantidos constantes durante todo o estudo do CNT-RFET. Eles estão listados na Tabela 3.1.

Parâmetro	Valor
t_{ox}	5 nm
h_{con}	0.5 nm
h_{gate}	0.5 nm

Tabela 3.1: Parâmetros constantes para todas as simulações

Foram investigadas variações dos seguintes parâmetros: altura da barreira de Schottky, diâmetro do nanotubo, comprimento do nanotubo, comprimento dos contatos de porta, comprimento do espaçador de óxido entre dreno/fonte e o contato de porta correspondente e permissividades relativas.

Tais investigações estão descritas no Capítulo 4. Todas as simulações foram realizados no simulador COOS (Seção 3.1).

Capítulo 4

Resultados e Análises

Neste capítulo são apresentados os resultados encontrados, e suas respectivas análises. Primeiramente os resultados da simulação de um CNTFET tipo n são examinados na seção 4.1. Depois, as simulações que foram conduzidas segundo o fluxograma apresentado na Figura 4.1 são discutidas.

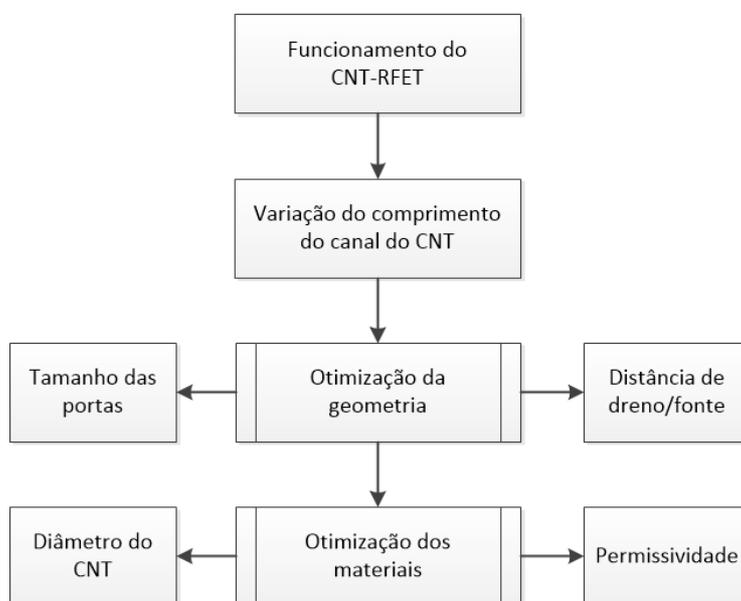
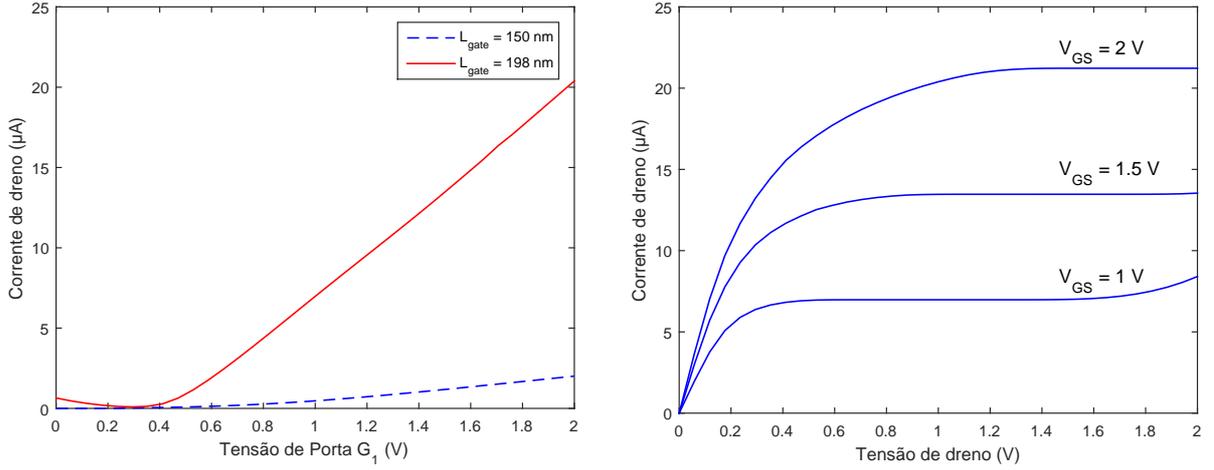


Figura 4.1: Fluxograma de apresentação dos resultados das simulações

Na Seção 4.2 o funcionamento básico do CNT-RFET simulado e apresentado como protótipo é abordado. Na Seção 4.3 é investigado a variação do comprimento do canal do CNT. As próximas seções lidam com a otimização do CNT-RFET proposto. A otimização da geometria apresenta os resultados obtidos para variação do tamanho das portas (Seção 4.4.1) e variação da distância de dreno/fonte (Seção 4.4.2), enquanto a otimização dos materiais mostra o efeito da variação do diâmetro do nanotubo (Seção 4.5.1) e da variação das permissividades relativas ϵ_{ox} e ϵ_{sp} (Seção 4.5.2).



(a) Curva de transferência medida para o CNTFET, (b) Curvas de saída medidas para o CNTFET com diferentes L_{gate} $L_{\text{gate}} = 198 \text{ nm}$

Figura 4.2: Curvas de transferência e de saída medidas para o CNTFET simulado

4.1 Simulação do CNTFET

Um CNTFET tipo n foi simulado duas vezes com diferentes comprimentos de porta e espaçadores de óxido respectivos. Os parâmetros constantes das simulações estão listados na Tabela 4.1a, enquanto os parâmetros variados estão na Tabela 4.1b. A polarização de voltagem aplicada foi $V_D = 1V$ e V_G variando de $0V$ até $2V$.

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	200 nm
d_{cnt}	1.0 nm
ϕ_{sb}	0.425 eV
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

(a) Parâmetros constantes

L_{gate} (nm)	$s_{\text{s,d}}$ (nm)
150	25
198	1

(b) L_{gate} e $s_{\text{s,d}}$ variados

Tabela 4.1: Parâmetros da simulação do CNTFET

A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:

- L_{cnt} , d_{cnt} , L_{gate} e $s_{\text{s,d}}$ foram decisão de projeto.
- ϕ_{sb} é a altura da barreira calculada de acordo com o diâmetro escolhido.
- Os valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp} são o padrão de permissividade do óxido.

Típicas características de transferência (I_D em função de V_{GS} para valores fixos de V_{DS}) e características de saída (I_D em função de V_{DS} para valores fixos de V_{GS}) do CNTFET estão respectivamente nas Figuras 4.2a e 4.2b.

A curva de saída de um transistor é de extrema importância para o projeto de circuitos usando tal transistor. Nela, duas regiões são identificadas: a de triodo e a de saturação. Quando em saturação, a corrente fornecida pelo transistor é independente da tensão de dreno aplicada. Nesse caso, como o CNT tem características balísticas, a saturação é perfeita, sem interferência da modulação do canal ou de resistências.

O diagrama de bandas foi obtido para três estados e está ilustrado na Figura 4.3, onde a tensão de porta correspondente de cada estado está listada, além dos níveis de Fermi do contato de fonte (E_s) e dreno (E_d).

Em $V_G = 0V$, na polarização *off* (Figura 4.3a), o elétron vê todo o canal como uma grande barreira e não consegue atravessar. Já quando $V_G = 2V$ (Figura 4.3c), tem-se a polarização *on*, e o elétron consegue tunelar pelas barreira e a corrente flui.

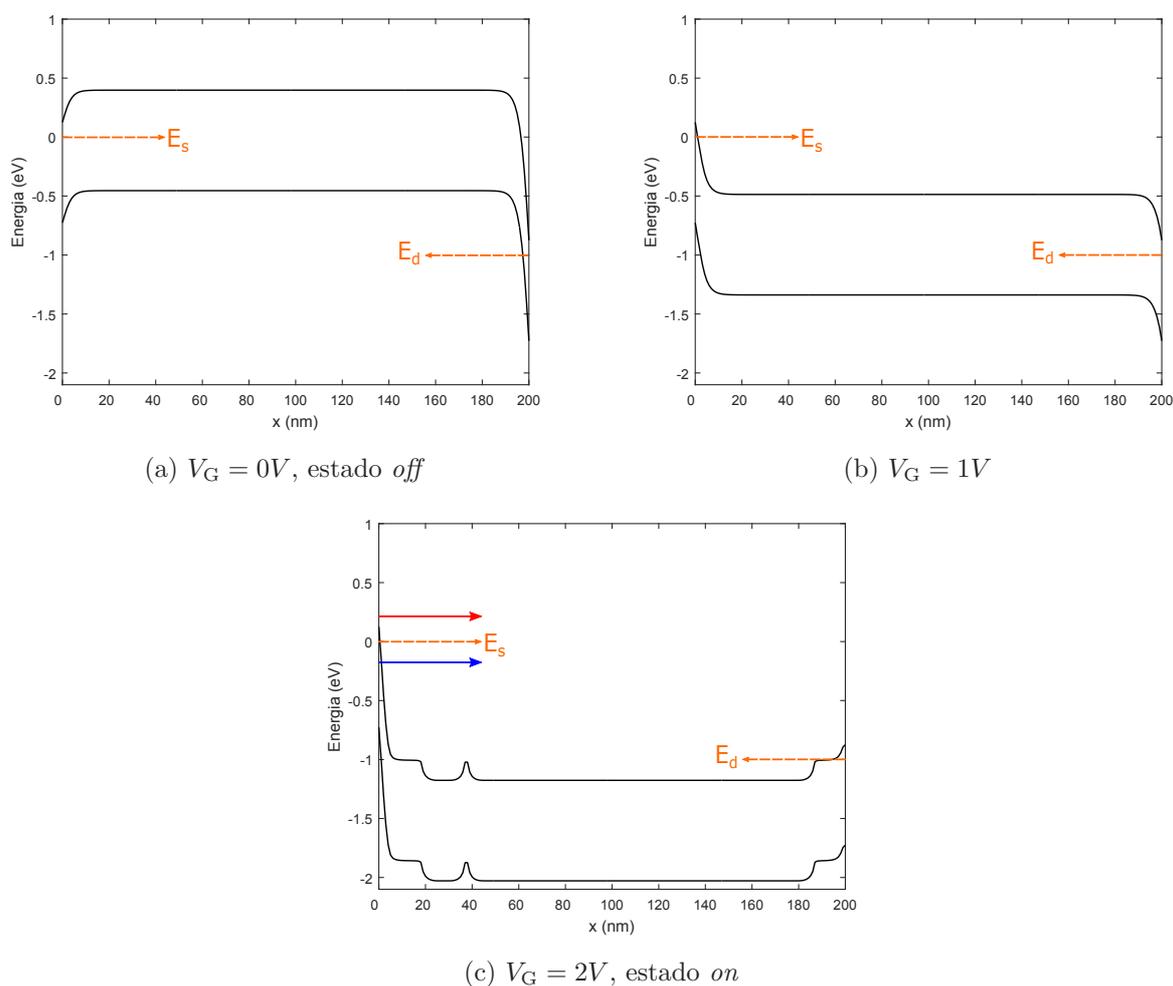


Figura 4.3: Diagrama de bandas para CNTFET tipo n

4.2 Funcionamento do CNT-RFET

O método de granularidade fina para reconfiguração foi aplicado ao transistor simulado, onde a programação ocorre através de um sinal elétrico. O parâmetro de destino da reconfiguração é a polaridade FET, ou seja, mudar o comportamento do transistor para o tipo p ou n-FET. Dessa forma, o CNT-RFET é essencialmente um transistor de efeito de campo, mas com duas portas:

- Porta de programação posicionada no contato de dreno, que bloqueia o tipo de carga não desejada, selecionando assim a configuração do transistor.
- Porta de controle posicionada no contato de fonte, que controla a injeção das cargas desejadas na região ativa.

Os valores dos parâmetros geométricos e estruturais usados na simulação para demonstração do funcionamento do CNT-RFET estão listados na Tabela 4.2.

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	200 nm
d_{cnt}	1.0 nm
L_{gate}	66 nm
$s_{\text{s,d}}$	1 nm
s_{gates}	66 nm
ϕ_{sb}	0.425 eV
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

Tabela 4.2: Parâmetros da simulação do CNT-RFET

A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:

- d_{cnt} foi decisão de projeto.
- L_{cnt} foi definido após as simulações de variação do tamanho do canal, abordadas em 4.3.
- L_{gate} e $s_{\text{s,d}}$ foram definidos após as simulações de otimização da geometria, abordadas em 4.4.
- Novamente, ϕ_{sb} é a altura da barreira calculada de acordo com o diâmetro escolhido.
- E como antes, os valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp} são o padrão de permissividade do óxido.

Na simulação, o potencial da porta à direita no esquemático mostrado na Figura 3.5, $V_{\text{G}2}$, é a tensão de programação, e o potencial da porta à esquerda, $V_{\text{G}1}$ é usado para controle de condutância.

Tensão	Valor (V)
V_{G1}	-2 a 2
V_{G2}	-2
V_D	-1

(a) Polarização para configuração p-FET

Tensão	Valor (V)
V_{G1}	-2 a 2
V_{G2}	2
V_D	1

(b) Polarização para configuração n-FET

Tabela 4.3: Resumo da polarização de tensão da simulação de funcionamento do CNT-RFET

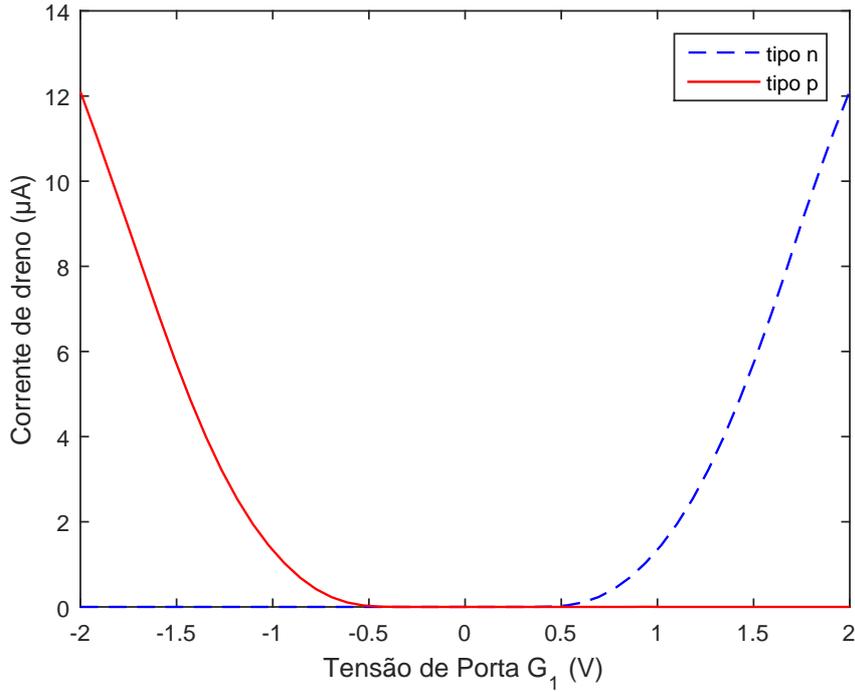


Figura 4.4: Curva de transferência medida para o CNT-RFET programado para tipo p (em vermelho) e tipo n (linha azul) em escala linear

A polarização da voltagem aplicada às portas e fixada nos contatos está resumidamente listada na Tabela 4.3. A curva de transferência em escala linear e em escala logarítmica (com indicação do tipo de injeção de cargas que ocorre em cada região) estão respectivamente nas Figuras 4.4 e 4.5.

O comportamento tipo p-FET foi programado setando V_{G2} para $-2V$ e a voltagem de dreno, V_D , para $-1V$ constante. Por conseguinte, o potencial V_{G2} bloqueia eficientemente a injeção de elétrons no contato de dreno. O potencial V_{G1} é variado de acordo com uma rampa de valores negativos a positivos. Para $V_{G1} < 0$ a curva ascendente da banda estimula a injeção de lacunas na região ativa no lado do contato de fonte. Quando os valores de V_{G1} chegam a valores positivos, a injeção de lacunas é bloqueada, desligando o FET. A característica de transferência resultante (linha vermelha na Figura 4.4) assemelha-se ao comportamento típico p-FET.

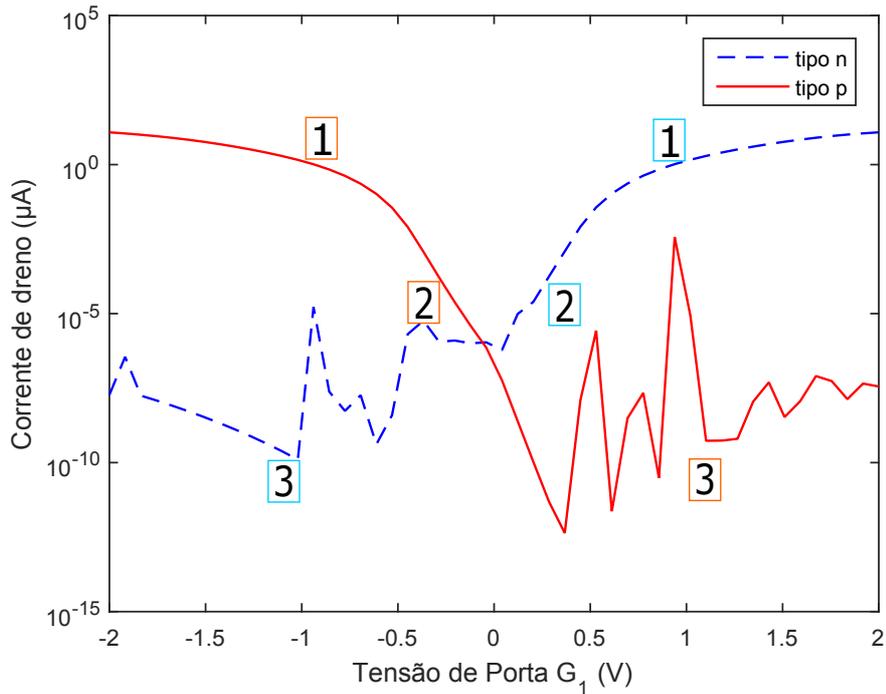


Figura 4.5: Curva de transferência em escala logarítmica com indicação das regiões de operação do transistor: emissão termiônica combinada com tunelamento de cargas (1), apenas emissão termiônica (2) e estado *off* (3).

Já o comportamento tipo n-FET foi programado alternando a polaridade da porta de programação V_{G2} para $+2V$ e a voltagem de dreno para $V_D = +1V$, ou seja, aplicando a configuração eletrostática inversa da situação do tipo p. Nesse caso, o potencial V_{G2} bloqueia a injeção de lacunas oriundas do contato de dreno na região ativa e permite a injeção de elétrons. Quando $V_{G1} < 0$, a injeção de elétrons é impedida no contato de fonte pela barreira de alta energia. Aumentar V_{G1} para valores positivos reduz a banda no contato de fonte, reforçando a injeção de elétrons. A curva de transferência resultante (linha azul na Figura 4.4) se assemelha de fato a um n-FET, como pode ser atestado pela Figura 4.2a (um dos resultados da simulação de um CNTFET tipo n).

As características de saída para ambas configurações do CNT-RFET estão na Figura 4.6. A simetria das curvas vermelhas e azuis indicam a reconfiguração esperada para o transistor. Além disso, as curvas para o comportamento n-FET mostram-se muito semelhantes às curvas simuladas pra um CNTFET tipo n, evidenciado na Figura 4.2b.

As curvas de transcondutância ($g_m = \frac{dI_D}{dV_{G1}}$) para ambas configurações podem ser vistas na Figura 4.7.

Em resumo, o dispositivo CNT-RFET permite que a polaridade de um mesmo FET seja selecionada apenas aplicando uma voltagem de programação em uma porta. Um mesmo dispositivo pode funcionar com configuração n ou p.

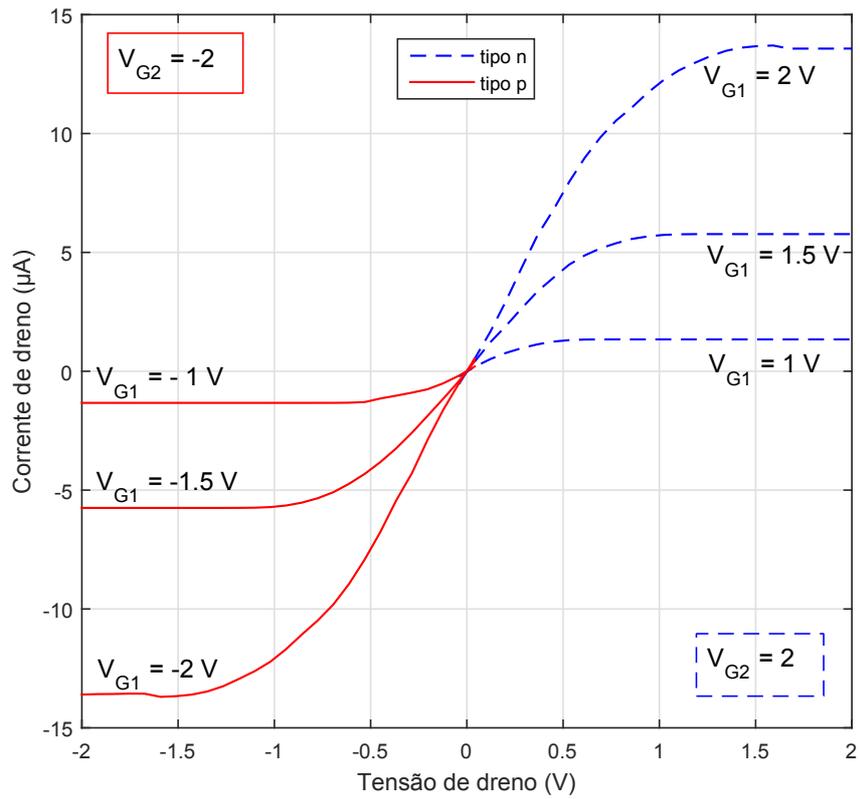
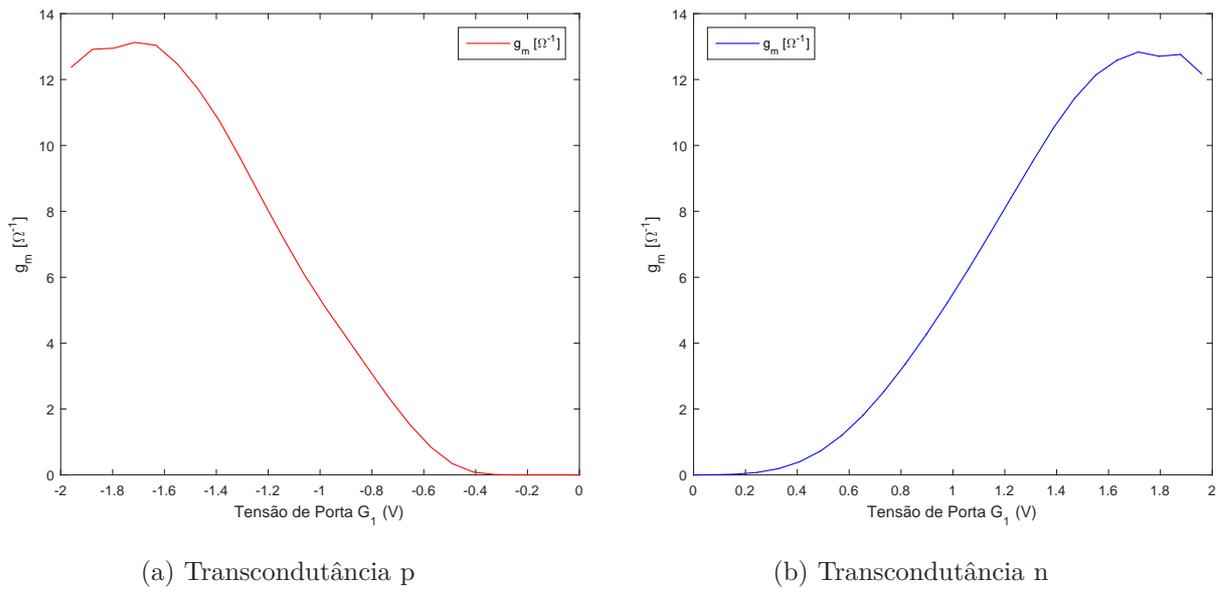


Figura 4.6: Curvas de saída medidas para o CNT-RFET simulado



(a) Transcondutância p

(b) Transcondutância n

Figura 4.7: Transcondutância para as configurações p e n do CNT-RFET simulado.

4.2.1 Diagramas de bandas para configuração tipo p

A polarização de tensão, já mostrada na Tabela 4.3, também foi usada para confecção destes diagramas e está apresentada de forma mais didática na Figura 4.8. Os pontos usados nos diagramas de bandas, com seus respectivos estados de operação, estão listados na Tabela 4.4.

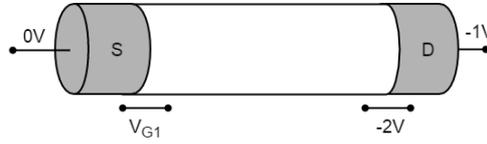


Figura 4.8: Ilustração da tensão usada para obtenção do diagrama de bandas para a configuração p CNT-RFET simulado.

Ponto de operação	Estado	Tensão (V)
a	On	-2.000
b	Transição	-0.004
c	Off	2.000

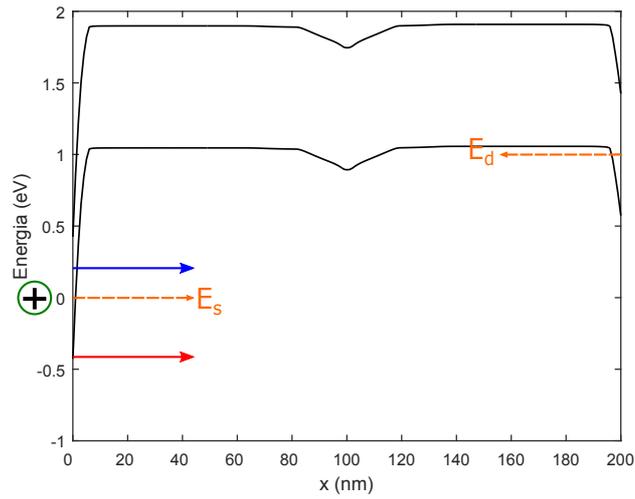
Tabela 4.4: Pontos de operação para o diagrama de bandas da configuração p

A Figura 4.9 contém os diagramas de bandas do transistor simulado na configuração p. Para cada ponto de operação, tem-se uma interpretação do que está acontecendo com as cargas no canal:

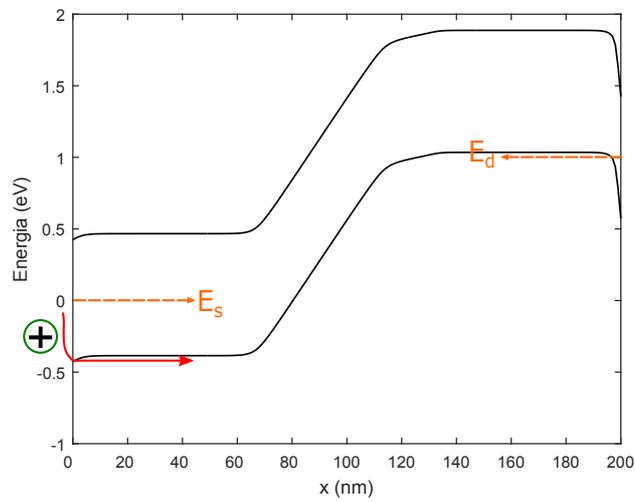
Ponto de operação a Estado *on* do p-FET: a corrente flui da esquerda para a direita. As lacunas atravessam a barreira tanto por tunelamento (seta azul) quanto por emissão termiônica (seta vermelha) e são livres para percorrer o canal sem perturbações até o dreno.

Ponto de operação b Agora, a lacuna tem que atravessar a barreira de 0.425 eV pelos 66 nm de porta. Então, só ocorre emissão termiônica (seta vermelha). A corrente é bem pequena, se comparada com a situação anterior, mas ainda flui.

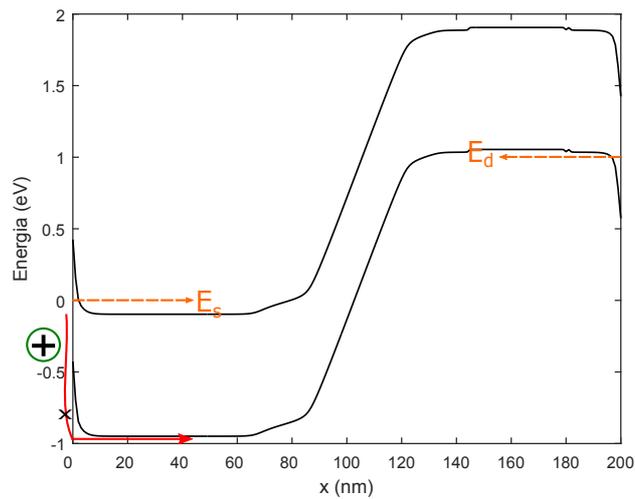
Ponto de operação c Estado *off* do p-FET: a barreira é tão grande (1 eV) que o canal se fecha e as lacunas não conseguem mais atravessar.



(a) $V_G = -2.000V$, estado *on*



(b) $V_G = -0.004V$



(c) $V_G = 2.000V$, estado *off*

Figura 4.9: Diagrama de bandas para CNTFET tipo p com descrição dos tipos de injeção de cargas

4.2.2 Diagrama de bandas para configuração tipo n

A polarização de tensão da Tabela 4.3 também foi usada para confecção destes diagramas. A do tipo n está apresentada de forma mais didática na Figura 4.10. Os pontos usados nos diagramas de bandas estão listados na Tabela 4.5.

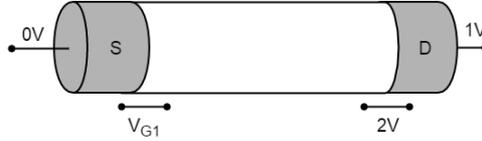


Figura 4.10: Ilustração da voltagem usada para obtenção do diagrama de bandas para a configuração n CNT-RFET simulado.

Ponto de operação	Estado	Tensão (V)
a	On	2.000
b	Transição	0.004
c	Off	-2.000

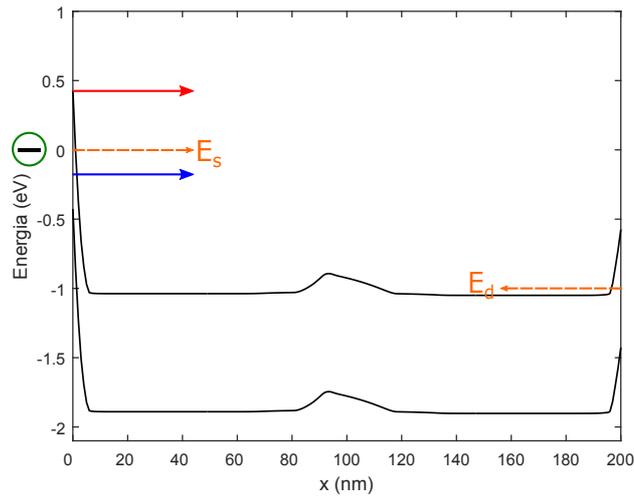
Tabela 4.5: Pontos de operação para o diagrama de bandas da configuração n

A Figura 4.11 contém os diagramas de bandas do transistor simulado na configuração n. Similarmente, tem-se a interpretação do que ocorre em cada ponto de operação com as cargas no canal:

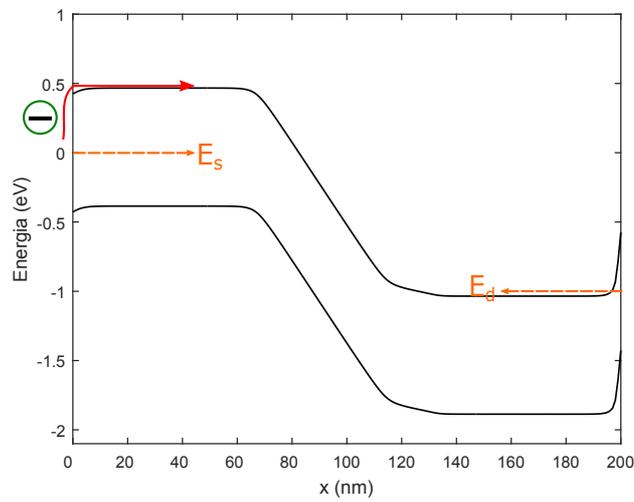
Ponto de operação a Estado *on* do n-FET: a corrente flui da direita para esquerda. As lacunas encontram uma grande barreira, mas os elétrons conseguem fluir. Eles atravessam a barreira tanto por tunelamento (seta azul) quanto por emissão termiônica (seta vermelha) e são livres para percorrer o canal sem perturbações até a fonte.

Ponto de operação b Agora, o elétron tem que atravessar a barreira de 0.425 eV, pelos 66 nm de porta. Então, só ocorre emissão termiônica (seta vermelha). A corrente é bem pequena, se comparada com a situação anterior, mas ainda flui.

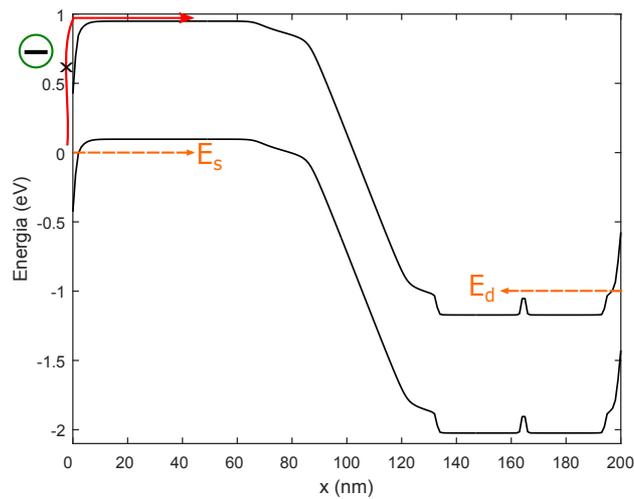
Ponto de operação c Estado *off* do n-FET: a barreira é tão grande (1 eV) que o canal se fecha e os elétrons não conseguem mais atravessar.



(a) $V_G = 2.000V$, estado *on*



(b) $V_G = 0.004V$



(c) $V_G = -2.000V$, estado *off*

Figura 4.11: Diagrama de bandas para CNTFET tipo n com descrição dos tipos de injeção de cargas

4.2.3 Assimetria devido à altura da barreira de Schottky

Para demonstrar a assimetria entre as configurações p e n dependendo do valor da altura da barreira de Schottky (ϕ_{sb}), uma simulação foi feita com os parâmetros mostrados na Tabela 4.6.

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	680 nm
d_{cnt}	1.0 nm
L_{gate}	30 nm
$s_{s,d}$	85 nm
s_{gates}	450 nm
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

Tabela 4.6: Parâmetros da simulação de assimetria

A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:

- d_{cnt} , L_{cnt} , L_{gate} e $s_{s,d}$ foram decisão de projeto.
- Os valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp} são o padrão de permissividade do óxido.

Para $d_{cnt} = 1.0$ nm, a largura da banda proibida E_g é um pouco maior que 0.8 eV, como pode ser recordado da Figura 2.4. Assim, foram escolhidos valores para ϕ_{sb} que refletissem três casos: menores, iguais e maiores que $E_g/2$.

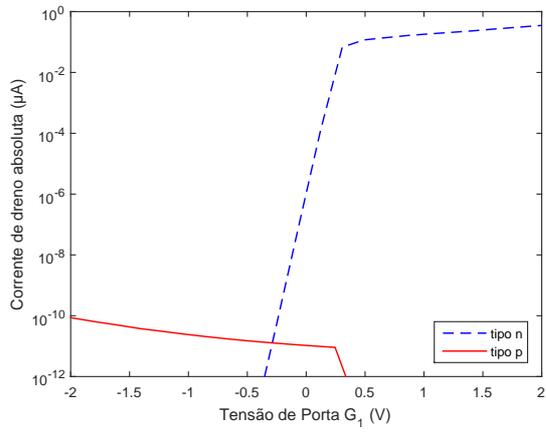
As curvas para valores menores que $E_g/2$ (0.125 eV, 0.225 eV e 0.325 eV) estão nas Figuras 4.12a, 4.12b e 4.12c. Nesse caso, ϕ_{sb} está mais próximo da banda de valência e a injeção de elétrons é prejudicada. Por isso a curva azul (tipo n) é menor que a vermelha (tipo p).

Para um transistor reconfigurável, é necessário que a altura da barreira de Schottky seja simétrica, ou seja, exatamente no meio da banda proibida. Para esse estudo, o valor igual à $E_g/2$ é aproximadamente 0.425 eV (visto na Figura 4.12d). Assim, a injeção de cargas não é favorecida para nenhum dos contatos.

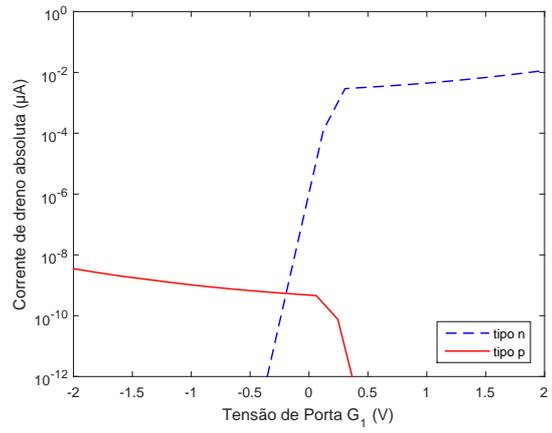
Para valores maiores que $E_g/2$ (0.475 eV e 0.495 eV) representados nas Figuras 4.12e e 4.12f, a injeção de lacunas é prejudicada devido à proximidade da banda de condutância e, dessa forma, o inverso acontece: a curva azul (tipo n) é maior que a vermelha (tipo p).

4.3 Variação do comprimento do canal do CNT

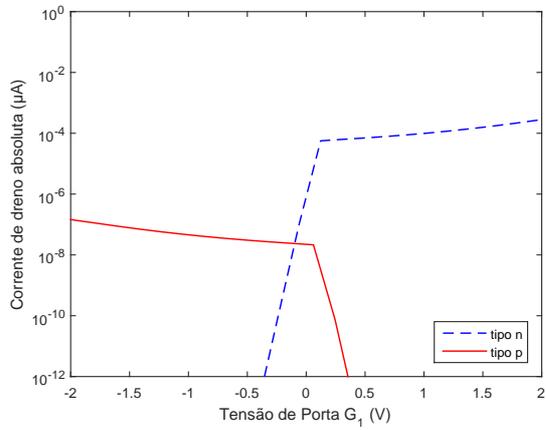
Para demonstrar que o CNT-RFET simulado apresenta características de transporte balístico, foram feitos testes com diferentes comprimentos do canal de CNT. Os parâmetros mantidos constantes estão listados na Tabela 4.7a, e os valores usados para L_{cnt} , L_{gate} e espaçadores de óxido entre as portas (s_{gates}) podem ser vistos na Tabela 4.7b.



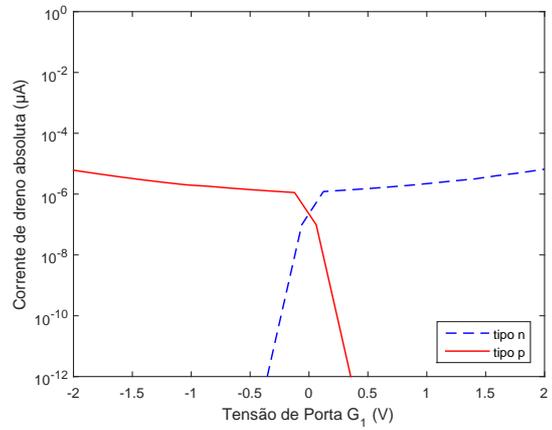
(a) $\phi_{sb} = 0.125$ eV



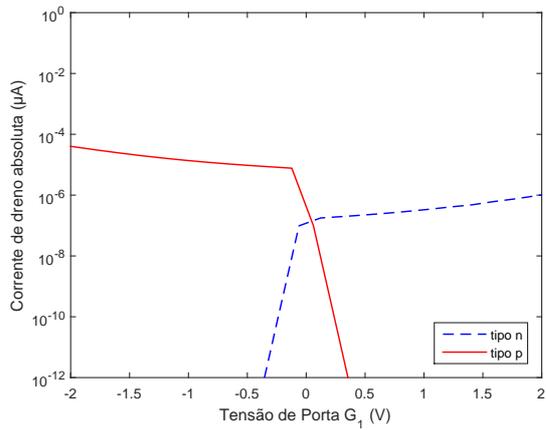
(b) $\phi_{sb} = 0.225$ eV



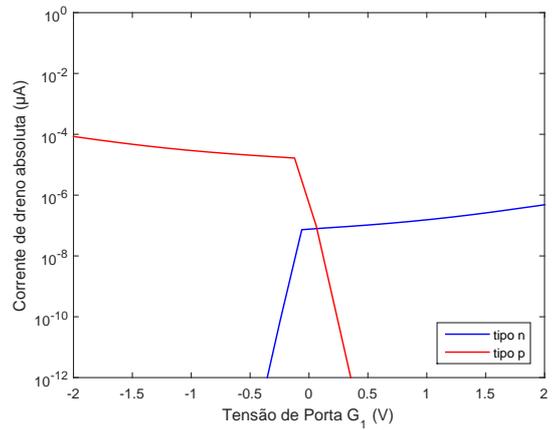
(c) $\phi_{sb} = 0.325$ eV



(d) $\phi_{sb} = 0.425$ eV



(e) $\phi_{sb} = 0.475$ eV



(f) $\phi_{sb} = 0.495$ eV

Figura 4.12: Curvas de transferência do CNT-RFET simulado para diversos tamanhos de ϕ_{sb}

Parâmetro	Valor
d_{cnt}	1.0 nm
$s_{\text{s,d}}$	1 nm
ϕ_{sb}	0.425 eV
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

(a) Parâmetros constantes

L_{cnt} (nm)	L_{gate} (nm) e s_{gates} (nm)
92	30
122	40
161	51
200	66
302	100

(b) L_{cnt} , L_{gate} e s_{gates} variados

Tabela 4.7: Parâmetros da simulação de variação do comprimento canal

A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:

- d_{cnt} e os valores de L_{cnt} foram decisão de projeto.
- $s_{\text{s,d}}$ é o menor valor de espaçador de óxido permitido pelo simulador.
- ϕ_{sb} é a altura da barreira calculada de acordo com o diâmetro escolhido.
- Os valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp} são o padrão de permissividade do óxido.
- L_{gate} e s_{gates} seguiram uma proporção de 33% do L_{cnt} simulado.

As curvas resultantes para cada valor de L_{cnt} estão na Figura 4.13. As correntes de dreno observada nas Figuras 4.13a, 4.13b, 4.13c e 4.13d possuem o mesmo valor, demonstrando que são independente à L_{cnt} .

No entanto, como mencionado no Capítulo 2, o canal apresenta a característica balística até o ponto do caminho médio livre, que para CNTs é de 100 nm. No caso da simulação, L_{cnt} pode ser estendido até algumas centenas de nanômetros, pois o simulador COOS supõe que não haverá espalhamento. Finalmente, $L_{\text{cnt}} = 200$ nm foi escolhido como melhor valor para esse estudo de CNT-RFETs.

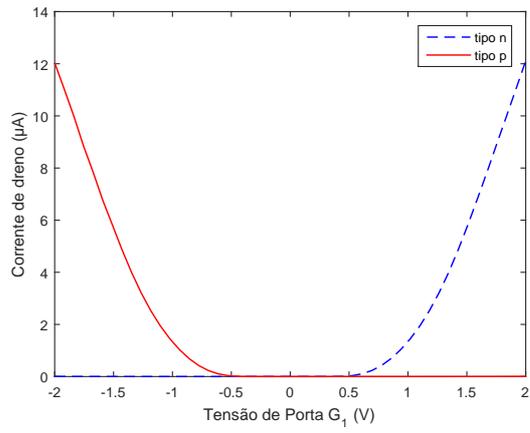
4.4 Otimização da geometria

Os parâmetros variados nessa investigação foram primordialmente o comprimento das portas (L_{gate}) e a distância entre os contatos de fonte/dreno e as portas correspondentes ($s_{\text{s,d}}$).

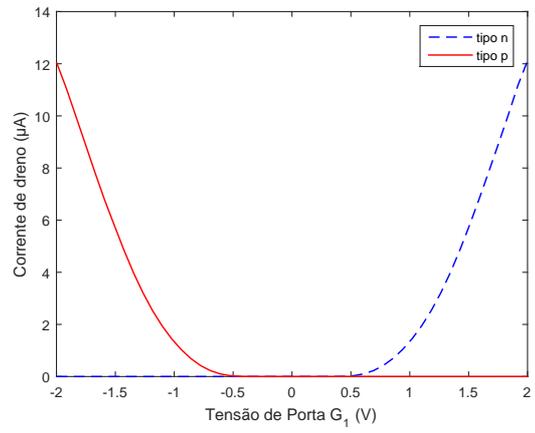
4.4.1 Tamanho das portas

Para a investigação da variação do tamanho das portas L_{gate} no CNT-RFET, foram escolhidos diversos valores de L_{gate} . E os espaçadores de óxido entre as portas (s_{gates}) foram variados de acordo. Os valores mantidos constantes na simulação estão listados na Tabela 4.8a, e os variados na Tabela 4.8b.

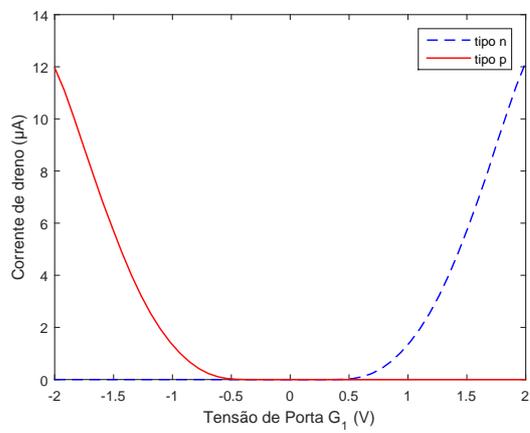
A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:



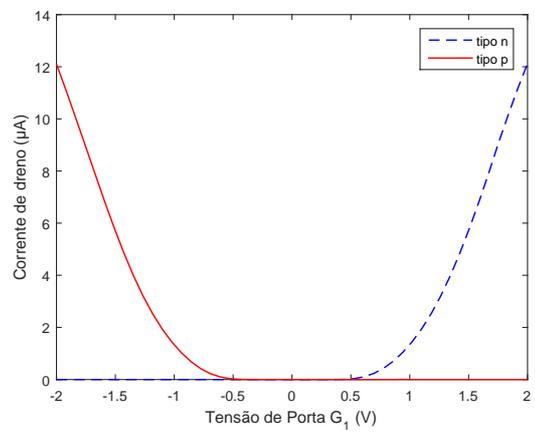
(a) $L_{\text{CNT}} = 92 \text{ nm}$



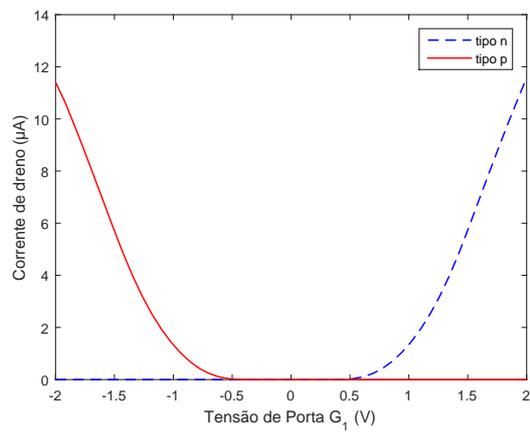
(b) $L_{\text{CNT}} = 122 \text{ nm}$



(c) $L_{\text{CNT}} = 161 \text{ nm}$



(d) $L_{\text{CNT}} = 200 \text{ nm}$



(e) $L_{\text{CNT}} = 302 \text{ nm}$

Figura 4.13: Curvas de transferência do CNT-RFET simulado para diversos tamanhos de L_{CNT}

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	200 nm
d_{cnt}	1.0 nm
$s_{\text{s,d}}$	1 nm
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

(a) Parâmetros constantes

L_{gate} (nm)	s_{gates} (nm)
17	164
33	132
50	98
66	66
84	30

(b) L_{gate} e s_{gates} variados

Tabela 4.8: Parâmetros da simulação de variação do tamanho das portas

Ponto de operação	Estado	Tensão (V)
a	On	-2.000
b	Transição	-0.004
c	Off	2.000

Tabela 4.9: Pontos de operação para o diagrama de bandas da configuração n para $L_{\text{gate}} = 17, 66$ e 84 nm

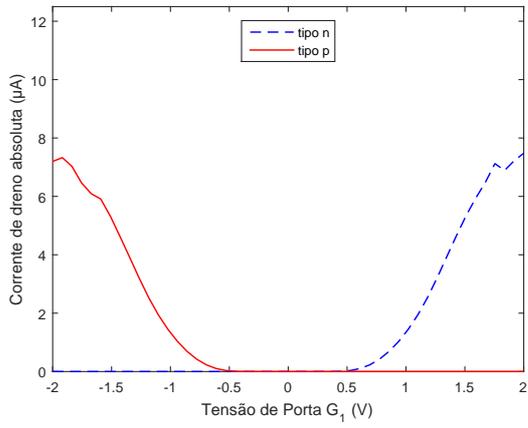
- L_{cnt} é o valor definido como ótimo para esse estudo de CNT-RFET.
- d_{cnt} e os valores de L_{gate} foram decisão de projeto.
- $s_{\text{s,d}}$ é o menor valor de espaçador de óxido permitido pelo simulador.
- ϕ_{sb} é a altura da barreira calculada de acordo com o diâmetro escolhido.
- Os valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp} são o padrão de permissividade do óxido.
- Os valores de s_{gates} foram variados de acordo com o L_{gate} para preencher completamente $L_{\text{cnt}} = 200$ nm.

As curvas de transferência em escala linear para os valores listados na Tabela 4.8b estão na Figura 4.14. Observando cada uma das imagens, nota-se que comprimentos de porta L_{gate} menores que 66 nm apresentam menores correntes. Em 4.14a a corrente é menor que $8\mu A$, em 4.14b menor que $11\mu A$ e em 4.14c menor que $12\mu A$. Já para L_{gate} de 66 nm e 84 nm (vistas respectivamente nas Figuras 4.14d e 4.14e) a corrente se mantém constante em $12\mu A$.

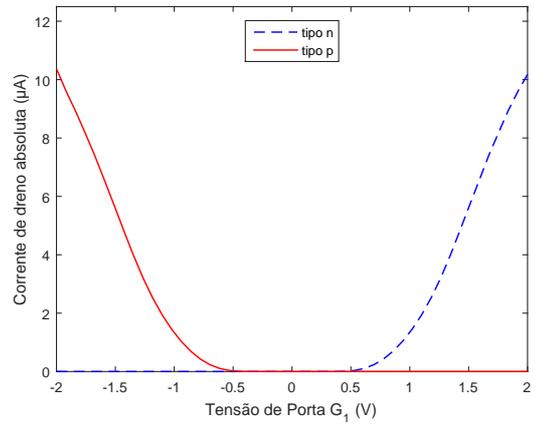
Na Figura 4.15 tem-se as curvas de transferência em escala logarítmica para os valores listados na Tabela 4.8b, porém essas simulações foram feitas considerando tunelamento banda à banda (BTBT). As figuras mostram que ocorre um aumento em I_{off} para diferentes tamanhos de porta.

A Figura 4.16 comprova que a razão $I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ diminui quando os tamanhos de porta aumentam e que, na verdade, o I_{off} cresce muito com portas maiores.

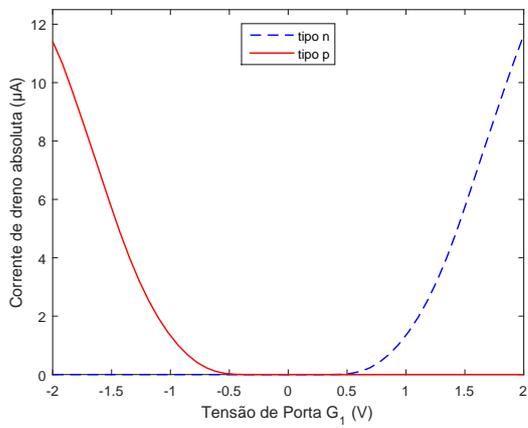
Para aprofundar o estudo, $L_{\text{gate}} = 17$ nm (que gerou a menor corrente I_{on}) e $L_{\text{gate}} = 66$ nm foram escolhidos para análise do diagrama de bandas usando os pontos de operação descritos



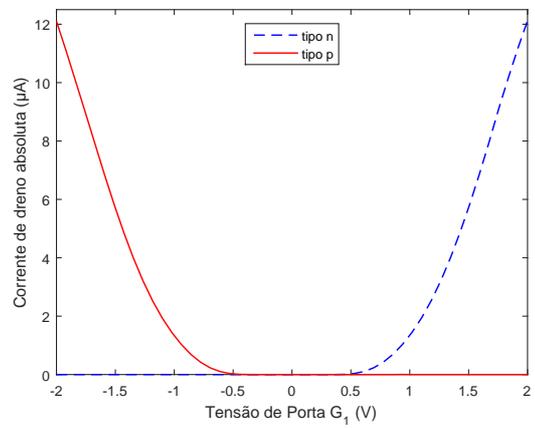
(a) $L_{\text{gate}} = 17 \text{ nm}$



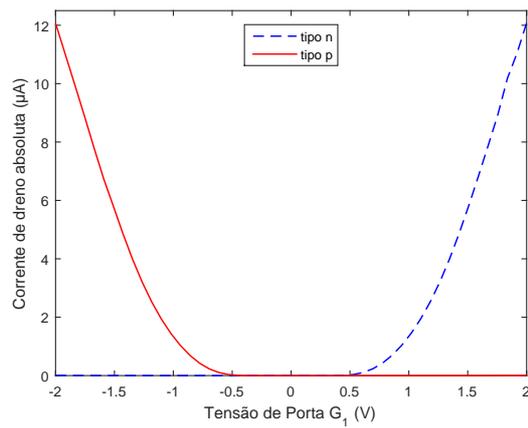
(b) $L_{\text{gate}} = 33 \text{ nm}$



(c) $L_{\text{gate}} = 50 \text{ nm}$

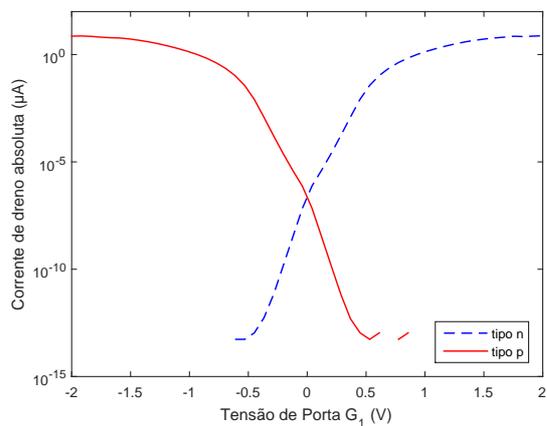


(d) $L_{\text{gate}} = 66 \text{ nm}$

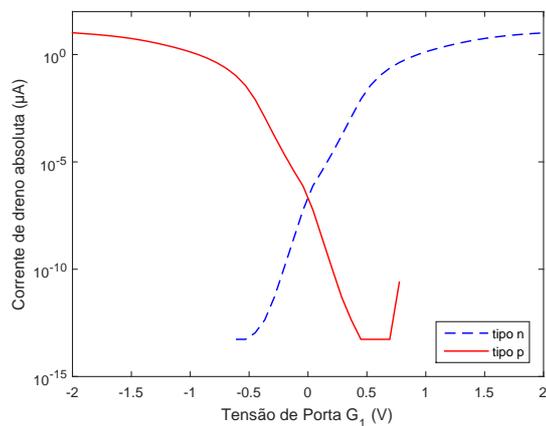


(e) $L_{\text{gate}} = 84 \text{ nm}$

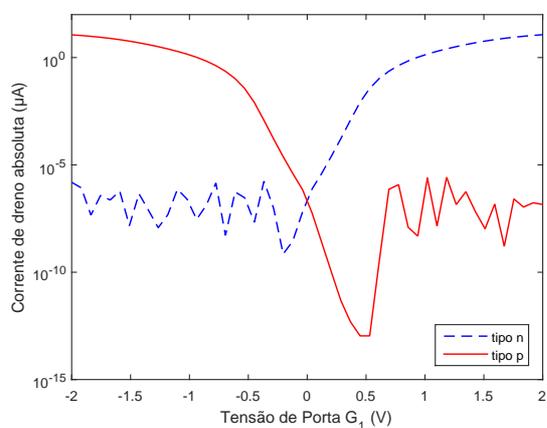
Figura 4.14: Curvas de transferência para diversos comprimentos de porta



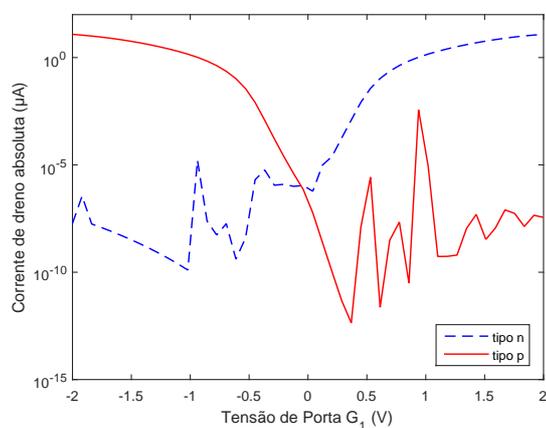
(a) $L_{gate} = 17$ nm



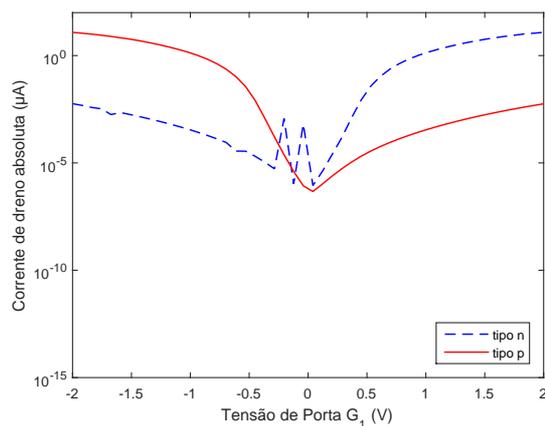
(b) $L_{gate} = 33$ nm



(c) $L_{gate} = 50$ nm



(d) $L_{gate} = 66$ nm



(e) $L_{gate} = 84$ nm

Figura 4.15: Curvas de transferência para diversos comprimentos de porta em escala logarítmica

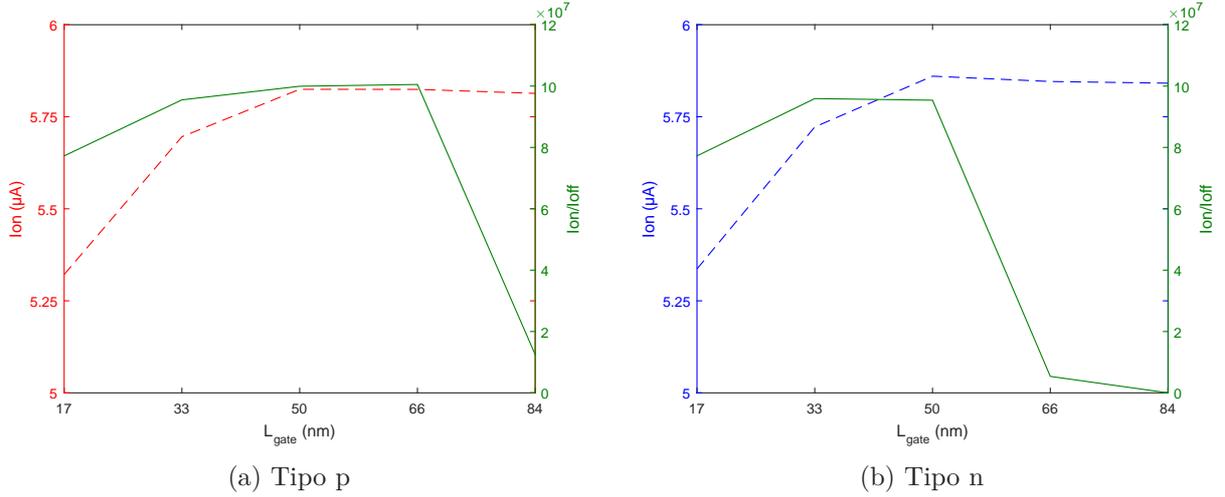


Figura 4.16: Relação entre corrente no estado *on* e razão I_{on}/I_{off} em função do tamanho da porta

na Tabela 4.9. Adicionalmente as curvas de saída do CNT-RFET quando $L_{gate} = 17$ nm foram levantadas e estão na Figura 4.17.

$L_{gate} = 84$ nm (que apresenta maior corrente I_{off}) e $L_{gate} = 66$ nm também foram escolhidos para análise do diagrama de bandas usando os pontos da Tabela 4.9.

A partir dos diagramas de bandas da Figura 4.18 foi possível discernir que, quando o comprimento da porta é muito curto, um pouco do controle do canal é perdido, até para um mesmo valor de E_g . O controle do canal é melhor quando se tem uma porta maior, fazendo com que I_{on} aumente. Porém isso só se verifica até certo momento, porque se a porta for muito longa, I_{off} aumenta também. Observando os diagramas da Figura 4.19, infere-se que uma porta maior tem controle maior do canal a ponto de ter acesso à banda de valência e permitir um maior fluxo de lacunas.

Para esse estudo, $L_{gate} = 66$ nm foi escolhido como tamanho de porta ideal (e em consequência, o valor ótimo para s_{gates} é de 66 nm). Diferente da otimização de outros parâmetros, onde o valor menor ou o maior apresenta o melhor resultado, o L_{gate} tem que ser selecionado com cautela, dependendo da aplicação desejada.

4.4.2 Distância entre portas e contatos de dreno/fonte

Foi investigado o efeito da variação do comprimento do espaçador de óxido entre os contatos de dreno/fonte e suas respectivas portas, ou seja, a distância entre as portas e contatos, também chamada de $s_{d,s}$.

Os valores mantidos constantes na simulação estão listados na Tabela 4.10a, e os parâmetros variados $s_{d,s}$ e s_{gates} , estão na 4.10b.

A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:

- L_{cnt} , d_{cnt} , L_{gate} e os valores de $s_{s,d}$ foram decisão de projeto.

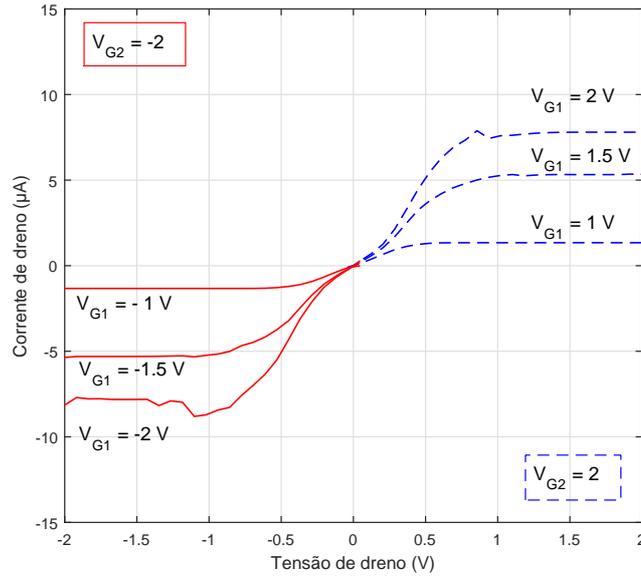


Figura 4.17: Curvas de saída medidas para o CNT-RFET com $L_{\text{gate}} = 17$ nm

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	302 nm
d_{cnt}	1.0 nm
L_{gate}	30 nm
ϕ_{sb}	0.425 eV
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

(a) Parâmetros constante

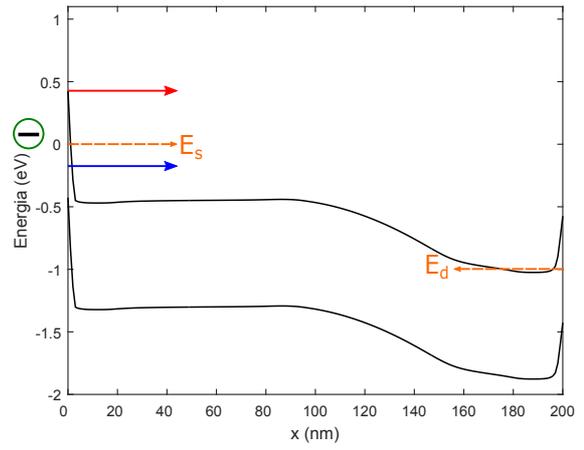
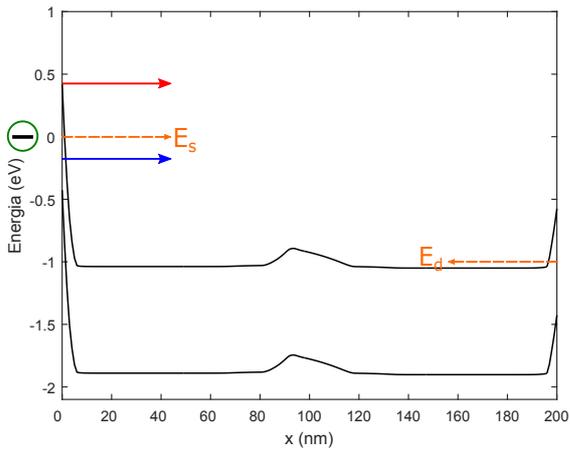
$s_{d,s}$ (nm)	s_{gates} (nm)
1	240
10	220
30	180

(b) $s_{d,s}$ variados

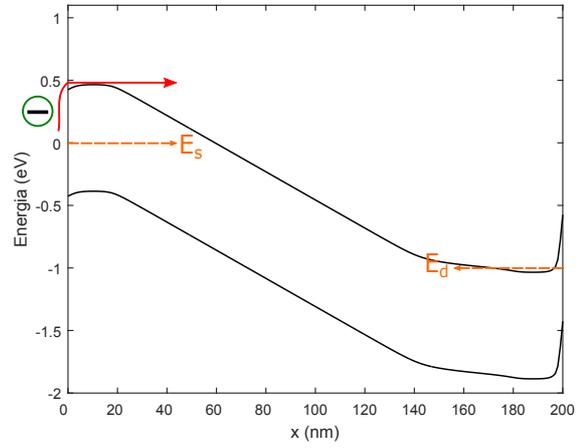
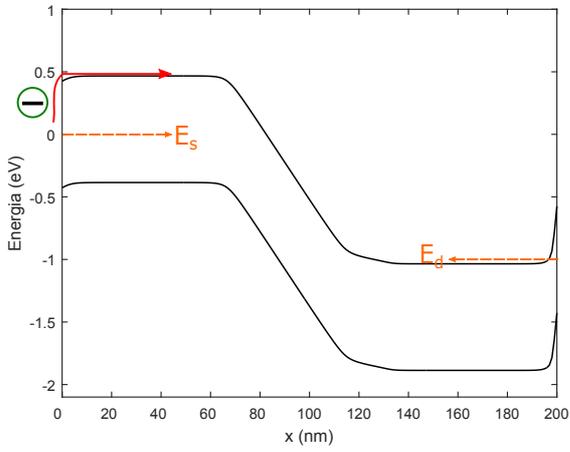
Tabela 4.10: Parâmetros da simulação de distância entre portas e contatos de dreno/fonte

- ϕ_{sb} é a altura da barreira calculada de acordo com o diâmetro escolhido.
- Os valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp} são o padrão de permissividade do óxido.
- Os valores de s_{gates} foram variados de acordo com o $s_{s,d}$ para preencher completamente $L_{\text{cnt}} = 302$ nm.

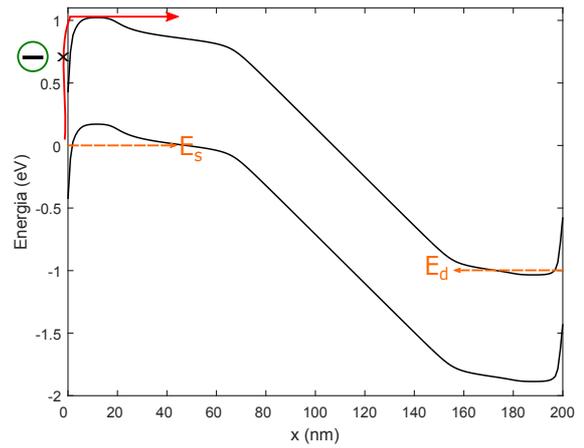
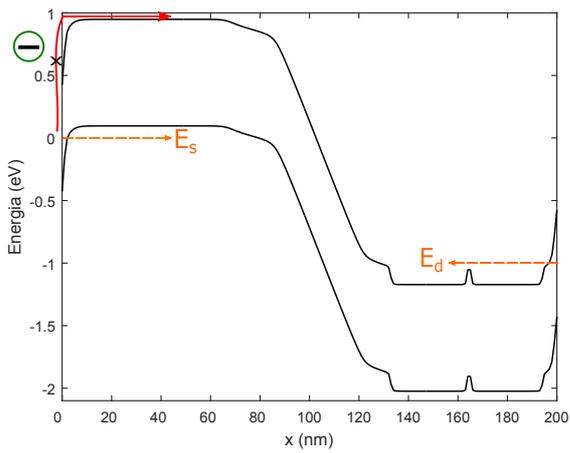
As curvas de transferência em escala logarítmica resultantes são mostradas na Figura 4.20. Tais curvas são suficientes para mostrar que quanto maior a distância entre o espaçador e o contato, menor a corrente. Então, o tamanho ótimo para $s_{d,s}$ é igual à 1 nm.



(a) $V_G = 2.000V$, estado *on*

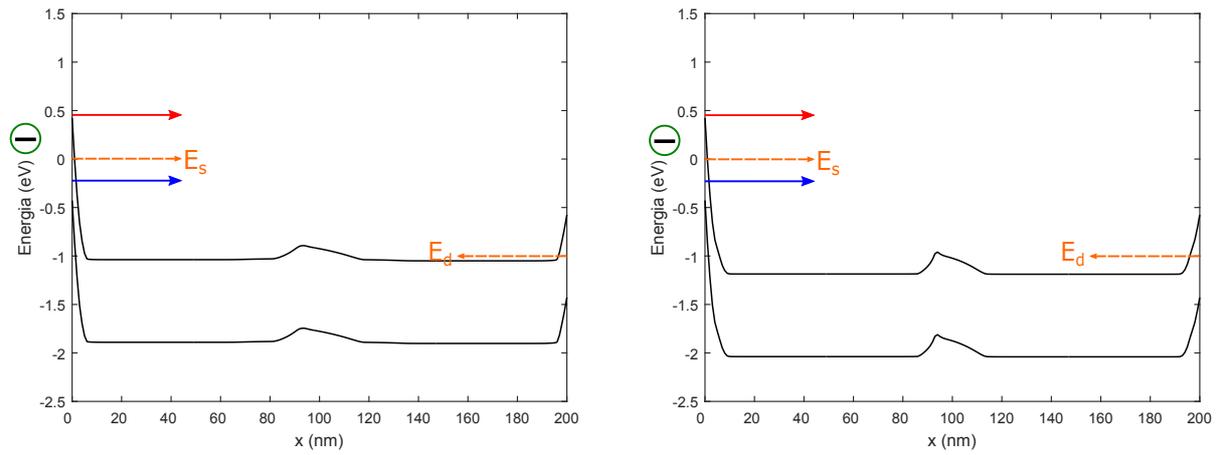


(b) $V_G = 0.004V$

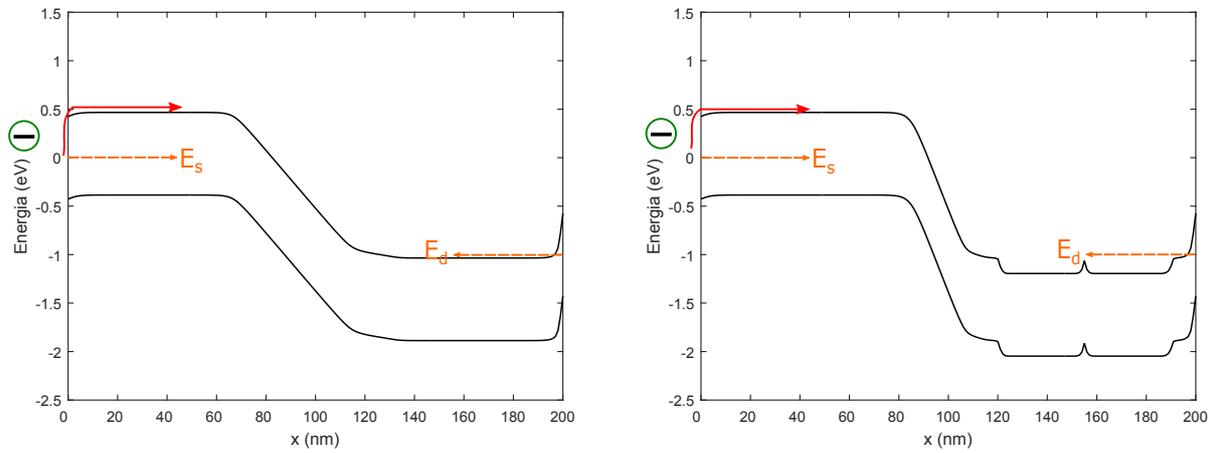


(c) $V_G = -2.000V$, estado *off*

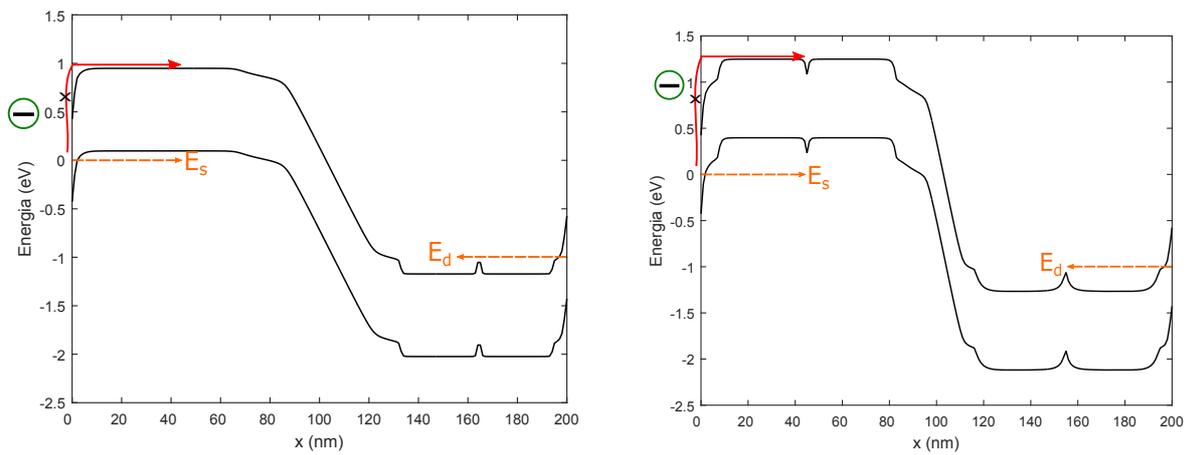
Figura 4.18: Diagrama de bandas para as configurações n do CNT-RFET para diferentes L_{gate} em três pontos de operação



(a) $V_G = 2.000V$, estado *on*



(b) $V_G = 0.004V$



(c) $V_G = -2.000V$, estado *off*

Figura 4.19: Diagrama de bandas para as configurações n do CNT-RFET para diferentes L_{gate} em três pontos de operação

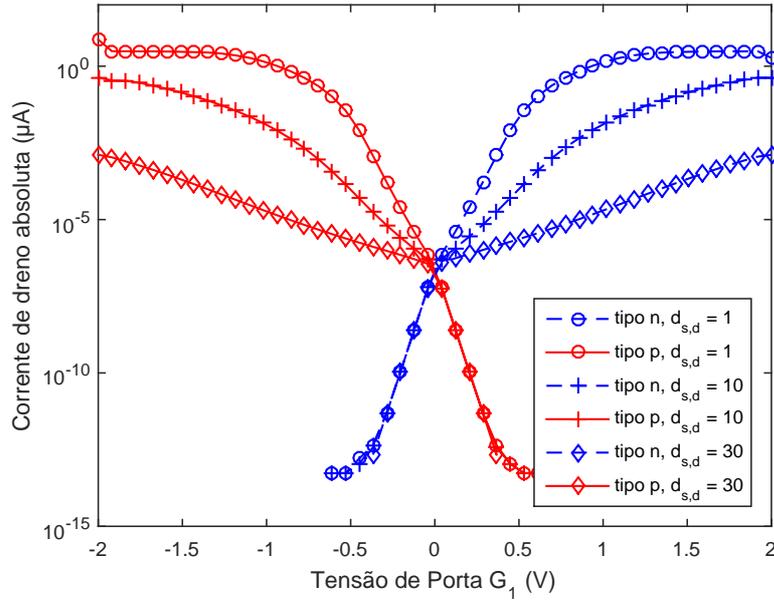


Figura 4.20: Curvas de transferência do CNT-RFET simulado para diferentes valores de $s_{s,d}$

4.5 Otimização dos materiais

Os parâmetros variados nessa investigação foram primordialmente o diâmetro do CNT (d_{cnt}) e a permissividade das portas (ϵ_{ox}) e dos espaçadores de óxido (ϵ_{sp}).

4.5.1 Diâmetro do CNT

Foi investigado o efeito da variação do diâmetro do CNT. Os valores mantidos constantes na simulação estão listados na Tabela 4.11a, já os valores usados para d_{cnt} e ϕ_{sb} estão na 4.10b.

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	200 nm
L_{gate}	66 nm
$s_{s,d}$	1 nm
s_{gates}	66 nm
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

(a) Parâmetros constantes

d_{cnt} (nm)	ϕ_{sb} (eV)
1.0	0.425
1.5	0.284
2.0	0.213

(b) d_{cnt} e ϕ_{sb} correspondentes usados na simulação

Tabela 4.11: Parâmetros da simulação de variação do diâmetro do CNT

A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:

- L_{cnt} , L_{gate} , $s_{s,d}$ e s_{gates} são os valores definidos como ótimos para esse estudo de CNT-RFET.
- Os valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp} são o padrão de permissividade do óxido.

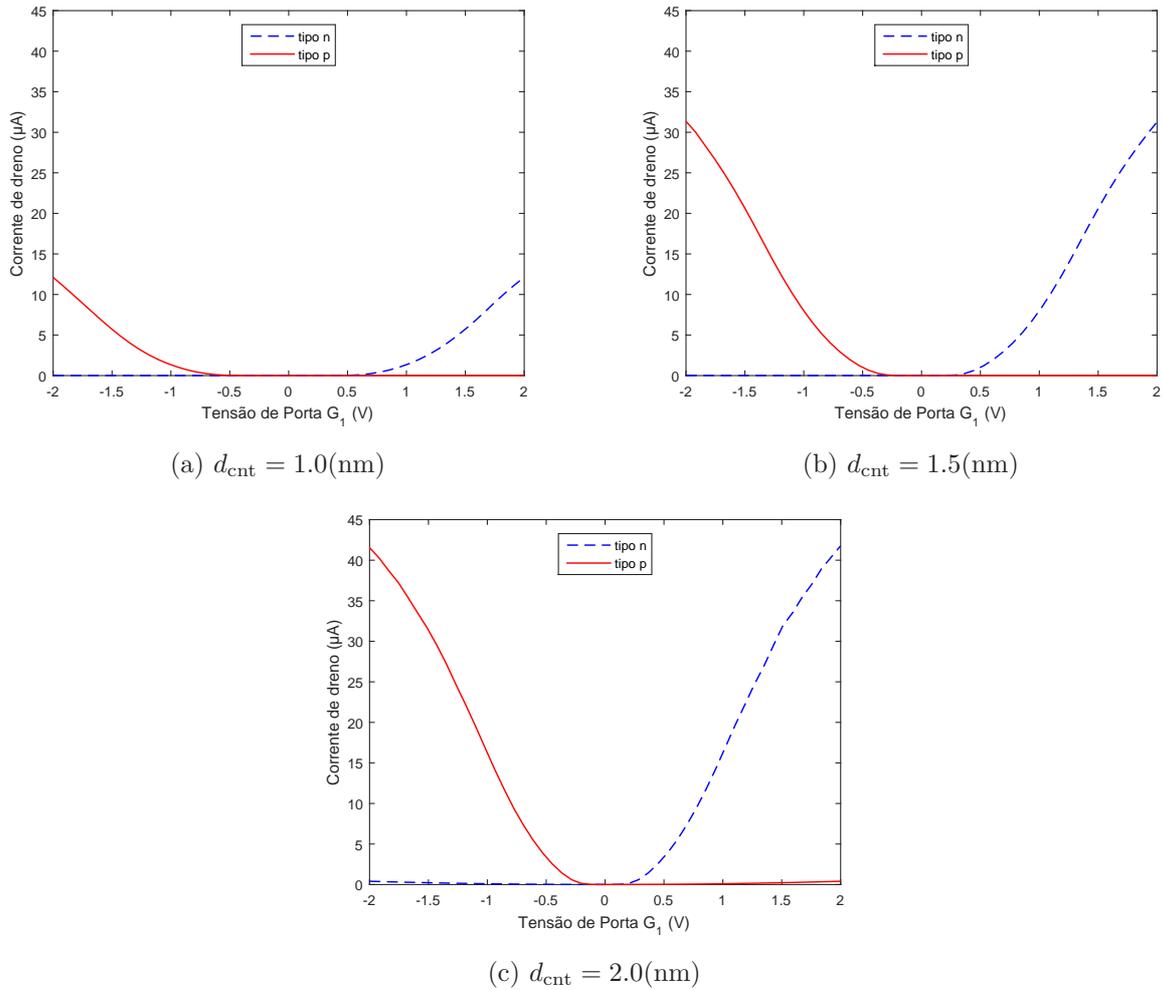


Figura 4.21: Curvas de transferência do CNT-RFET simulado para diferentes valores de d_{cnt}

- Os valores de d_{cnt} foram decisão de projeto.
- Os valores de ϕ_{sb} (altura da barreira) foram calculados para cada diâmetro escolhido.

As curvas de transferência encontradas, que estão em escala linear, são mostradas na Figura 4.21. E as curvas em escala logarítmica estão na Figura 4.22.

Quando o diâmetro do CNT aumenta, a largura da banda proibida diminui, como mostrado na Seção 2.2. Como a *bandgap* mudou, a altura da barreira de Schottky é realocada pra continuar no meio da banda, tornando a barreira menor e permitindo que mais cargas atravessem. Dessa forma, a corrente aumenta.

Para esse estudo, $d_{\text{cnt}} = 1 \text{ nm}$ foi escolhido como valor ótimo. Mas se a aplicação necessitar de maiores valores de corrente, maiores d_{cnt} podem ser usados.

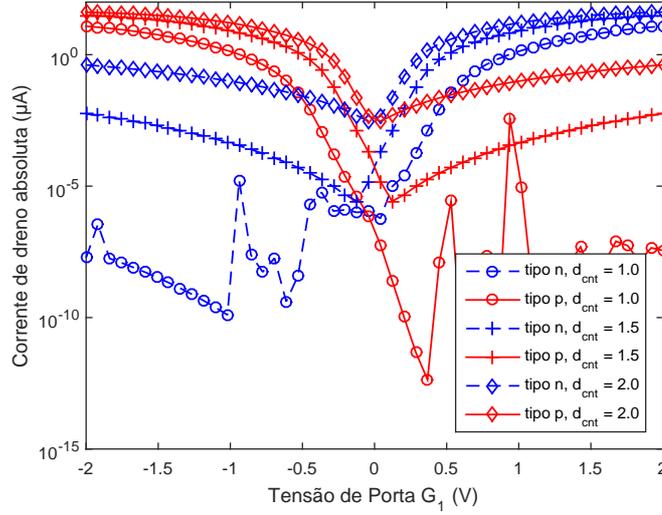


Figura 4.22: Curvas de transferência do CNT-RFET simulado para diferentes valores de d_{cnt} em escala logarítmica

4.5.2 Permissividade

Foi investigado o efeito da alteração das permissividades relativas das portas ϵ_{ox} e dos espaçadores de óxido ϵ_{sp} . Os parâmetros mantidos constantes na simulação estão listados na Tabela 4.12a, já os valores usados para ϵ_{ox} e ϵ_{sp} em cada simulação estão na 4.12b.

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	200 nm
d_{cnt}	1.0 nm
L_{gate}	66 nm
$s_{\text{s,d}}$	1 nm
s_{gates}	66 nm
ϕ_{sb}	0.425 eV

(a) Parâmetros constantes

Simulação	ϵ_{ox}	ϵ_{sp}
1	3.9	3.9
2	16	16
3	16	3.9

(b) ϵ_{ox} e ϵ_{sp} usados em cada simulação

Tabela 4.12: Parâmetros da simulação de variação da permissividade

A escolha dos parâmetros se deu da seguinte maneira:

- L_{cnt} , L_{gate} , $s_{\text{s,d}}$ e s_{gates} são os valores definidos como ótimos para esse estudo de CNT-RFET.
- ϕ_{sb} é a altura da barreira calculada de acordo com o diâmetro escolhido.
- O valores escolhidos para ϵ_{ox} e ϵ_{sp} em cada simulação foi decisão de projeto.

As curvas de transferência resultantes estão na Figura 4.23. A corrente em 4.23b já é um pouco maior que a corrente em 4.23a, mas a maior corrente foi identificada quando $\epsilon_{\text{ox}} = 16$ e $\epsilon_{\text{sp}} = 3.9$

(Figura 4.23c). Isso indica que é melhor usar materiais de alta permissividade no dielétrico de porta.

Para esse estudo, no entanto, foi escolhido usar ϵ_{ox} e ϵ_{sp} iguais à 3.9, o valor padrão de permissividade do óxido.

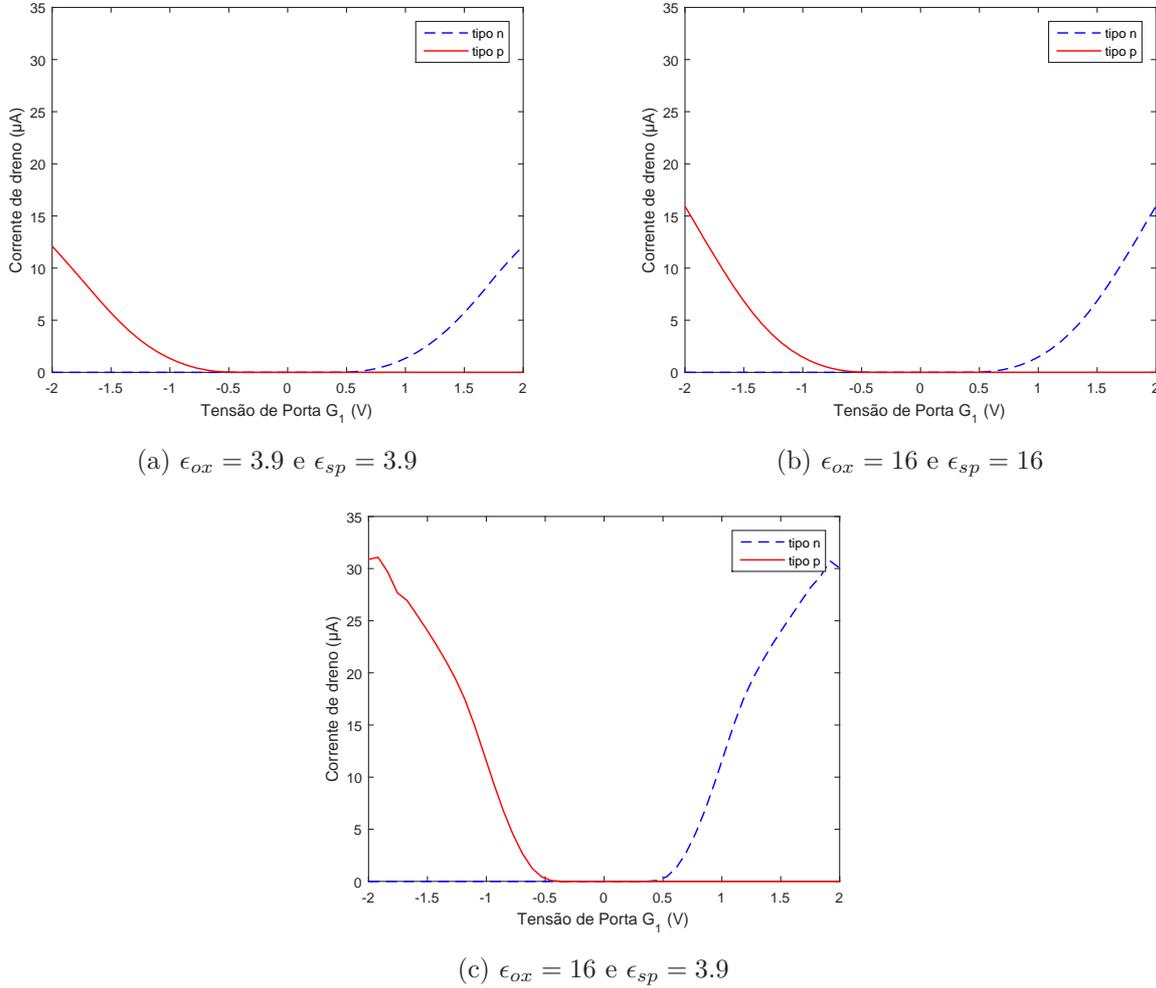


Figura 4.23: Curvas de transferência do CNT-RFET simulado para diferentes valores de ϵ_{ox} e ϵ_{sp}

4.6 Resumo dos resultados das simulações

Após diversas simulações investigando o comportamento do CNT-RFET, ao variar a geometria e os parâmetros do material, os valores considerados ótimos foram escolhidos e estão listados na Tabela 4.13.

A especificação e definição dos parâmetros para tais simulações foi feita em busca do melhor desempenho geral do transistor estudado. Cada parâmetro foi exaustivamente averiguado, partindo de valores mínimos para máximos à procura dos limites do dispositivo para verificar seu uso em diferentes aplicações. Para muitos parâmetros, o valor selecionado como ótimo reflete a maior corrente I_{on} encontrada na simulação.

Parâmetro	Valor
L_{cnt}	200 nm
d_{cnt}	1.0 nm
L_{gate}	66 nm
$s_{\text{s,d}}$	1 nm
s_{gates}	66 nm
ϕ_{sb}	0.425 eV
ϵ_{ox}	3.9
ϵ_{sp}	3.9

Tabela 4.13: Valores ótimos para o transistor estudado

Parâmetro	Valor
I_{on}	12μ A
$I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$	$1.09e - 12$ A

Tabela 4.14: Valores obtidos para transistor estudado simulado com os valores ótimos

As curvas de transcondutância mostram que o CNT-RFET funciona bem em modo de amplificação, enquanto a razão $I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ demonstra a melhor forma de aprimorar a velocidade e diminuir a corrente de fuga. Os valores medidos para tais parâmetros estão na Tabela 4.14.

Capítulo 5

Conclusões

Este trabalho apresenta o estudo de implementação de transistores reconfiguráveis de nanotubos de carbono. A reconfigurabilidade do CNT-RFET é possível de ser atingida com a aplicação do modelo de transporte balístico para pequenos canais, onde uma carga quando injetada no canal não sofre espalhamento e portanto mantém sua energia total, e o tunelamento é considerado para a injeção de cargas.

O simulador de dispositivos COOS foi usado para a solução deste modelo de transporte (nomeadamente o cálculo da equação de Poisson e da densidade de cargas para determinação da corrente em cada ponto de operação). Os resultados numéricos obtidos com o simulador foram visualizados usando a ferramenta MATLAB.

O protótipo de CNT-RFET simulado usa duas portas que circundam o canal: uma de programação posicionada no contato de dreno e uma de controle posicionada no contato de fonte. A voltagem aplicada nas portas definem se o transistor terá configuração p-FET ou n-FET. Foi observado o comportamento completamente simétrico de ambas configurações.

O dispositivo considerado ótimo para o propósito do estudo possui d_{cnt} igual à 1 nm, L_{cnt} de 200 nm, L_{gate} de 66 nm e $s_{\text{s,d}}$ de 1 nm. Além de $\phi_{\text{sb}} = 0.425$ eV e permissividades relativas ϵ_{ox} e ϵ_{sp} iguais a $3.9 \epsilon_0$.

A corrente I_{on} medida no ponto de saturação foi de $12 \mu\text{A}$. A razão $I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ foi de 1.09×10^{-12} .

As investigações de otimização de geometria do CNT-RFET mostraram que uma menor distância entre os contatos de fonte/dreno e suas respectivas portas fornece a maior corrente. Ademais, o tamanho ideal de porta L_{gate} deve ser escolhido de acordo com a aplicação esperada para o transistor. Uma porta muito pequena apresenta diminuição na corrente I_{on} , enquanto uma porta muito grande tem um razão $I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ bem maior.

A otimização dos materiais mostrou o que já era esperado da teoria de CNTs. O uso de maior diâmetro do nanotubo na simulação acarreta a diminuição do tamanho da banda proibida, aumentando a corrente. E o uso de um valor maior da permissividade do óxido da porta ϵ_{ox} também proporciona um aumento da corrente.

Outro resultado revelado foi que o comprimento do canal deve respeitar a característica de transporte balístico, que deixa de funcionar bem para L_{cnt} maiores que 100 nm devido ao caminho médio efetivo do CNT.

Dessa forma, cada projetista tem que escolher quais valores dos parâmetros são mais interessantes a serem usados no CNT-RFET para a aplicação desejada. Por exemplo, se uma corrente maior no estado *on* é mais vantajosa, é encorajado o uso de maiores tamanhos de porta, mas se o desejado for um circuito mais rápido, com menor corrente no estado *off*, uma porta menor é recomendada.

Os valores usados no protótipo foram considerados ótimos para a demonstração de funcionamento do CNT-RFET, pois demonstram que é viável a construção bem sucedida de um transistor reconfigurável de nanotubos de carbono com o uso de uma porta de programação e uma de controle.

5.1 Trabalhos futuros

Com base nos resultados de simulação demonstrados neste trabalho, um modelo compacto para CNT-RFET poderia ser desenvolvido para ser usado na simulação de circuitos. Isso daria a oportunidade de explorar novas topografias de circuitos, aproveitando o máximo da reconfiguração dos protótipos de RFETs apresentados.

Além disso, o simulador COOS, que já fornece suporte para CNT-FETs, pode ser calibrado e aprimorado para simulações de transistores reconfiguráveis.

Outra iniciativa seria modelar as curvas do RFET com um circuito equivalente (modelo compacto) e usar tal modelo para projetar circuitos reconfiguráveis.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] MOORE, G. E. Cramming More Components onto Integrated Circuits. *Electronics*, IEEE, v. 38, n. 8, p. 114–117, abr. 1965. ISSN 0018-9219. Acessado em 3 de Dezembro de 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1109/jproc.1998.658762>>.
- [2] IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, v. 354, p. 56–58, November 1991.
- [3] BHUSHAN, B. (Ed.). *Springer Handbook of Nanotechnology*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2003.
- [4] O’CONNOR, I. et al. Cntfet modeling and reconfigurable logic-circuit design. *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Regular Papers*, v. 54, n. 11, p. 2365–2379, Nov 2007. ISSN 1549-8328.
- [5] KOBAYASHI, M.; NINOMIYA, H.; WATANABE, S. Circuit design of reconfigurable logic based on double-gate cntfets. *IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences*, v. 96, n. 7, p. 1642–1644, 2013.
- [6] HEINZIG, A. et al. Reconfigurable silicon nanowire transistors. *Nano Letters*, v. 12, p. 119–124, 2012.
- [7] CHUA, L. Memristor-the missing circuit element. *Circuit Theory, IEEE Transactions on*, v. 18, n. 5, p. 507–519, Sep 1971. ISSN 0018-9324.
- [8] STRUKOV, D. B. et al. The missing memristor found. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 453, n. 7191, p. 80–83, 2008.
- [9] LINDSAY, S. M. *Introduction to Nanoscience*. [S.l.]: Oxford University, 2010.
- [10] CLAUS, M. *Modeling of Ballistic Carbon Nanotube Transistors for Analog High-frequency Applications*. [S.l.]: TUDpress, 2011. ISBN 9783942710237.
- [11] SHUKLA, S. K.; BAHAR, R. I. (Ed.). *Nano, Quantum and Molecular Computing - Implications to High Level Design and Validation*. [S.l.: s.n.], 2004.
- [12] KUMAR, M.; ANDO, Y. Chemical vapor deposition of carbon nanotubes: A review on growth mechanism and mass production. *Nanoscience and Nanotechnology*, v. 10, p. 3739–3758, 2010.
- [13] GUISEPPI-ELIE, A.; LEI, C.; BAUGHMAN, R. H. Direct electron transfer of glucose oxidase on carbon nanotubes. *Nanotechnology*, v. 13, n. 5, p. 559–564, 10 2002. ISSN 0957-4484.

- [14] JAVEY, A. et al. Self-aligned ballistic molecular transistors and electrically parallel nanotube arrays. *Nano Letters*, v. 4, n. 7, p. 1319–1322, 2004. Acessado em 3 de Dezembro de 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/nl049222b>>.
- [15] SCHOTTKY, W. Zur halbleiterttheorie der sperrschicht- und spitzengleichrichter. *Zeitschrift für Physik*, v. 113, p. 367–414, 1939.
- [16] MOTT, N. F. The theory of crystal rectifiers. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 171, p. 27–38, 1939.
- [17] CHENG, A.; CHENG, D. T. Heritage and early history of the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Element*, v. 29, p. 268–302, 2005.
- [18] SWART, J. W. *Semicondutores - Fundamentos, Técnicas e Aplicações*. Editora Unicamp, 2008. Acessado em 26 de Setembro de 2015. ISBN 8526808184. Disponível em: <<http://www.ccs.unicamp.br/cursos/ee941/download/cap03.pdf>>.
- [19] COLINGE, J. P.; COLINGE, C. A. *Physics of Semiconductor Devices*. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [20] FERRY, D. K.; GOODNICK, S. M.; BIRD, J. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, 2009. Acessado em 20 de Novembro de 2015. ISBN 9781139480833. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=8j8gAwAAQBAJ>>.
- [21] DATTA, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. seventh. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007.
- [22] DATTA, S. *Lessons from Nanoelectronics*. World Scientific Publishing Company, 2012. (Lecture notes series). Acessado em 17 de Novembro de 2015. ISBN 9789814335294. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=fvQXKQEACAAJ>>.
- [23] HOFFMANN, M. *Simulation of Carbon Nanotube Tunneling Field-Effect Transistors*. March 2015. Private communication.
- [24] CLAUS, M. et al. Coos: a wave-function based schrödinger-poisson solver for ballistic nanotube transistors. *Journal of Computational Electronics*, v. 13, p. 689–700, 2014.
- [25] MOTHESS, S. *MC-BTE*. 2014. Primeiro acesso em 27 de Maio de 2015. Disponível em: <http://eeebcd.et.tudresden.de/mcbte/wiki/index.php/Main_Page>.

ANEXOS

I. APÊNDICE

I.1 Código de entrada comentado

Com base nos arquivos de entrada usados na simulação de tunelamento do FET (seção 3.2), a estrutura de código a seguir foi elaborada e empregada nas simulações do transistor reconfigurável CNT-RFET (seção 3.4) usando o simulador COOS (seção 3.1). Vale notar que este é apenas um detalhamento do código de entrada, para as simulações diversos valores foram alterados de acordo.

No arquivo de entrada, o primeiro bloco é o de estrutura (STRUcture), onde os materiais são definidos.

```
STRUcture
&GEN_INFO spat_dim=2 coor_sys='cyl' device='user'/

&REGION_DEF reg_mat='SEMI' mod_name='CNT0' low_xyz=0 0.5e-9 upp_xyz=680e-9 0.5e-9 /
&REGION_DEF reg_mat='SDIO' mod_name='SHKY' low_xyz=0 0 upp_xyz=0 20.5e-9 cont_name='S'/
&REGION_DEF reg_mat='SDIO' mod_name='SHKY' low_xyz=680e-9 0 upp_xyz=680e-9 20.5e-9 cont_name='D'/

&REGION_DEF reg_mat='GATE' mod_name='GATE' low_xyz=85e-9 0.5e-9 upp_xyz=115e-9 20.5e-9 cont_name='G1'/
&REGION_DEF reg_mat='GATE' mod_name='GATE' low_xyz=565e-9 0.5e-9 upp_xyz=595e-9 20.5e-9 cont_name='G2'/

&REGION_DEF reg_mat='OXID' mod_name='OXID' low_xyz=0 0.5e-9 upp_xyz=85e-9 20.5e-9 /
&REGION_DEF reg_mat='OXID' mod_name='OXID' low_xyz=115e-9 0.5e-9 upp_xyz=565e-9 20.5e-9 /
&REGION_DEF reg_mat='OXID' mod_name='OXID' low_xyz=595e-9 0.5e-9 upp_xyz=680e-9 20.5e-9 /
.STRUcture
```

Em GEN_INFO, a dimensão espacial da equação de Poisson e o sistema de coordenadas são especificados, o uso de “device = ‘user’” indica que o simulador deverá usar as dimensões definidas pelo usuário.

A primeira região definida é um semicondutor (no caso, um CNT) de 680 nm. Em seguida, são definidos os contatos:

- Contatos de Schottky:
 1. Fonte (*source*) com altura radial de 20 nm.
 2. Dreno (*drain*) com altura radial de 20 nm.
- Contatos de Porta:
 1. Contato de Porta (*gate 1*) com comprimento de 30 nm e uma camada de 20 nm de espaçador de óxido.
 2. Contato de Porta (*gate 2*) com comprimento de 30 nm e uma camada de 20 nm de espaçador de óxido.

Então são definidos os espaçadores de óxidos do CNT. Como são usados dois contatos de porta, se faz necessário o uso de três regiões de espaçadores para envolver completamente o nanotubo.

Depois vem o bloco de modelo (MODEL), que contém parâmetros do modelo para diferentes estruturas.

```
MODEL
&SEMI mod_name='CNT0' material='CNT' band='user' scat='user'/
&SCHOTTKY mod_name='SHKY' phi_sb=0.425 /
&GATE mod_name='GATE' t_ins=5e-9 eps_ins=3.9 /
&OXIDE mod_name='OXID' eps=3.9 /
.MODEL
```

Cada sub-bloco define os parâmetros das regiões já descritas no bloco de estrutura, para tanto o “mod_name” deve ser igual em ambos os blocos.

- &SEMI: região de semicondutores. “material” contém o nome do material semicondutor, nesse caso tem-se um CNT.
- &SCHOTTKY: região de contatos de Schottky. “phi_sb” é a altura da barreira de Schottky.
- &GATE: região de contatos de porta. “t_ins” é a espessura do óxido e “eps_ins” é a permissividade relativa do óxido da porta.
- &OXIDE: região de óxidos. “eps” é a permissividade relativa do óxido.

Em seguida, vem o bloco de banda (BAND), que contém informações sobre o modelo de estrutura de bandas.

```
BAND
&CNT dcnt=1.0e-9 nsub=2 carrier= 'elec' 'hole' /
.BAND
```

O sub-bloco &CNT define a estrutura de banda de um CNT unidimensional. “dcnt” é o diâmetro do tubo, “nsub” é número de sub-bandas e “carrier” são os tipos de portadores de carga (elétrons, lacunas).

Depois vem o bloco de perfil (PROFile), que contém informações sobre o perfil de dopagem.

```
PROF
&CONST_DOP type='ACCE' d_con=1.0e9 low_xyz=0 0.5e-9 upp_xyz=50e-9 0.5e-9 /
&CONST_DOP type='DONO' d_con=0.0e7 low_xyz=150e-9 0.5e-9 upp_xyz=200e-9 0.5e-9 /
&CONST_DOP type='DONO' d_con=5.0e7 low_xyz=150e-9 0.5e-9 upp_xyz=200e-9 0.5e-9 /
&CONST_DOP type='DONO' d_con=1.0e8 low_xyz=150e-9 0.5e-9 upp_xyz=200e-9 0.5e-9 /
&CONST_DOP type='DONO' d_con=2.0e8 low_xyz=150e-9 0.5e-9 upp_xyz=200e-9 0.5e-9 /
.PRO
```

O sub-bloco &CONST_DOP define a dopagem constante para uma determinada região. “type” indica se a região é receptora (“ACCE”) ou doadora (“DONO”) de cargas. “d_con” é a concentração de dopagem.

Depois vem o bloco de discretização (DISC), que contém informações sobre a discretização espacial para a equação de Poisson.

```

DISC
&RANGE_GRID disc_dir='x' disc_fun='LIN' intv_pnts=0 680e-9 681/
&RANGE_GRID disc_dir='y' disc_fun='LIN' intv_pnts=0 0.5e-9 30 0.5e-9 20.5e-9 21/
.DISC

```

Cada linha contém:

- “disc_dir” indica a direção da discretização.
- “intv_pnts” é a definição os pontos de grade no formato “<inicio> <fim> <quantidade de amostras >”.

Em seguida, vem o bloco de solução (SOLUtion), que informa os parâmetros numéricos utilizados para a solução das equações internas.

```

SOLUtion
&BS_DC se='wkb' niter=50 meth='bbt' nmax = 40000/
.SOLUtion

```

O sub-bloco &BS_DC contém parâmetros para o solucionador balístico.

- “se = wkb” é o modelo de transporte, no caso é balístico semi-clássico com uso da aproximação WKB.
- “niter” é o máximo número de iterações para o solucionador.
- “meth = bbt” é o método de cálculo de carga, no caso o tunelamento banda-a-banda (band-to-band tunneling) está sendo usado.
- “nmax” é o máximo de avaliações na função de integração adaptável.

Depois tem o bloco de polarização da tensão (BIAS), que informa a tensão aplicada na simulação.

```

BIAS
&BIAS_INFO elem_name='S' bias_fun='TAB' bias_val= 0 /
&BIAS_INFO elem_name='D' bias_fun='TAB' bias_val= -1 /
&BIAS_INFO elem_name='G1' bias_fun='LIN' bias_val= -6 3 35 /
&BIAS_INFO elem_name='G2' bias_fun='TAB' bias_val= -3 /
.BIAS

```

Cada linha informa o nome do contato, o método de intervalo e os valores de tensão.

- “S”, “D”, “G1” e “G2” representam respectivamente os contatos de fonte, dreno, porta 1 e porta 2.
- “bias_fun” pode ser “TAB”, que significa um valor tabulado, ou “LIN” que linearmente varre as tensões no formato “<tensão inicial> <tensão final> <quantidade de amostras>”.

Por último, o bloco de saída (OUTPut), que define como serão salvas as saídas da simulação.

```
OUTPut
&GENERAL name='Reconfig_transfer' path='' variation='dip0'/
&EKSC band='all' sc_lev=1 /
&BS_SVDC elpa_lev=1 inqu_lev=1 conv='off'/
&BTE elpa_lev=1 inqu_lev=1/
.OUTP
```

- &GENERAL: contém os nomes de arquivo e caminhos para arquivos de saída.
- &EKSC: salva os parâmetro da estrutura de banda e as taxas de dispersão para um dado k ou vetor de energia.
- &BS_SVDC: saída do solucionador balístico.
- &BTE: saída do simulador BTE.

I.2 Comandos do simulador COOs

O comando para rodar um código no simulador COOS é:

```
nohup /usr/coos/mcbte_v071 arquivodeentrada.inp > arquivodesaida.asc &
```

- /usr/coos/mcbte_v071 é a chamada ao programa do COOS.
- “arquivodeentrada.inp” é um código de entrada como descrito no Anexo I.1.
- “arquivodesaida.asc” é onde o simulador irá salvar os logs de simulação, o nome deste arquivo é definido pelo usuário no próprio comando.

Também foi usado um script linux “build_all.sh” da forma:

```
for i in *.inp; do
#echo "compiling $i"
nohup /usr/coos/mcbte_v071 $i > $i.asc &
echo "did $i"
done
```

Que procura todos os arquivos de entrada terminados em *.inp* dentro de um mesmo diretório e usa o comando de rodar do simulador em todos eles.