

國立交通大學

奈米科技研究所

碩士論文

矽奈米線元件在分子偵測之理論分析研究

Theoretical Analysis on Si Nanowire devices
in Molecules Detection

研究生：皮欣霖

指導教授：許鈺宗 博士

中華民國九十七年七月

矽奈米線元件在分子偵測之理論分析研究

Theoretical Analysis on Si Nanowire Devices in Molecules Detection

研究生：皮欣霖

Student : Shin-Lin Pi

指導教授：許鈺宗

Advisor : Jeng-Tzong Sheu

國立交通大學

奈米科技研究所

碩士論文



Submitted to Department of Institute Nanotechnology

College of Engineering

National Chiao Tung University

in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master

in

Nanotechnology

July 2008

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十七年七月

矽奈米線元件在分子偵測之理論分析研究

研究生：皮欣霖

指導教授：許鈺宗 博士

國立交通大學

奈米科技研究所

摘要

本論文研究領域為包含”半導體元件設計物理模式”和”生物科技”之”生醫感測”(Biosensor)。在本論文中，吾人所使用之固態電子元件即為蕭特基二極體奈米線與矽奈米線場效電晶體，感測分子為 AEAPTMS-Gold nanoparticles。吾人利用 TCAD 模擬”矽奈米線場效電晶體”及”蕭特基二極體奈米線”之半導體元件結構特性，最佳化此兩元件之參數條件，達電導值改變量(ΔG)顯著之目標，得到此二種矽奈米線元件中，以蕭特基接二極體奈米線元件之逆向偏壓操作及奈米線低濃度參雜下和元件尺寸微縮下(短通道長度和窄通道寬度)之條件下，有最大電導值改變量。以此兩種不同結構之物理數值模型的最佳條件為基礎，再利用 TCAD 模擬設定等效接上不同生物分子，建立分子偵測之模型，來估算分子偵測靈敏度之極限，且再次驗證蕭特基界面之奈米線元件之逆向偏壓操作下，的確比矽奈米線場效電晶體更靈敏、更適合做為分子偵測的元件。利用電腦使用 TCAD，可快速並有效建立欲設計之元件結構，將來可望在生醫感測領域上提供實驗有效且正確之參考資訊。

Theoretical Analysis on Si Nanowire devices in Molecules Detection

Student : Shin-Lin Pi

Advisor : Dr. J. T. Sheu

Department (Institute) of Nanotechnology
National Chiao Tung University

ABSTRACT

This research combines "the physical model of semiconductor device design with" biotechnology" for "Biosensor". In this research, the hardware components that we use are" silicon nanaowire field effect transistor (SiNW FET)" and" Schottky Barrier Nano-Wires (SBNW)", and the detection target molecules are AEAPTMS-Gold nanoparticles. These two different semiconductor device structures are analysed by TCAD.

Based on the physical model and numerical solution of these two device structures, and TCAD was set up for an equivalent model for calculation of the limit of sensitivity in molecule detecting. Also, we have justified that SBNW device is more sensitive under reverse-bias condition than that of SiNW FET in molecule-detecting. In the future, this research will provide an effective model and correct references for the research in the field of bio-medicine detection.

誌謝

首先感謝恩師許鈺宗博士給我機會可以完成碩士學位，在碩士生涯中給我的諄諄教誨，不斷包容我和提攜我，十分感謝老師這一路以來的叮嚀和指導。

感謝實驗室所有的學長。家豪學長和振嘉學長在大家眼中扮演“大家長”的角色，研究成果豐碩傑出，是實驗室所有學弟妹最好的研究態度和研究精神最佳示範。皓恆學長是初次引領我進入碩班研究領域的學長，除了在學業知識和實驗技術訓練的傳授，在生活上遇挫折時也不時給我鼓舞和建議，關心和照顧學弟妹的用心，讓全實驗室所有人一致認同的好學長。泰瑞學長也是一位我很敬佩的學長，除了專業知識豐沛，在人生很多課題上，都提供學弟妹們很多意見和鼓勵，同時也是實驗室的開心果。柏鈞學長的專業學術能力和豁達開朗的人生觀也都是全實驗室學弟妹效法學習的對象。

已畢業的宥任、學宏、振庭、裕德、玠澤、錫坡、和政學長們，在我們還是碩一的新鮮人階段，也給予很多經驗傳承和支持。

感謝實驗室所有的同學，奕貞、子訓、昶龍和隔壁實驗室蔡依蓁同學。這些日子裡我不是孤單作戰，而是有你們的陪伴。每當實驗有困難或是對碩士生活覺得煩悶時，你們總是會出現在我身邊幫助

我、叮嚀我，讓我不致懈怠而順利的度過層層的關卡。不僅是碩班時期的好同學，也是往後人生當中的好朋友。

感謝實驗室所有的學弟，伯勳、昭睿、盈傑、治廷、履安。這些日子和你們相處，總是帶給我歡樂，讓我有源源不絕的動力可以進行我的實驗。

特別感謝電信系李義明老師，在修課過程中，給學生最好的指導和觀念修正，學生在此謹獻上最誠摯的感謝與敬意。黃志鴻學長，李典燁，陳建華同學也是修課時期，給予很多幫助的人，在此一併感謝。

感謝這 2 年情同姐妹的室友，怡君、秀涵、宜賢學姊。碩班兩年大家在生活上彼此扶持，一同分享喜怒哀樂，結交這些姐妹是我碩班兩年一大收穫之一。



最後要感謝從小撫養我長大的阿姨們和長期生病中依然掛念著我的母親，及情同親姐妹的表姊，妳們在我身後給我的支持鼓勵與包容是最重要的，沒有妳們我無法達到今天的成就，妳們無止盡的付出是我今天能拿到學位的力量泉源，謝謝妳們。

目錄

中文摘要	I
英文摘要	II
誌謝	III
目錄	V
圖目錄	VII
表目錄	X
第一章 緒論	1
1-2 生物感測器及生物晶片	2
1-3 矽奈米線生物感測器	4
1-4 蕭特基界面之生物感測器	5
1-5 蕭特基二極體之閘極效應	7
1-6 奈米線表面修飾 AEAPTMS 與金奈米粒子	8
1-7 半導體元件模擬	9
1-8 研究動機和研究目標	11
1-8-1 研究動機	11
1-8-1 研究目標	11
1-9 論文架構	11
第二章、物理模式與數值解法	13
2-1 模擬器(SIMULATOR)簡介	16
2-2 模擬流程	16
2-3 元件模擬使用的基本公式	18
2-4 物理模式簡介	19
2-4-1 漂移-擴散模式	19
2-4-2 量子模式	19
2-4-3 密度-梯度模式	20
2-4-4 選擇適當的模式	20
2-5 數值解法	21
2-5-1 牛頓疊代法	21
第三章、最佳化與比較矽奈米線場效電晶體和蕭特基界面奈米線元件	
特性結果與分析	23
3-1 實驗動機	23
3-2 元件結構和物理機制	23

3-2-1 矽奈米線場效電晶體	24
3-2-2 矽奈米線場效電晶體元件操作機制	26
3-2-3 蕭特基接面奈米線結構和條件參數	28
3-2-4 蕭特基接面奈米線元件操作機制	29
3-2-4-1 蕭特基接面	29
3-2-4-2 蕭特基障礙高度的不理想效應	31
3-2-4-3 蕭特基二極體 電流-電壓關係式	33
3-3 矽奈米線場效電晶體閘極效應	35
3-3-1 矽奈米線濃度參雜變化影響	35
3-3-2 矽奈米線通道長度與寬度變化影響	44
3-4 蕭特基奈米線閘極效應	46
3-4-1 蕭特基奈米線濃度參雜變化影響	46
3-4-2 蕭特基能帶圖解釋電流機制	51
3-5 矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線之比較	56
第四章、矽奈米線生場效電晶體和蕭特基接面奈米線應用於生物分子感測器之模擬特性分析	57
4-1 實驗目的	57
4-2 表面修飾 AEAPTMS 與金奈米粒子	57
4-3 元件結構和物理	58
4-3-1 矽奈米線生物感測器	58
4-3-1-1 元件結構和參數	60
4-3-1-2 矽奈米線經過表面修飾後的電性圖	60
4-3-1-3 靈敏度計算	64
4-3-2 蕭特基接面奈米線之生物感測器	66
4-3-2-1 元件結構和參數	66
4-3-2-2 蕭特基奈米線經過表面修飾後的電性圖	68
4-3-3 矽奈米線場效電晶體蕭特基奈米線應用於分子偵測之比較	69
第五章、結論	71
第六章、未來展望	72
參考文獻	74

圖目錄

圖 1-1、生物感測元件。	3
圖 1-2、生物晶片。	3
圖 1-3、矽奈米線場效電晶體生物感測器之感測機制示意圖和電性圖。	4
圖 1-4、Charles M. Lieber 團隊之實驗結果。	5
圖 1-5、奈米碳管蕭特基界面生物感測器。	6
圖 1-6、奈米碳管蕭特基界面生物感測器。	6
圖 1-7、金屬/奈米碳管蕭特基界面之閘極效應示意圖和電性圖。	7
圖 1-8、AEAPTMS 改質二氧化矽表面及金奈米立子沉積。	8
圖 1-9、矽奈米線場效電晶體 V_{DS} 對 I_D 和 V_{DS} 對 V_G 和不同表面改質特性曲線。	9
圖 1-10、製程、元件、電路、模擬關聯圖。	10
圖 2-1、ISE-TCAD 軟體簡介圖。	14
圖 2-2、Genesis 視窗畫面介紹圖。	14
圖 2-3、Genesis 整合介面下建立 Project 各模組流程圖。	15
圖 2-4、模擬流程圖。	16
圖 2-5、牛頓疊代法近似求解示意圖。	21
圖 3-1、元件最佳化步驟。	23
圖 3-2、矽奈米線場效電晶體結構圖。	24
圖 3-3、場效電晶體結構示意圖。	26
圖 3-4、增強型 NMOS FET(Enhanced mode)和空乏型 NMOS FET(Depletion Mode) 的電流電壓特性曲線圖。	27
圖 3-5、NMOS FET 的電壓電流轉移曲線圖。	27
圖 3-6、蕭特基界面奈米線結構示意圖。	28
圖 3-7、金屬-半導體界面(蕭特基障礙二極體)。	29
圖 3-8、一個金屬-N 型半導體的理想能帶圖。	29
圖 3-9、不同偏壓情況下金屬/N 型半導體接觸之能帶圖(熱平衡、順向偏壓、逆向偏壓)。	31
圖 3-10、在一個金屬-介電質介面處的影像電荷。	31
圖 3-11、具有一定電場，由於影像作用力所造成的位障勢扭曲示意圖。	32
圖 3-12、蕭特基二極體電流-電壓圖。	33
圖 3-13、矽參雜濃度和電阻率之關係圖。	35
圖 3-14、通道參雜濃度為 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_D V_D 之特性曲線圖。	37
圖 3-15、通道參雜濃度為 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_D V_D 之特性曲線圖。	37
圖 3-16、通道參雜濃度為 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_D V_D 之特性曲線圖。	38
圖 3-17、通道參雜濃度為 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_D V_D 之特性曲線圖。	38
圖 3-18、通道參雜濃度為 $1e19 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_D V_D 之特性曲線圖。	39
圖 3-19、通道參雜濃度為 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_D V_G 之轉移曲線圖。	39

圖 3-20、通道參雜濃度為 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_g$ 之轉移曲線圖。	40
圖 3-21、通道參雜濃度為 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_g$ 之轉移曲線圖。	40
圖 3-22、通道參雜濃度為 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_g$ 之轉移曲線圖。	41
圖 3-23、通道參雜濃度為 $1e19 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_g$ 之轉移曲線圖。	42
圖 3-24、不同通道參雜濃度和電導值改變量(ΔG)的關係圖。	44
圖 3-25、不同通道長度對 ΔG 的變化趨勢圖。	44
圖 3-26、不同通道寬度對 ΔG 的變化趨勢圖。	45
圖 3-27、蕭特基界面奈米線矽參雜濃度 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_d$ 圖。	46
圖 3-28、蕭特基界面奈米線矽參雜濃度 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_d$ 圖。	46
圖 3-29、蕭特基界面奈米線矽參雜濃度 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_d$ 圖。	47
圖 3-30、蕭特基界面奈米線矽參雜濃度 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_d$ 圖。	47
圖 3-31、蕭特基界面奈米線矽參雜濃度 $1e19 \text{ cm}^{-3}$ 之 $I_d\text{-}V_d$ 圖。	48
圖 3-32、蕭特基界面奈米線操作在逆向偏壓下之 $I_d\text{-}V_g$ 圖。	49
圖 3-33、蕭特基界面奈米線操作在順向偏壓下之 $I_d\text{-}V_g$ 圖。	49
圖 3-34、蕭特基界面奈米線在不同外加閘極下的能帶圖。	51
圖 3-35、蕭特基能位障穿遂電流/熱游離輻射之電流比值。	53
圖 3-36、固定電場下蕭特基能位障下降不理想效應模擬圖。	53
圖 3-37、逆向偏壓下討論電流機制的能帶示意圖。	54
圖 3-38、順向偏壓下討論電流機制的能帶示意圖。	54
圖 4-1、矽奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子)。	59
圖 4-2、矽奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子) 相當於有一個 上電極極(副閘極)示意圖。	59
圖 4-3、矽奈米線場效電晶體未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的表面 電位圖。	60
圖 4-4、矽奈米線場效電晶體未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的通道 電位分布圖。	60
圖 4-5、矽奈米線場效電晶體未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的能帶 圖。	61
圖 4-6、金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的表面電位圖。	61
圖 4-7、經過金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的通道電位分布圖。	62
圖 4-8、經過金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的能帶圖。	62
圖 4-9、經過 AEAPTMS 修飾後(帶正電的上閘極)的表面電位圖。	63
圖 4-10、經過 AEAPTMS 修飾後(帶正電的上閘極)的能帶圖。	63
圖 4-11、經過 AEAPTMS 表面修飾後(帶正電的上閘極)的通道電位分布圖。	64
圖 4-12、個別經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾後和無任何修飾的通道電 流比較圖。	64
圖 4-13、蕭特基奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子)示意圖	67
圖 4-14、蕭特基奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子) 相當於	

有一個上電極極(副閘極)示意圖。.....67

圖 4-15、蕭特基接面奈米線個別經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾後和
無任何修飾的通道電流比較圖。68

圖 6-1、生物分子在溶液環境下的感測元件 2D 圖。73

圖 6-2、生物分子在溶液環境下的感測元件 3D 圖。73



表目錄

表 3-1、無外加閘極偏壓下，不同濃度通道導通電流值。·····	36
表 3-2、不同通道參雜濃度下的電晶體的臨界電壓值。·····	42
表 3-3、不同通道參雜濃度所對應閘極效應程度(電導值變化量 ΔG) 圖。·····	43
表 3-4、蕭特基接面奈米線在順向偏壓和逆向偏壓之電導改電量之比較。·····	48
表 3-5、蕭特基接面奈米線各參雜濃度下於各不同閘極外加偏壓下的能位障勢的 改變值和空乏區的寬度值。·····	52
表 3-6、矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線之閘極效應之比較圖。·····	56
表 4-1、矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線應用於分子偵測之電導值改變量 (ΔG)比較圖。·····	69



第一章

緒論

1-1 前言

隨著工藝技術的進步，人類開始發現到原來材料的特性並非一成不變，當尺度變成奈米等級時，物質的特性會發生巨大的變化：「奈米」(Nanometer)之長度等於十億分之一米，或是十的負九次方米，約為人類頭髮直徑的 8 萬分之一，相當於十個氫原子之直徑長。奈米材料(Nanomaterials)之定義乃材料的特徵長度於 100 奈米以下，此長度乃是粒子直徑、晶粒尺寸、薄膜厚度、電子元件中的導線寬度等；廣義而言，材料或是其建構單元(Building Block)至少有一維度之特徵尺寸介於 1-100 奈米，即可稱為奈米材料。於是乎世界各國爭相投下大筆的經費研究，也有了一些顯著的成果，研究奈米尺度下效應的科學，就叫作奈米科技！

奈米科技最早是在 1959 年，由美國著名的物理學家 Richard Feynman 在當年的美國物理學會年會發表中所做的一項大膽預言，他演講的題目”There is plenty of room at the bottom”中指出「為何我們不能將 24 冊的大英百科全書全寫入一根針頭呢？」，微小化科技在物理尺度的可見範圍內，對科技與工程的應用充滿著無限的可能性，這篇高瞻遠矚的演講幾乎指導著過去四十年奈米科技的研究與發展。他更預言到隨著工程科技與生命科學的結合，藉由對於生物分子的認識與操控，將使我們在生物醫學上，有可能實現更為驚人的應用，例如以微型機械人來進行手術等為醫療科技帶來革命性的突破。儘管上述之夢仍能有待實現，但是結合奈米科技與生物醫學應用的新領域「生醫奈米機電」(Bio-Nano Electromechanical System, BioNEMS)，卻可迅速地利用微尺度結構的設計、製造能力與微小分子的操控、檢測能力，對生命科學中各個領域產生重大的影響。

在 2001 年，Charles M. Lieber 之團隊首先發表了利用矽奈米線製作之場效電晶體，應用於生物感測器之技術，也因此，後續許多研究團隊都致力於開發所謂的一維奈米結構，用來當作高靈敏度之生物分子感測器，偵測多種微小物質，例

如:離子、蛋白質、DNA等等[1]。生物感測器定義為”使用固定化的生物分子(Immobilized Biomolecules)結合換能器，用來偵測體內或體外的環境化學物質或與其有特異性交互作用後產生反應的一種裝置”。因為生物反應的特異性與速度，因此生物感測器具有快速、靈敏、樣品需求量少等優點。發展超高靈敏性生物感測器是一個很重要的趨勢，此產品研發成功將有助於人類對於疾病之早期檢測，且有助於新功能性藥物之開發。

1-2 生物感測器及生物晶片

生物感測器之原理是利用待測分析物與生物物質產生的特異反應，將反應所產生的特性，配合光學、電學、熱學、聲學、壓力、質量變化等相對應的換能器(Transducer)，將反應轉換成可處理的訊號輸出。生物感測器的基本結構包括：生物物質層、換能器、訊號處理系統、訊號輸出系統。發展超高靈敏性生物感測器是一個很重要的趨勢，此產品研發成功將有助於人類對於疾病之早期測定，且有助於新功能性藥物之開發。若根據感測物質的種類可將生物感測器的種類區分為：酵素感測器、免疫感測器、受體感測器、微生物感測器、細胞感測器、組織感測器及核酸感測器等。以半導體製程為基礎之生物分子感測器是相當具有潛力之技術，因為其具大量製造之優勢，並有助於產品化後市場價格之競爭力。

生物晶片(Bio-chip)是運用分子生物學、基因資訊、分析化學等原理進行設計，以矽晶片、玻璃或高分子為基材，配合微機電、自動化或其他精密加工技術所製作之高科技元件。有如半導體晶片能快速進行繁複運算；生物晶片具有快速、精確、低成本之生化分析檢驗能力。「生物晶片」可以用晶片上是否單純以矩陣方式佈放生化探針，或是具有複雜的電路與微流體結構，因而區分成「微陣列晶片」或「微流體晶片」。目前已商品化的基因晶片是微陣列晶片最典型的代表，其外觀與一般顯微鏡使用之載玻片類似，只是在其表面固定了成千、上萬的「基因探針」，經由這些探針可以檢測樣品之中，是否含有特定之基因序列，

目前許多實驗室使用基因晶片來檢測樣品中各種基因表現程度、或比較兩種樣品中基因序列的差異性，也可以用來鑑定物種來源等。此外，可配合基因晶片使用的「樣品前處理晶片」則可歸類為微流體晶片，其構造則相對複雜許多，晶片上包括微小的管道用以輸送流體；微小的幫浦提供流體輸送所需的動力；小型化的加熱與溫控元件，可以進行生化反應；也可能加上光學或電化學檢測元件，用以檢測反應結果。基因晶片可以和樣品前處理晶片結合成為可獨立完成檢測的單一元件，此類晶片目前仍在研發之中。如前所述，生物晶片可以說是將傳統大尺度的檢測分析微小化並集中化。隨著尺度縮小，首先面臨的挑戰就是流體的面積/體積比(Surface To Volume Ratio) 改變所引起的困擾。在尺度縮小時，面積是以兩次方減少，但體積則是以三次方比例減少，若以相同的幾何形狀而言，每縮小物理尺度一倍時，單位體積流體與容器材料的接觸面積就會增加一倍。若傳統分析是以1 mL的體積進行，微小化之後，改以0.1 μL 進行同一項分析時，流體與容器接觸面積會增加100倍。生物晶片未來應用領域涵蓋生命科學基礎研究、新藥研發、醫療診斷、食品安全、環境監測、法醫鑑定、國防安全、化工生產等，極具潛力。

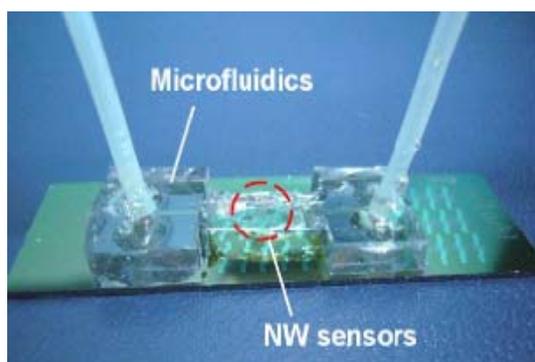


圖1-1、生物感測元件。

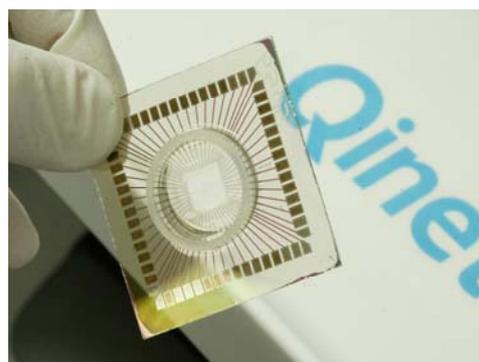


圖1-2、生物晶片。

1-3 矽奈米線生物感測器

哈佛大學化學暨生化系的 Liber 教授首先提出以雷射成長 Vapor-Liquid-Solid(VLS)方法製造出矽奈米線，將此奈米線組裝到晶片表面的電極上而形成場效電晶體。其係利用流體攜帶的方式將矽奈米線流到表面並跨接在兩個電極上(一般稱為源極(Source)和汲極(Drain))，然後將小分子的生物素(Biotin)組裝到奈米線的表面。接著若是分子量為53k Da的Streptavidin蛋白質流過奈米線表面，由於此蛋白質與Biotin分子間具有專一性，因此很快的反應到矽奈米線的電導(Conductance)。

由於矽奈米線場效電晶體極為靈敏，所以不同濃度的Streptavidin蛋白質其對奈米線之電導效應可以量測出(圖1-4)，利用奈米線場效電晶體的超高靈敏性(\sim pM)與極大的工作範圍(一般有 10^6)，在背電極調整到適合的操作電位下，其可以偵測到10 pM的Streptavidin分子，這項比先前傳統電化學法分析生物分子更加靈敏且工作範圍大[1]。

奈米線FET的分析原理，是利用奈米線上的載子密度 (Carrier Density)，受到表面接著分子 (例如DNA或是蛋白質) 所帶電荷的影響，依據固態物理的理論其載子會被Depletion或 Accumulation，進而改變奈米線的電導值。由於奈米線的尺度極小，對於外界分子所引入的電荷相當靈敏，所以可以用來辨識分子種類及分析濃度。

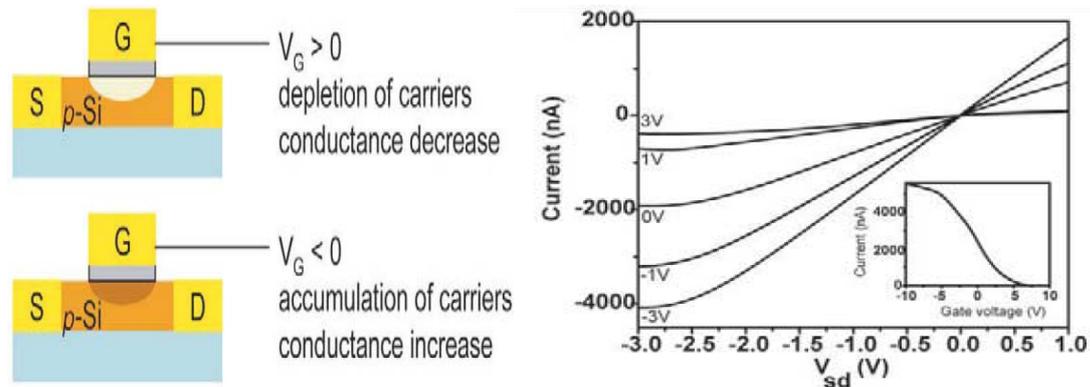


圖1-3、矽奈米線場效電晶體生物感測器之感測機制示意圖和電性圖[1]。

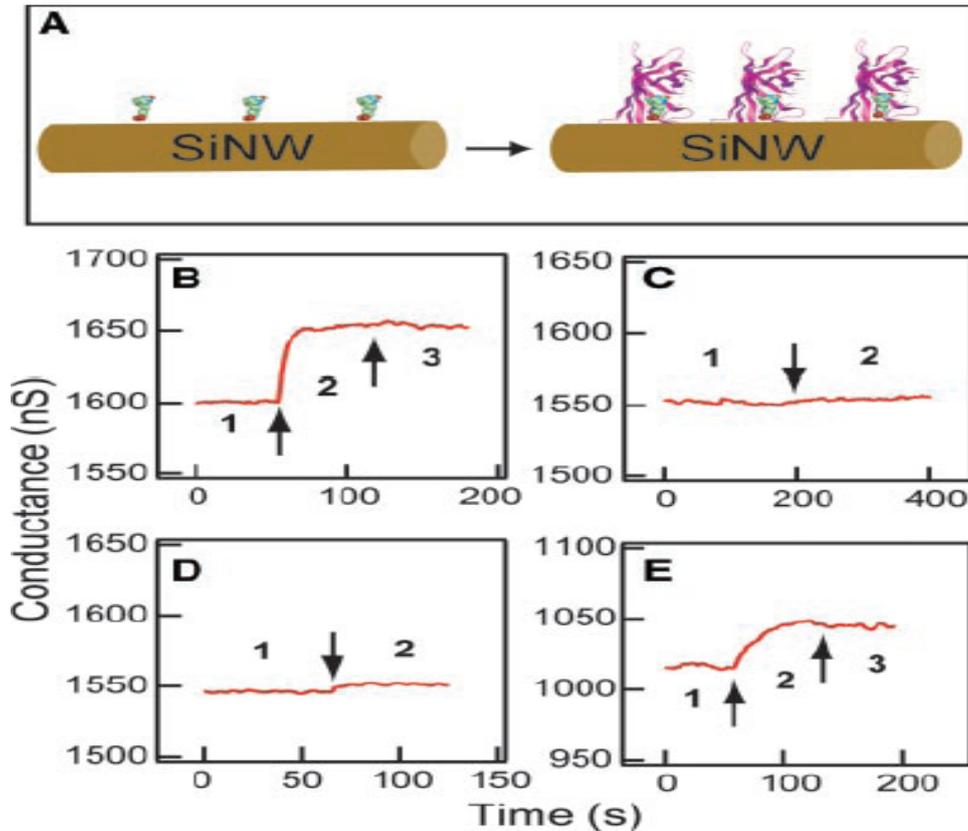


圖1-4、Charles M. Lieber團隊之實驗結果[1]。

1-4 蕭特基接面之生物感測器

近年來，許多一維的奈米結構生物感測器之研究，使用奈米碳管作為材料，其中，有一些研究，利用金屬與奈米碳管之蕭特基接面作為生物感測器，主要也是利用帶電之微小分子接至蕭特基接面，造成蕭特基接面之蕭特基能位障的改變，而使電性上有所改變。

此兩篇參考文獻，第一篇圖(1-5)[2]即為2006年韓國一研究團隊所作之蕭特基接面生物感測器，他們先在氧化層上作出網狀系統之奈米碳管，之後定義金屬之電極，利用金屬與奈米碳管之蕭特基接面，注入待測之生物分子，當帶電之生物分子接上蕭特基接面，則造成電性上的改變，進而感測生物分子。其感測極限可至1 pM，靈敏度可說相當的高。而他們的結論為，當加入不同閘極電壓時，造成其蕭特基接面之蕭特基能位障高度改變，進而造成電壓之改變。

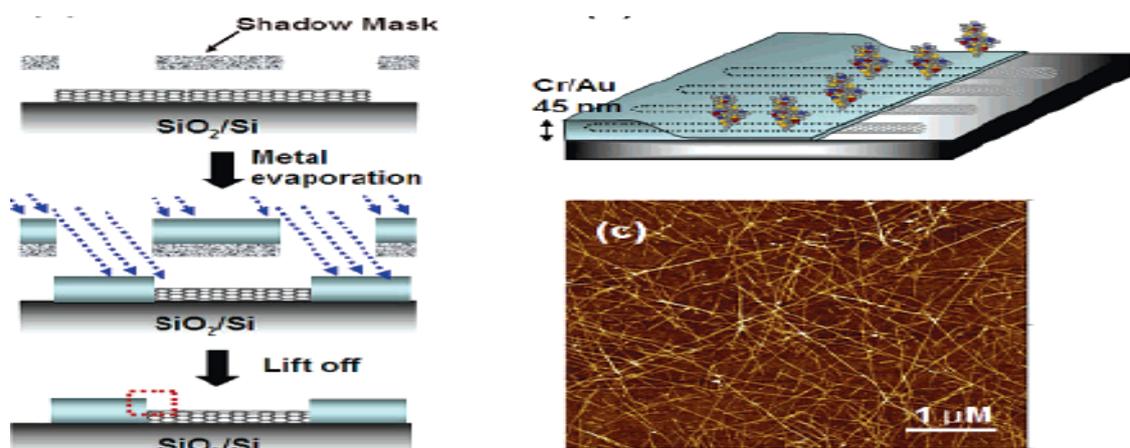


圖1-5、奈米碳管蕭特基界面生物感測器[2]。

第二篇圖(1-6)[3]為美國加州大學NanoSystems的團隊所做的奈米碳管場效電晶體應用於生物感測之研究。此篇文獻中強調在分子在金屬和奈米碳管間的界面的蕭特基接觸(Schottky Contact)的感測機制佔很重要角色，被吸附的分子可被金屬此界面接觸產生變化靈敏的調變。透過金屬的功函數(Work function)的調變影響金屬/奈米碳管之蕭特基介面，對整體元件電導值有重大變化量。

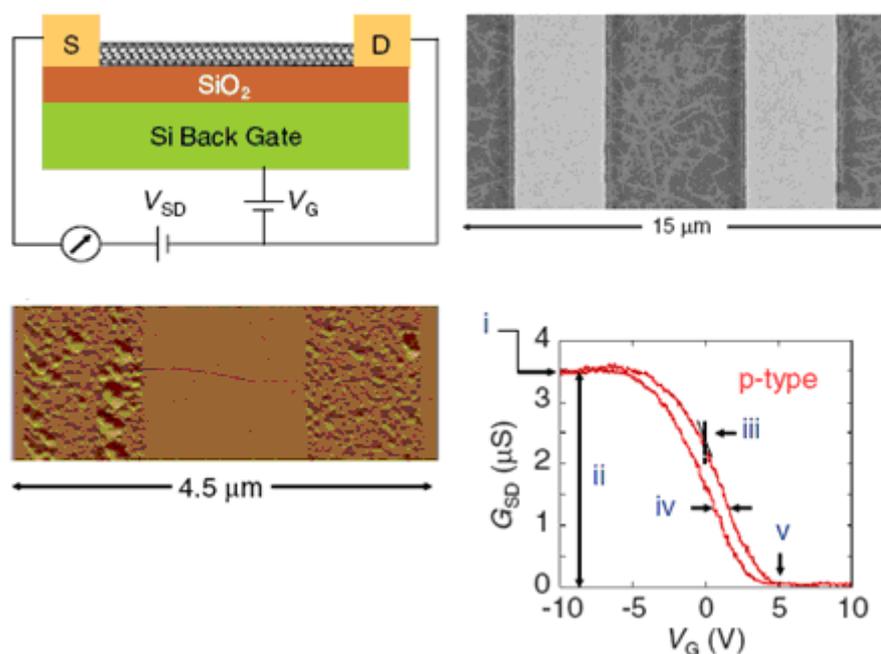


圖1-6、奈米碳管蕭特基界面生物感測器[3]。

1-5 蕭特基二極體之閘極效應

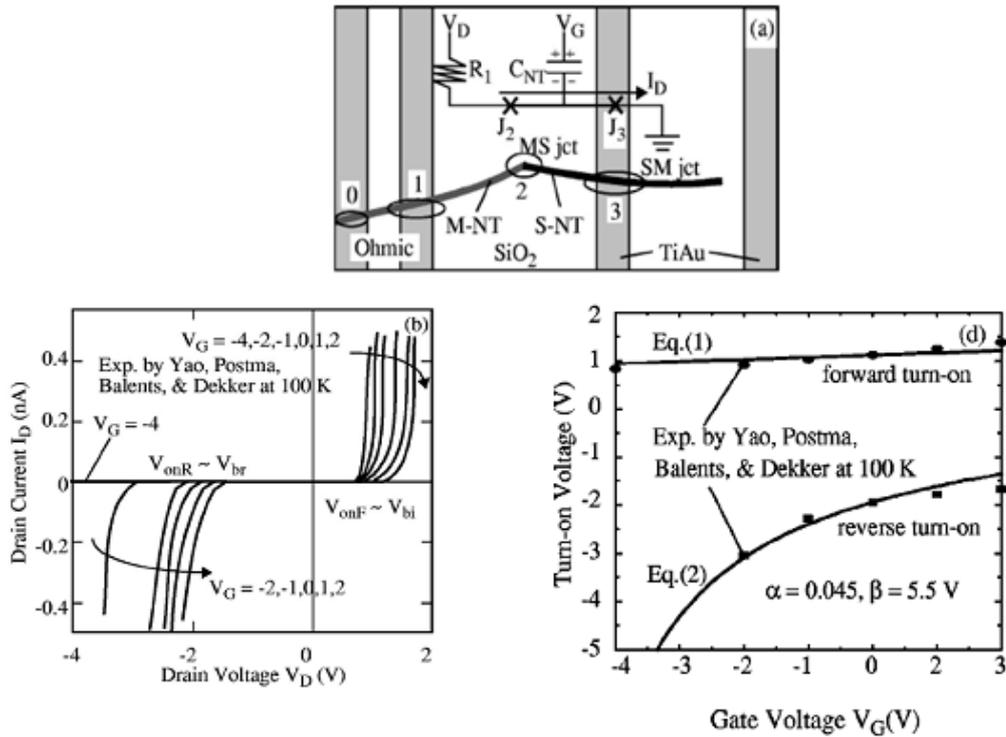


圖1-7、金屬/奈米碳管蕭特基界面之閘極效應示意圖和電性圖[4]。

此篇參考文獻[4]為探討金屬和N型奈米碳管界面受閘極調變的效應。建立金屬/碳管蕭特基界面之模型，推導出公式，得到下列結論：

此篇文獻所下的結論：

1. 蕭特基二極體順向和逆向導通電壓隨閘極大小增加而增加，導通電壓和閘極電壓為函數關係。
2. 隨著不同外加不同閘極電壓，會看到相對應的蕭特基能位障的改變。
3. 多數載子(此處為電子)數量在順向偏壓時，隨閘極變化之改變量較小。
4. 在逆向偏壓情況下，能位障改變隨閘極電壓改變較大，即在逆向偏壓操作下有較大閘極效應之意。

也因此，我們的實驗中將對蕭特基二極體作蕭特基能位障高度受閘極效應之改變作深入探討，以確認蕭特基二極體生物感測器之感測機制。

1-6 奈米線表面修飾AEAPTMS與金奈米粒子

此篇參考文獻[5]結合矽奈米線和金奈米粒子的特性，作出一個生醫感測的一平台，由金奈米粒子的製作出發，利用金屬鹽類的化學還原方式製造出粒徑約15奈米的金奈米粒子，探討了金奈米粒子在二氧化矽基板上的沉積機制，並成功在Si和SiO₂界面處製造出選擇性的沉積結構，之後利用原子力微影技術，製造出在奈米尺度下的選擇性沉積結構，並證明出金奈米粒子是可在未飽和的矽氧化合物上沉積，隨著我們根據此結果在原子力微影製作出矽奈米線表面上沉積上金奈米粒子，期間並觀察電性變化，最後以金奈米粒子做為橋樑連接上酵素KSI-126C，由導電電壓的平移，成功證明本實驗的方法所製備出的包覆金奈米粒子的矽奈米線FET確實能做為生醫感測元件。設計矽奈米場效電晶體(Si NW FET)作為一個生醫檢測平台，希望藉由表面體積比的增加提高偵測訊號量測的靈敏度，並減少分析物的使用量，最後從電導的變化和電壓電流變化，可明顯看出此生醫檢測的平台其電性受到表面狀態極大的影響，是由於表面體積比的增加，使得表面電流成了主導電性的主要因素。

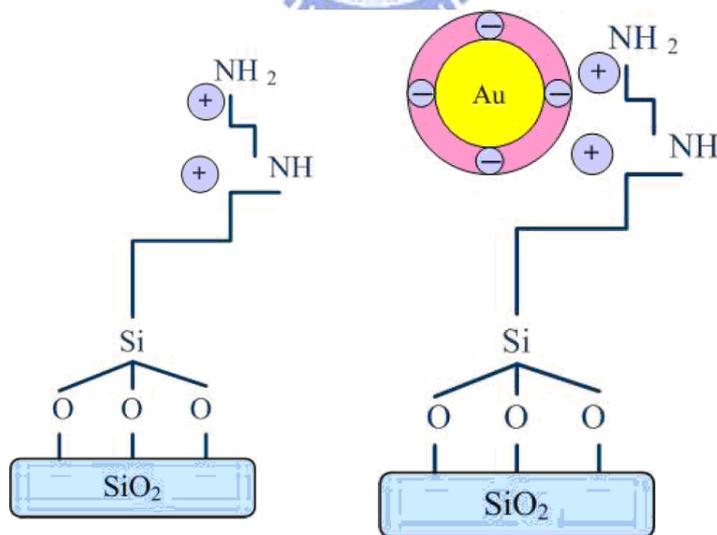


圖1-8、AEAPTMS改質二氧化矽表面及金奈米立子沉積[5]。

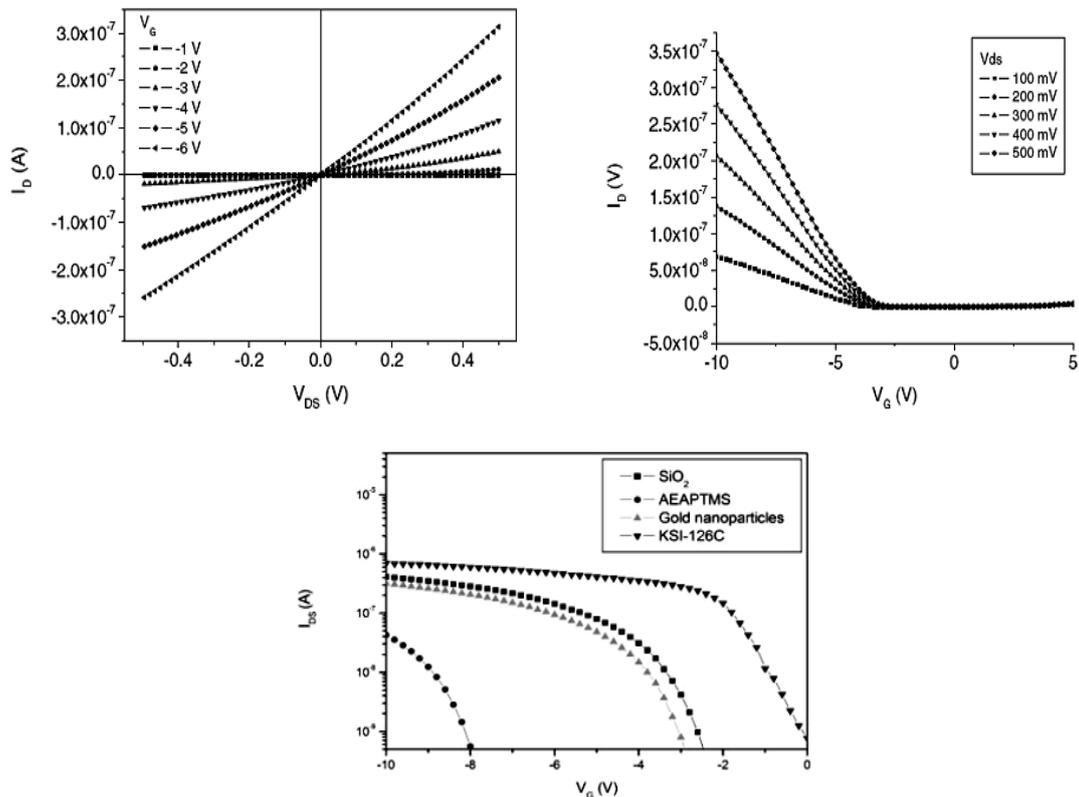


圖1-9、矽奈米線場效電晶體 V_{DS} 對 I_D 和 V_{DS} 對 V_G 和不同表面改質特性曲線[5]。



1-7 半導體元件模擬

所謂的半導體元件模擬就是以適當的模式傳輸來描述電晶體的電特性，運用高等數值分析方法來求解這些數學模式，同時用於分析與設計前瞻電晶體元件。過程包含了電晶體物理模式、數學理論、電腦演算法、模擬技術[6]。

隨著技術的發展半導體元件模式已從古典運動傳輸進入量子力學理論，高性能數值之計算物理方法與技術開啟超小電晶體傳輸行為之研究。電晶體的尺寸已進入次 45 奈米的時代，有效使用電腦輔助模擬扮演更重要的角色，除模擬外，最佳理論化的發展可同時滿足高規格元件設計之需求[6]。

研究主題含模式推導、數學性質、模式的求解、以及用電腦來模擬元件物理特性；而這些簡稱為半導體數學為什麼要存在於半導體工業中呢？從最原始的矽元素，到IC晶片，起碼需要花三個月的時間才能成就一顆有價值的IC，在這段漫

長的時間裡，有數以百計的程序需要被處理，只要其中有一步驟稍微出了差錯，就前功盡棄，因此，如果我們能先透過半導體數學的模擬計算，來預測某個條件下，元件所具有的物理特性，我們便能快速的找出最適合某類元件的組成係數，就能節省開發新元件所需的成本，這樣的好處在越往小元件發展，所節省的成本就越明顯。借由數值方法和高運算能力的電腦，我們可以得到近似的解，只要近似解夠接近真正解，就可以用此近似解來當作實驗所得的數據，如此就可以把一些不良的設計在此階段就先加以剔除。

在半導體元件日漸縮小的情況下，以前所被簡略的物理特性也都一一呈現出其重要性，因此需要更為精確更為複雜的數學模式來替代物理實驗，其所代表的意義是在更小的區域中未知函數的變化更為複雜，想要求得精確的近似解則需要更多的計算量，進而使得模擬元件特性需要耗費更多的時間，另外，數值模擬結果必須與實驗相互驗證、比較，因此數學、物理與工程等領域的整合也是非常重要的環結，所以半導體模擬是需要非常高度的科學計算技術與紮實的基礎科學基礎[7]。

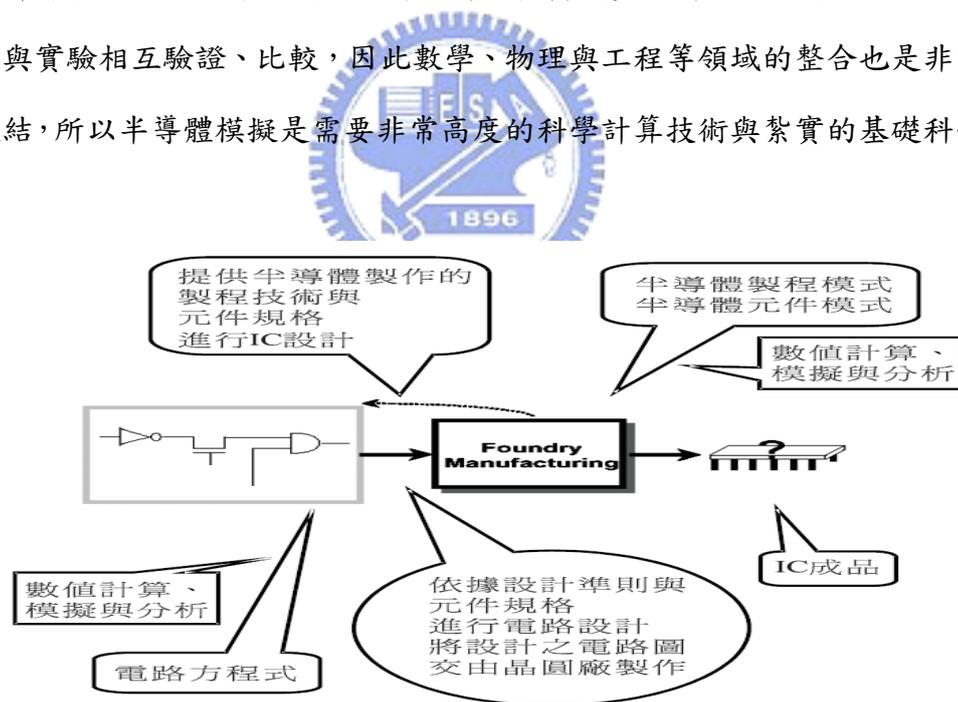


圖1-10、製程、元件、電路、模擬關聯圖[7]。

1-8 研究動機和研究目標

1-8-1 研究動機

本論文的研究動機為：

生物分子感測器之高應用價值，在醫療方面會對人類有極大貢獻，基於此理由，從最基本的半導體元件特性探討，利用電腦即可做到快速有效的結果和分析，進一步邁入分子偵測的應用，在此必須驗證這種結構設計下應用的可行性，以作為實際實驗的參考平台。

1-8-2 研究目標

理論分析矽奈米線場效電晶體及蕭特基二極體奈米線場的元件特性，以此元件特性為基礎，最佳化元件的設計條件(矽奈米線的參雜濃度和矽奈米線尺寸)供分子偵測應用上，研討偵測靈敏度極限的問題。



1-9 論文架構

本論文分為六個章節。

第一章為「緒論」，而第二章為「物理模式與數值解法」，後者說明本論文所採用的元件的結構設計所需用到的物理模式(Model)，物理模式建構下需要哪些半導體基本公式，和一些其他的物理模式簡介。此章節也包含物理模式下的數值解法。

第三章為「最佳化與比較矽奈米線場效電晶體和蕭特基接面奈米線元件特性結果與分析」，主要是敘述如何最佳化二個不同元件結構，利用不同元件特性探討結果，討論多種不同變因下，如何達到元件電導改變量(ΔG)最大的目的。

第四章為「比較矽奈米線生物分子感測器和蕭特基接面奈米線之生物分子感測器模擬特性結果與分析」，展示利用第三章所講述的最佳化後所得到的實驗最佳條件，再針對這些實驗結果作進一步的生物分子偵測的應用。

第五章為「結論」，會將本論文所達到的成果作個總結。提出若要將此架構應用在探討奈米等級之矽奈米線場效電晶體和金屬半導體接面的蕭特基奈米線，提供實際實驗上元件在設計及製造上該注意什麼的建議。

第六章「未來展望」，本文的實驗在分子偵測的應用下，僅考慮在大氣環境下接上分子的靈敏度分析，接下來進階的工作可以再利用此 TCAD 工具，仿效生物分子在不同帶電離子溶液下，進行分子偵測，此工作更為複雜，可再自行再撰寫程式載入 TCAD 中，基於本論文所建立之平台，做更接近真實生物感測分子的模擬實驗，提供更有效的實際實驗的參考方向和數據。



第二章

物理模式與數值解法

2-1 模擬器(Simulator)簡介

電腦輔助設計(Computer-Aided Design;CAD)又稱模式與模擬(Modeling and Simulation)或計算科學與工程(Computational Science and Engineering)。CAD跨領域整合數學、物理與程式，是科學、工程管理分析、與決策重要工具，更是知識經濟時代新知識發展的關鍵。

電腦輔助設計，TCAD (Technology Computer-Aided Design)應用在半導體領域上，意指用電腦模擬去發展和最佳化的半導體製程技術和元件設計。是半導體研發過程中不可或缺的工具。TCAD 的應用領域包括所有和物理現象有關而且我們必須瞭解的事物，如半導體製程、元件物理、電路缺陷(Circuit Defects)等，凡是像電磁、機械方面的物理現象，都是 TCAD 的應用領域，因此，TCAD 可以稱為物理基礎上的模擬(Physically Based Simulation)。TCAD 的模擬工具即是求解半導體物理偏微分方程式，如擴散-漂移的傳輸方程式”離散化”轉成矩陣形式求解(電位或載子濃度)。

總結起來，TCAD 所扮演的角色相當簡單，可歸納為以下幾點：一、試著利用電腦將製程成本減至最低。二、節省實際製程時間，三、做實驗無法做的事情，例如可以藉由模擬看到電晶體的內部特性，嘗試元件製程和設計的最佳化，和實際實驗比較，找出實驗製程上的缺陷和導致元件特性表現不佳之原因。四、在半導體元件尺度微縮下的趨勢，可試著藉由模擬來嘗試尺度微縮下的極限(Limits of Device Scaling)，提供未來元件設計趨勢。五、教育的功能，因為 TCAD 就像一個虛擬實境(Virtual Reality)，像一個電腦遊戲，所以只要一部電腦與教學程式便可以訓練工程師了。

TCAD之模組功能簡介及操作步驟:

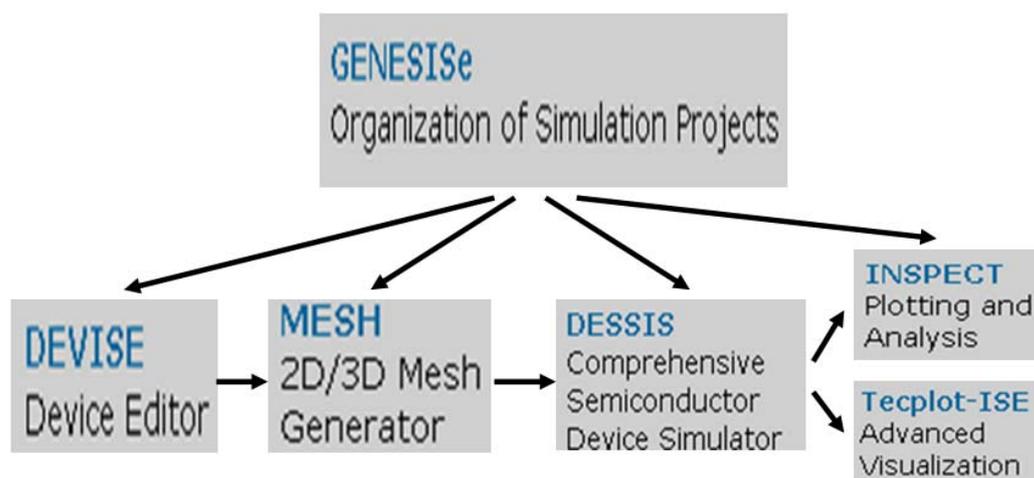
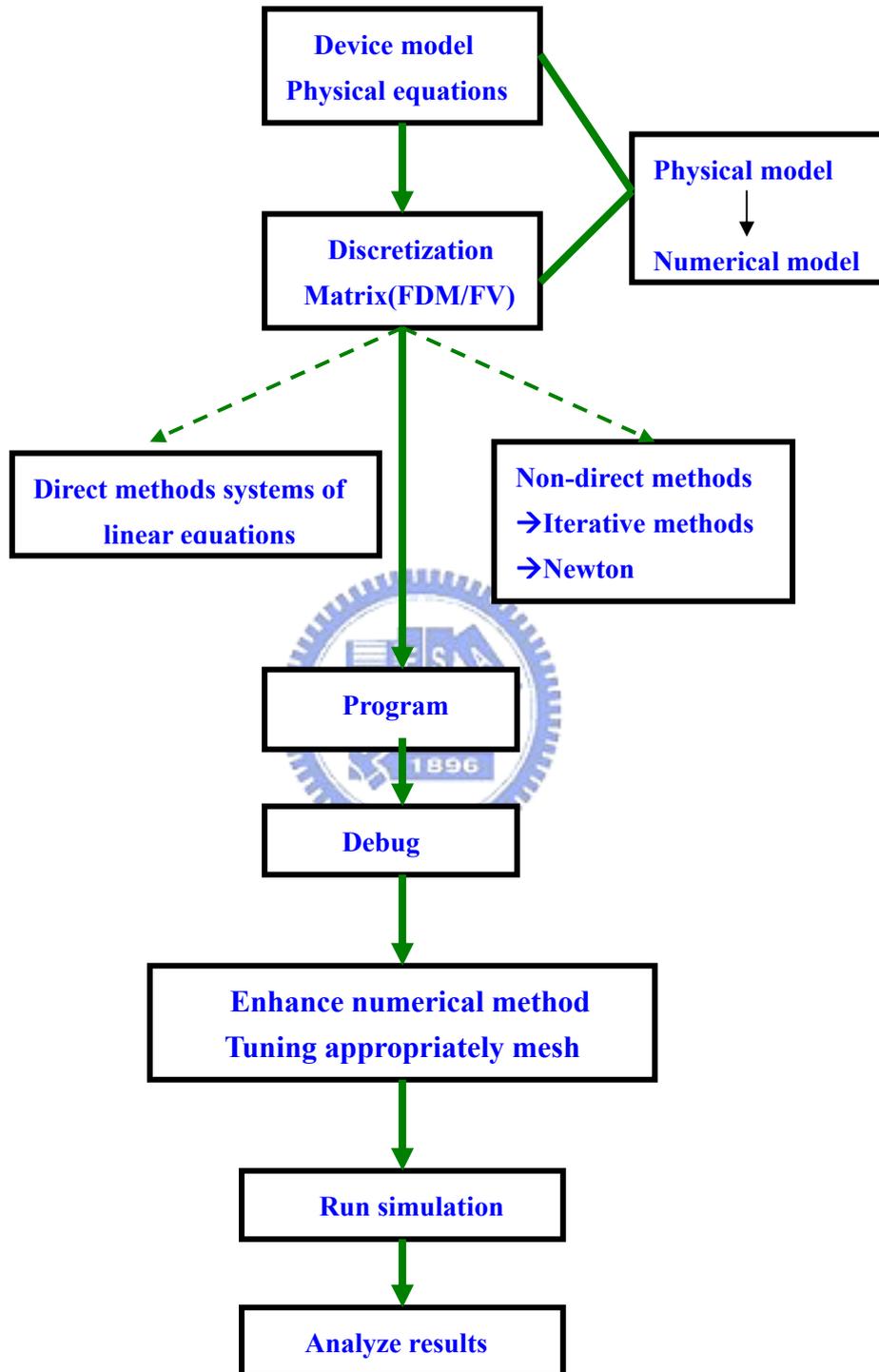


圖2-3、Genesise整合介面下建立Project各模組流程圖。

- **Genesise**：整合畫面。加上工具，整合模組，執行整個模組建立完整模擬流程。
- **Devise**：設計元件結構(Device Structure)，定義電極(Contact)，定義半導體參雜濃度和類型(Doping Concentration and Dopant Type)，設定網格(Mesh)。
- **Dessis**：電極電壓設定(Electrode)，決定物理意義(及模型)，數值方法(Math)，求解(Solve)。
- **Inspect / Tecplot**：顯示電性圖表，萃取計算後之數值(電流值，電壓值...)，內建公式或自訂公式再將圖表上之數值進行計算(V_{TH} ， $g_m...$) / 顯示電性圖表，顯示各項物理量之強度分布(電場，電壓，遷移率，載子濃度...)。

2-2 模擬流程



2-4、模擬流程圖。

步驟一：

選擇適合的欲設計”目標元件”之物理意義(物理公式),建構出正確的物理模型。

步驟二：

物理模式皆由多組”偏微分方程式(PDE: Partial Differential Equation)”所組成,要求解模型裡所包含之所有值,必須靠解偏微方程組才能獲得,過程十分繁雜,必須先將這些微分方程組先進行”離散化(Decartelization)”轉成矩陣形式求解,此時才轉換成數學模式。

步驟三：

離散化轉成矩陣有兩種方式:一為 FDM(Finite Difference Method)有限差分法,二為 FVM(Finite Volume Method)有限體積法。

步驟四：

離散後的矩陣若是線性方程,則可以用直接法(反矩陣法)即可求得;若離散後的矩陣若不是線性方程,就要使用疊代法(Iterative Methods)去近似計算,最常用的疊代法就是牛頓疊代法(Newton Iterative Methods)。

步驟五：

將物理模式轉成數學模式後,丟入 TCAD 的操作去程式指令化。

步驟六：

求解後,程式或指令會出現錯誤,此時要不斷去修正之前的步驟,才能得到我們所設計元件最後計算出正確的物理值,含有正確的物理意義。在修正過程中,網格的切割設計技巧是一大工程,設計數量適當或優良與否,會影響求解數目,求解時間,和求解值精確度和求解值是否落入收斂的計算範圍。

步驟七：

分析成功模擬出的電性結果,比對和驗證是否與設計之目標元件物理特性互相符合,或是有多大誤差比例存在。

2-3 元件模擬使用的基本公式

(1) 帕松方程式(Poisson Equation)

$$\nabla \varepsilon \cdot \nabla \Psi = -q(p - n + N_{D+} - N_{A-}) \quad (\text{式 2-1})$$

ε 為電子介電常數， q 為電子電荷帶電量， n 和 p 是電子和電洞密度， N_{D+} 為施體數目， N_{A-} 為受體數目。

由高斯定律推導出來，在真空中，電場強度向外的總通量相當於高斯面內包含的總電荷量除以真空介電係數。且電子的濃度加上受體的濃度相當於電洞的濃度加上施體的濃度，電荷守恆的觀念。此公式計算後求得電位和電場，熱平衡下，外加電壓下的靜態行為描述[9]。

(2) 電子連續方程式(Electron Continuity Equations)

$$\nabla \cdot J_n = qR + q \frac{\partial n}{\partial t} \quad (\text{式 2-2})$$

R 為電子-電洞再結合速率， J_n 為電子流密度。

此方程式求解後得到電子流密度，描述電子流的動態傳輸行為，電子產生的速率和電子電洞復合的速率平衡[9]。

(3) 電洞連續方程式(Hole Continuity Equations)

$$\nabla \cdot J_p = qR + q \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{式 2-3})$$

R 為電子-電洞再結合速率， J_p 為電洞流密度。

此方程式求解後得到電洞流密度，描述電洞流的動態傳輸行為，電洞流產生的速率和電子電洞復合的速率平衡[9]。

2-4 物理模式簡介

根據元件尺寸大小和外加電壓大小決定要使用的模型(Model)，漂移-擴散(Drift-Diffusion Model)是最基本的模式，依照元件設計需求由 Drift-Diffusion Model 去修正[9][10]。

2-4-1 漂移-擴散模式(Drift-Diffusion Model)

漂移-擴散模式(Drift-Diffusion Model)，簡稱 DD-Model，此模型是最基本的，所有其他進階模式都是由此模型出發再加入不同所需之修正項而建立的。此模型只有計算帕松方程式和電子-電洞連續方程式，從帕松方程式求解後得到的電位再帶入電子-電洞連續方程式，進而求得電子流、電洞流的密度。電流密度為總電量和電荷移動速率之積，和電荷數目及電場大小有關的函數[10]。

適用範圍：低電壓、長通道元件、低功率密度元件。

$$J_n = -nq\mu_n \nabla \phi_n \quad (\text{式 2-4})$$

$$J_p = -pq\mu_p \nabla \phi_p \quad (\text{式 2-5})$$

μ_n 和 μ_p 是電子和電洞的遷移率(Mobilities)， ϕ_n 和 ϕ_p 是準費米電位(Quasi-Fermi Potential)。

2-4-2 量子模式(Quantization Model)

半導體元件設計往尺寸縮小趨勢下進行(MOSFETs 的氧化層厚度，通道寬度等等...)，有可能微縮到出現量子機制的效應，在 MOSFETs 最主要基本的量子現象就是臨界電壓 (Threshold voltage) 的平移 (Shift) 和閘極電容值的縮減。

加入量子效應至古典的元件模擬修正，最直接的解法就是外加一個電位 Δ 修正，使得古典半導體公式修正為：

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_{FN} - E_c - \Delta}{K_B T}\right) \quad (\text{式 2-6})$$

n 是電子密度， T 是載子溫度， K_B 是波茲曼常數 (Boltzmann Constant)， N_c 是傳導帶的狀態密度， E_c 是傳導帶能量， E_{Fn} 是電子的費米能量。

物理意義為總能量等於動能加上位能，這是一個機率密度的函數，且和時間無關。古典力學和量子力學的最大差異在於，在古典力學之中，可以精確的算出一個物體或粒子的位置，而在量子力學中，一個粒子的位置則是以機率加以表示 [11]。

2-4-3 密度-梯度模式(Density-Gradient Model)

不解 Schrodinger Equation，但還是要分析量子效應，結合古典半導體物理和量子半導體物理的行為，是 Drift-Diffusion Model 加量子修正的模型。

$$J_n = -qn\mu_n\nabla\phi + qD_n\nabla n - qn\mu_n\nabla\left(2b_n\frac{\nabla^2\sqrt{n}}{\sqrt{n}}\right) \quad (\text{式 2-7})$$

b_n 是 Density-Gradient 的係數，決定在電氣特性上梯度效應的強度大小， μ_n 是電子遷移率， D_n 是電子擴散係數， ϕ 是電位， n 是電子密度。 b_n 值的選擇是很重要的且具決定性的 [6][12]。

2-4-4 選擇適當的模式

本論文討論之奈米線的長度為 (1 μm 、2 μm 、5 μm 、10 μm)，線寬約為 50 nm、75 nm、100 nm、125 nm、150 nm，高度約為 35 nm，濃度從 10^{15} cm^{-3} ~ 10^{19} cm^{-3} ，晶圓種類為 P 型 SOI (Silicon On Insulator) Wafer。若以生物感測器在微流道下的溶液的環境下感測，汲極只能加上小偏壓以防止微流道內的溶液解離，產生不必要的離子，操作電壓範圍為 $V_D = \pm 0.5 \text{ V}$ ，因為是長的主動區加上小偏壓，尺寸太大不需考慮量子效應且小電場下熱效應造成晶格振動的現象可以忽略的情況下，但關鍵線寬有討論至 100 nm 以下範圍，故選 Density-Gradient Model 之量子修正模型來作為本論文的模擬模型 [10][12]。

2-5 數值解法

2-5-1 牛頓疊代法 (The Newton's Iterative Method)

疊代是數值分析中通過從一個初始估計出發尋找一系列近似解來解決問題（一般是解方程或者方程組）的過程，為實現這一過程所使用的方法統稱為疊代法。

跟疊代法相對應的是直接法（或者稱為一次解法），即一次性解決問題，例如通過開方解決方程 $x^2 = 4$ 。一般如果可能，直接解法總是優先考慮的。但當遇到複雜問題時，特別是在未知量很多，方程為非線性時，我們無法找到直接解法（例如五次以及更高次的代數方程沒有解析解），這時候或許可以通過疊代法尋求方程（組）的近似解。最常見的疊代法是牛頓法[9]。

在此論文解半導體物理公式(偏微分方程組)離散化過程完成後變成矩陣，此矩陣是非線性矩陣，無法用直接法(法矩陣法)直接求得時，就使用牛頓疊代法。

牛頓疊代法，即是我們在求數值近似解時，常用的一個牛頓疊代法的操作步驟[12]：

(1)

找一個起點 x_0 。

(2)

從 $(x_0, f(x_0))$ 作切線：

$$y = f(x_0)(x - x_0) + f(x_0) \quad (\text{式 2-8})$$

交 x -軸於

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (\text{式 2-9})$$

(3)

續用此法，得到數列 x_n 的遞迴關係式：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (\text{式 2-10})$$

收斂條件為：

$$|f'(x_k)| < 1 \quad (\text{式2-11})$$

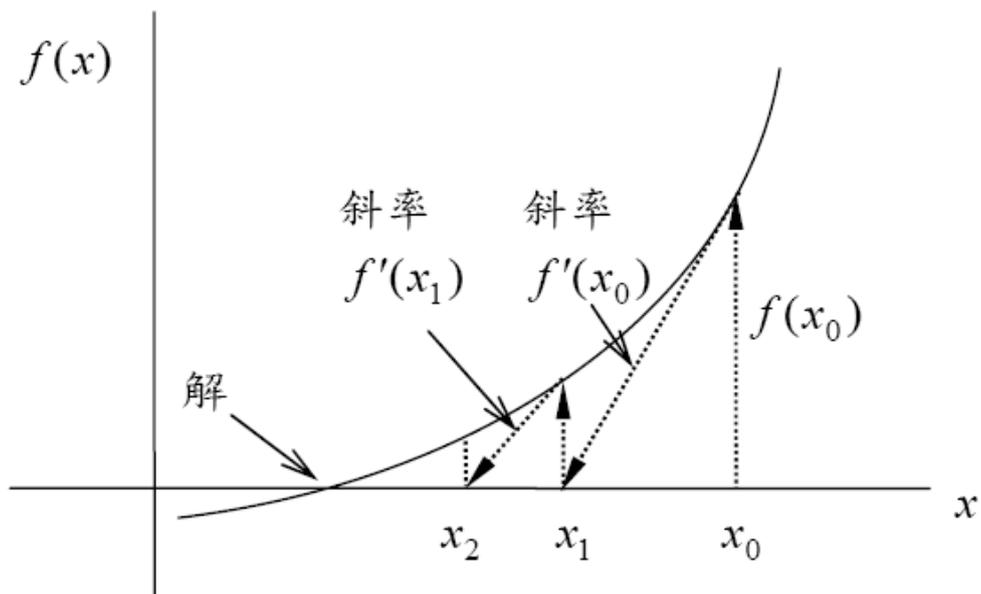


圖2-5、牛頓疊代法近似求解示意圖。

第三章

最佳化與比較矽奈米線場效電晶體和蕭特基接 面奈米線元件特性結果與分析

3-1 實驗動機

此章節探討矽奈米場效電晶體和蕭特基接面奈米線兩種不同元件的特性，討論不同條件下分別對此兩種元件呈現的閘極效應影響，進而對元件最佳化分析，針對”閘極效應”，找出哪種元件的哪種條件下，可以有最顯著的效果。

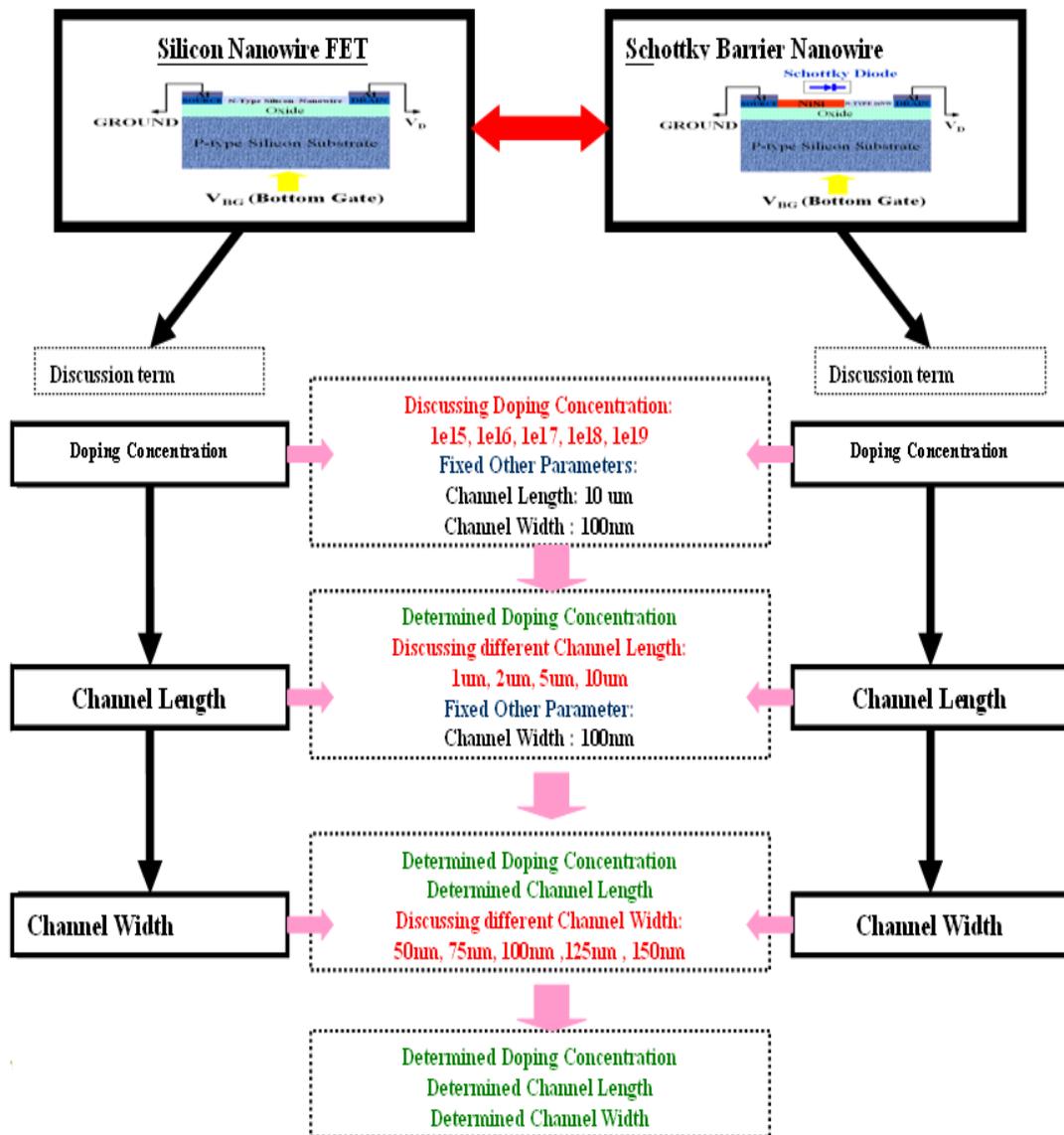


圖 3-1、元件最佳化步驟。

步驟一：

先從矽奈米線參雜濃度(Doping Concentration)開始探討(10^{15} cm^{-3} 、 10^{16} cm^{-3} 、 10^{17} cm^{-3} 、 10^{18} cm^{-3} 、 10^{19} cm^{-3})，由於參雜濃度此變因一改變就是 10 倍數變化，所以先探討參雜濃度，先決定變因大的條件，再往較細微變化的結構尺寸去討論[13]。

結構尺寸定為：

通道長度(Channel Length): $10 \mu\text{m}$ ，通道寬度(Channel Width): 100 nm 。

步驟二：

決定了矽奈米線參雜濃度後，開始探討通道長度(Channel Length)($1 \mu\text{m}$ 、 $2 \mu\text{m}$ 、 $5 \mu\text{m}$ 、 $10 \mu\text{m}$)，通道長度是 μm 等級變化，通道寬度是 nm 等級變化。此時通道寬度先暫定 100 nm 。

步驟三：

決定了通道長度後，開始討論變化最細微的通道寬度討論(50 nm 、 75 nm 、 100 nm 、 125 nm 、 150 nm)。



3-2 元件結構和物理機制

3-2-1 矽奈米線場效電晶體(Si Nanowire-Wire Field Effect Transistor)

元件結構和條件參數：

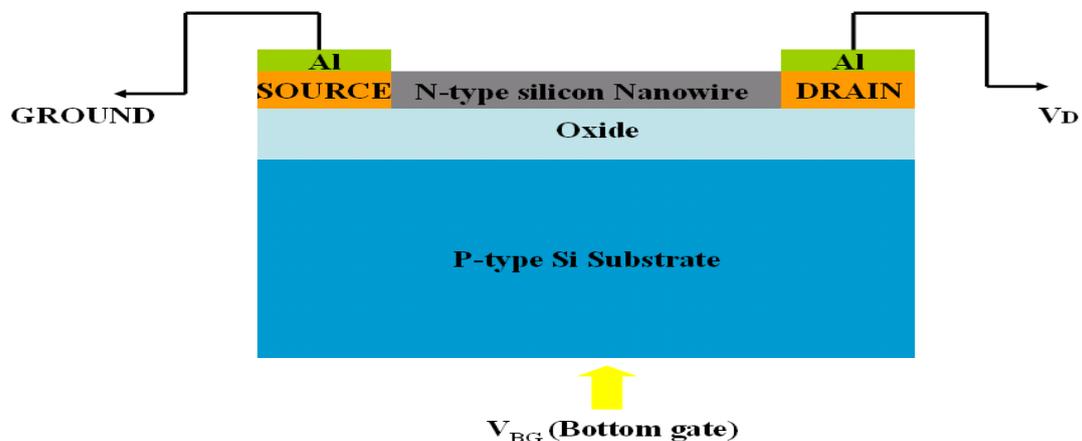


圖 3-2、矽奈米線場效電晶體結構圖。

本文研究的矽奈米線場效電晶體是以 SOI 為基礎而設計製造而成。

所謂的 SOI 就是指具有在一絕緣體上再生長一層單晶矽薄膜或者是單晶矽薄膜被一塊絕緣層(通常是 SiO_2)以支撐的矽體底中分開這樣結構的材料。SOI 結構材料已經被考慮的 SOI 是製造 MOS 電晶體理想的基體材料。SOI 提高積體電路 (IC) 性能(高速，低功率損耗，可靠性) [14]。

根據 CMOS 電路功率損公式：

$$P \approx CV^2 f + I_L V \quad (\text{式 3-1})$$

P 是電路總功率損失; C 是總電容(包括結電容寄生容量和接線電容量); V 是電源電壓; f 是頻率; I_L 是靜態的漏電流。由此可見，要降低電路功率損耗，首先應降低電源電壓，其次降低總電容和靜態的漏電流[15]。

- (1)非常適合於低壓下操作，中間一層很厚的(Buried Oxide Layer)可視為一層很好的絕緣層去減少 Substrate 的電容值，從此，不同也許減少總電容根據電路設計的 15%~30%，可提升元件的操作速度;
- (2)加強 MOS 元件開關性能，(Sub Threshold Swing)次臨界斜率更為陡峭，從而增強了元件在低壓下的驅動能力，並且降低了靜態的漏電流。
- (3)隔離更加簡化，有利於提高集成度;
- (4)絕緣層(Box)阻絕了寄生電導通路，因而消除了閉鎖效應;
- (5)降低次臨界電壓對溫度敏感度。

以下為元件結構參數:

1. Channel Width: 50 nm、75 nm、100 nm、125 nm、150 nm。

通道寬度有 5 種，各為本實驗室實際實驗製造出的奈米線線寬列為本文參考值。

分別為 50 nm、75 nm、100 nm、125 nm、150 nm。

2. Channel Length: 1 μm 、2 μm 、5 μm 、10 μm

通道長度有4種，分別為1 μm 、2 μm 、5 μm 、10 μm ，也是實驗室實驗參考值。

3. Channel Height: 35 nm

通道厚度定為35 nm。

4. Oxide thickness: 150 nm

SOI晶圓上的氧化層化厚達150 nm，參考Wafer資料。

5. Si Nanowire doping concentration:

n-type: 10^{15} cm^{-3} 、 10^{16} cm^{-3} 、 10^{17} cm^{-3} 、 10^{18} cm^{-3} 、 10^{19} cm^{-3}

矽奈米線的參雜物(Dopant)種類為磷(P)而形成N-type的矽奈米線。參雜濃度討論範圍從輕參雜到重參雜5種不同濃度: 10^{15} cm^{-3} 、 10^{16} cm^{-3} 、 10^{17} cm^{-3} 、 10^{18} cm^{-3} 、 10^{19} cm^{-3} 。

6. Source/Drain Doping Concentration: n-type : 10^{20} cm^{-3}

源極端和汲極端重參雜到 10^{20} cm^{-3} ，參雜種類也為磷，N-type。最後整條矽奈米線為 N^+-N-N^+ 結構。



3-2-2 矽奈米線場效電晶體元件操作機制

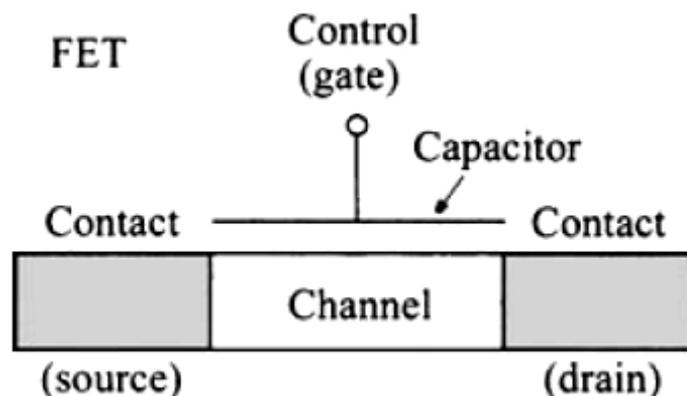


圖 3-3、場效電晶體結構示意圖。[16]

1. 增強模式(以 N-Channel FET 為例)零閘極偏壓下，通道的電導值非常低，且我們必須在閘極外加一正電壓以形成 n 通道，此元件若無外加閘極電壓，是為常關型元件。

2. 空乏模式(以 N-Channel FET 為例)當零伏特被外加至閘極時，N 型通道已存在 (就如本實驗矽奈米線完成時，通道已經形成)，P 型基板的 MOS 元件的臨限電壓可能是負的;這意指外加零電壓時，就有一層電子反轉層存在。這樣子的一個元件被認為是空乏模式的元件。

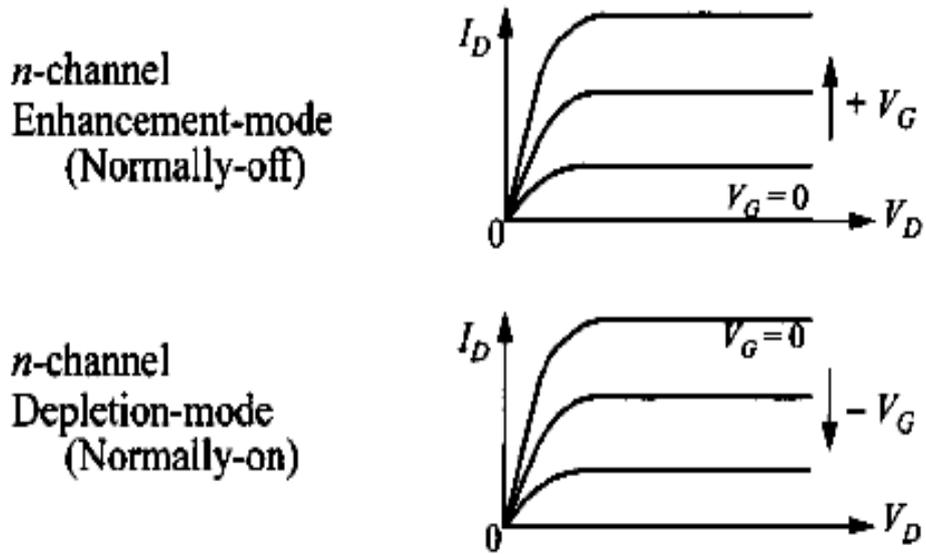


圖 3-4、增強型 NMOS FET(Enhanced Mode)和空乏型 NMOS FET(Depletion Mode) 的電流電壓特性曲線圖。[16]

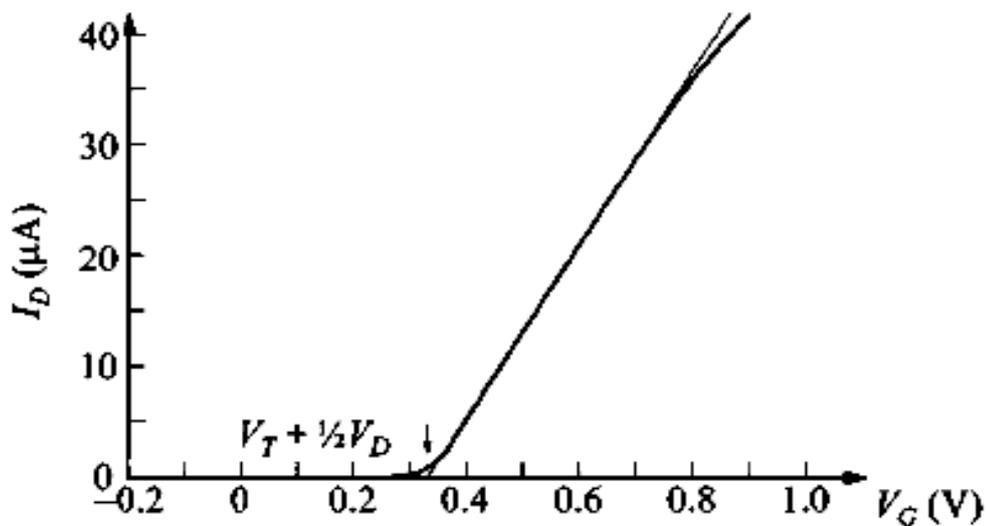


圖 3-5、N 型通道 FET 的電壓電流轉移曲線圖。[16]

3-2-3 蕭特基接面奈米線結構和條件參數

1. Work function: 4.83 eV~4.3 eV (Ni~NixSiy)

NiSi: 4.65 eV

若選用一般之金屬與半導體直接形成接面，可能會造成接面相當粗糙，且因此得到極大之漏電流。所以一般會選用金屬之矽化物如Ti-Silicide (TiSi₂)、Co-Silicide (CoSi₂)、Ni-Silicide (NiSi)來形成蕭特基接面。

Ni-Silicide (NiSi)金屬矽化物，電阻率較低，所以我們最後選用Ni-Silicide作為我們蕭特基二極體之金屬部份。從參考文獻得知純Ni~ NixSiy的功函數範圍從4.83 eV~4.3 eV[17]，NiSi此種晶相的功函數約為4.65 eV。

2. Channel Width: 50 nm、75 nm、100 nm、125 nm、150 nm

3. Channel Length: 1 μm、2 μm、2.5 μm

4. Channel Height: 35 nm

5. Oxide thickness: 150 nm

6. Si doping concentration: n-type: 10^{15} cm^{-3} 、 10^{16} cm^{-3} 、 10^{17} cm^{-3} 、 10^{18} cm^{-3} 、 10^{19} cm^{-3}

7. Source/Drain doping concentration: n-type: 10^{20} cm^{-3}

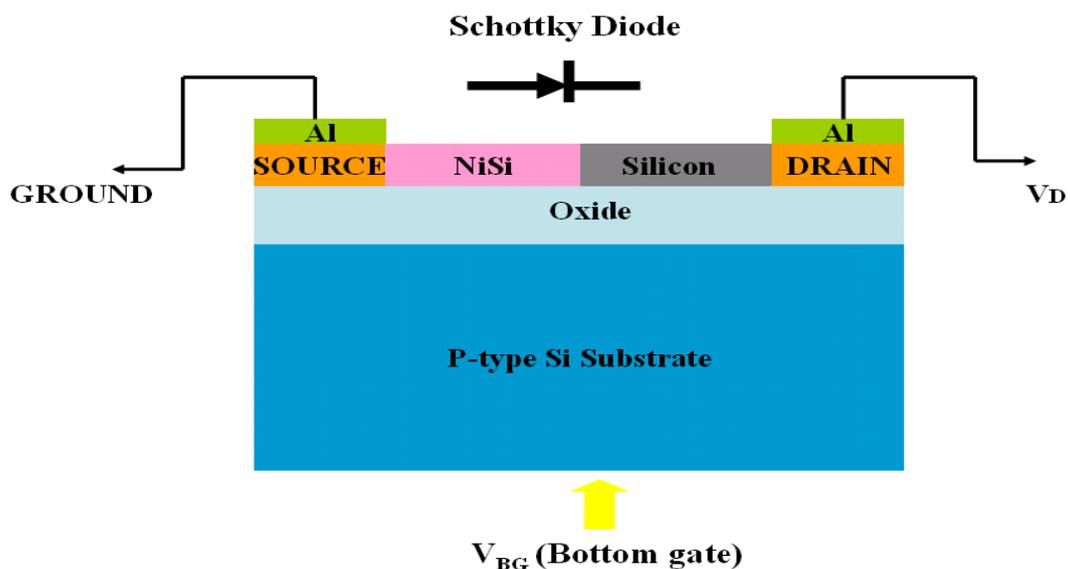


圖 3-6、蕭特基接面奈米線結構示意圖。

3-2-4 蕭特基接面奈米線電晶體元件操作機制

3-2-4-1 蕭特基接面

蕭特基接面簡單來說，就是金屬/半導體兩材料的費米能階在熱平衡狀態時拉平時，所形成有能位障勢存在的接面。

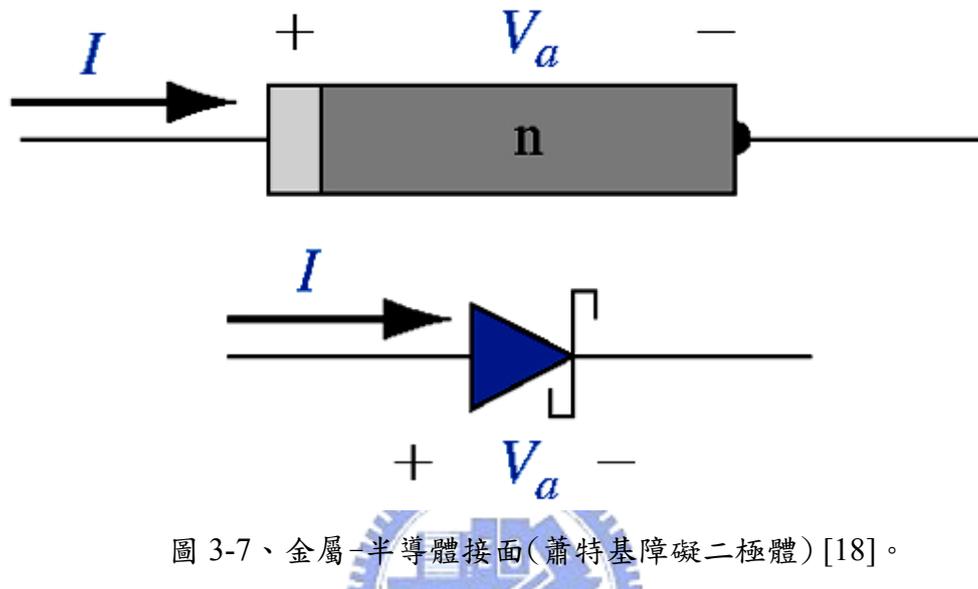


圖 3-7、金屬-半導體接面(蕭特基障礙二極體) [18]。

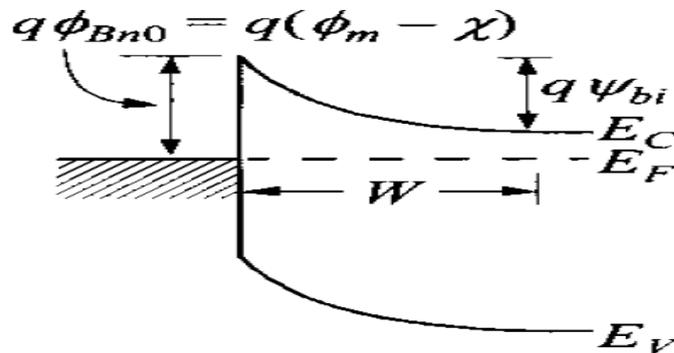


圖 3-8、一個金屬-N 型半導體的理想能帶圖 [16]。

ϕ_m =Work function of metal

ϕ_{Bn0} =Barrier height(without image-force lowering)

ϕ_0 =Neutral level of interface states

ψ_{bi} =Built-in potential

ϵ_s =Permittivity of semiconductor

χ =Electron affinity of semiconductor [Si: χ (4.05 V)]

在接觸前，半導體之中的費米能階是比金屬的費米能階高。為了使整各系統的費米能階成為一個固定的常數來達到熱平衡，電子會由半導體流進金屬之中的較低能量狀態。帶正電荷的施體原子會留在半導體之中，而產生一個空間電荷區域。

$$W_D = \sqrt{\frac{2\epsilon_s(\Psi_{bi} - V - \frac{KT}{q})}{qN_D}} \quad (\text{式 3-2})$$

ϕ_{Bn} 是半導體接觸的障礙高度(Barrier Height)，這是金屬之中試圖移動進入半導體的電子所看到的障礙。這個障礙稱為蕭特基障礙(Schottky Barrier)，理想而言，它是由下式來加以表示：

$$q\phi_{Bno} = q(\phi_m - \chi) \quad (\text{式 3-3})$$

如果我們在半導體上外加一個相對於金屬的正電壓，則半導體/金屬的障礙高度會增大，而在理想化的狀況下 ϕ_{Bn} 會保持固定不變。這種偏壓狀況是逆向偏壓(Reverse Bias)。如果在金屬上外加一個相對於半導體的正電壓，則半導體/金屬的障礙高度 V_{bi} 會下降，而基本上， ϕ_{Bn} 會保持固定不變。在這種情況下，由於障礙已經被降低，因此電子會比較容易由半導體流進金屬之中。這種偏壓狀況就是順向偏壓(Forward Bias)。 V_R 是逆向偏壓大小， V_F 是順向偏壓大小。

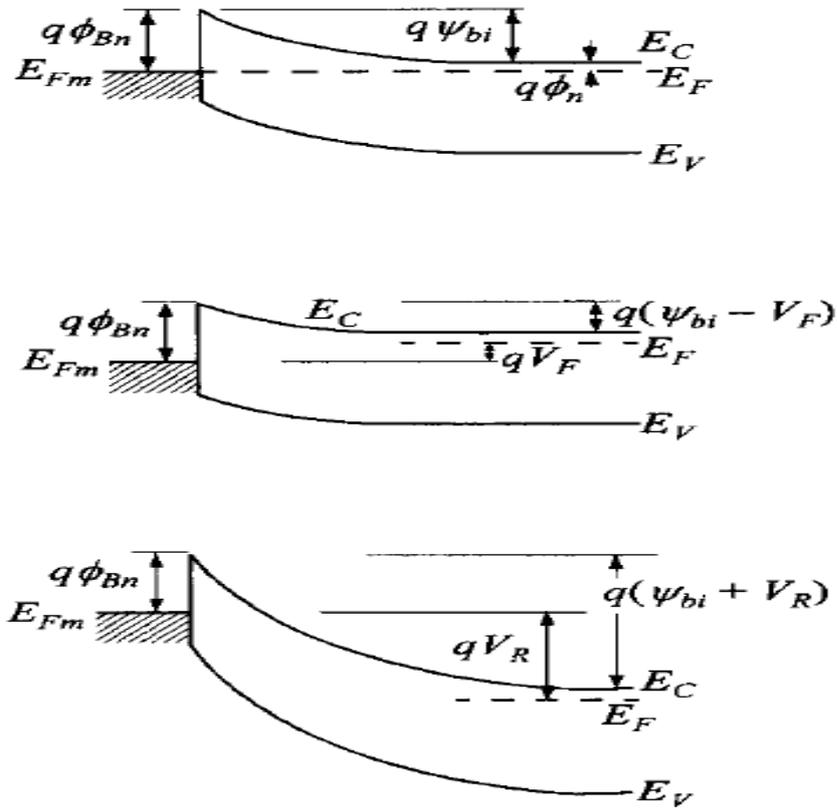


圖 3-9 不同偏壓情況下金屬/N型半導體接觸之能帶圖(熱平衡，順向偏壓，逆向偏壓)[16]。



3-2-4-2 蕭特基障礙高度的不理想效應

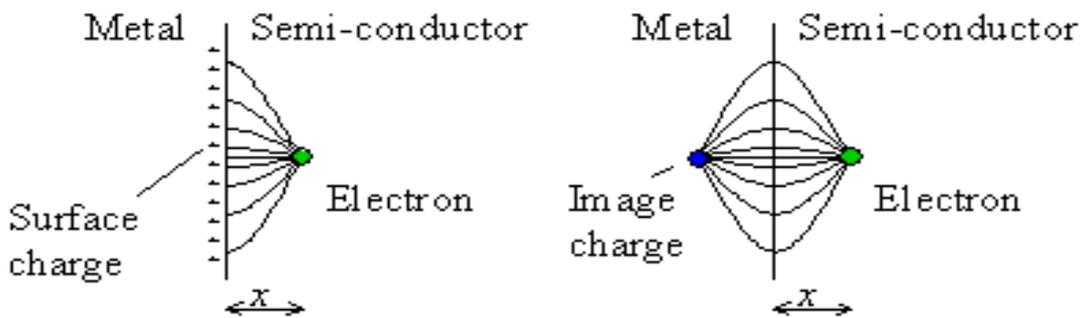


圖 3-10、在一個金屬-介電質介面處的影像電荷[19]。

在一個介電質之中，一個位於與金屬的距離為 x 處的電子將會製造一個影像電場。電場線必須與金屬表面垂直，而且會與位於金屬裡面並且金屬表面有相同距離的一個影像電荷(+ e)所產生的電場相同。這種效應顯示於圖 (3-10) 之中。當有電場出現在介電質之中，位勢將會被修正。電子的位能，包括固定電場效應，是繪於圖 (3-10)。位勢的下降是蕭特基效應(Schottky Effect)或是影像力衍生下降。

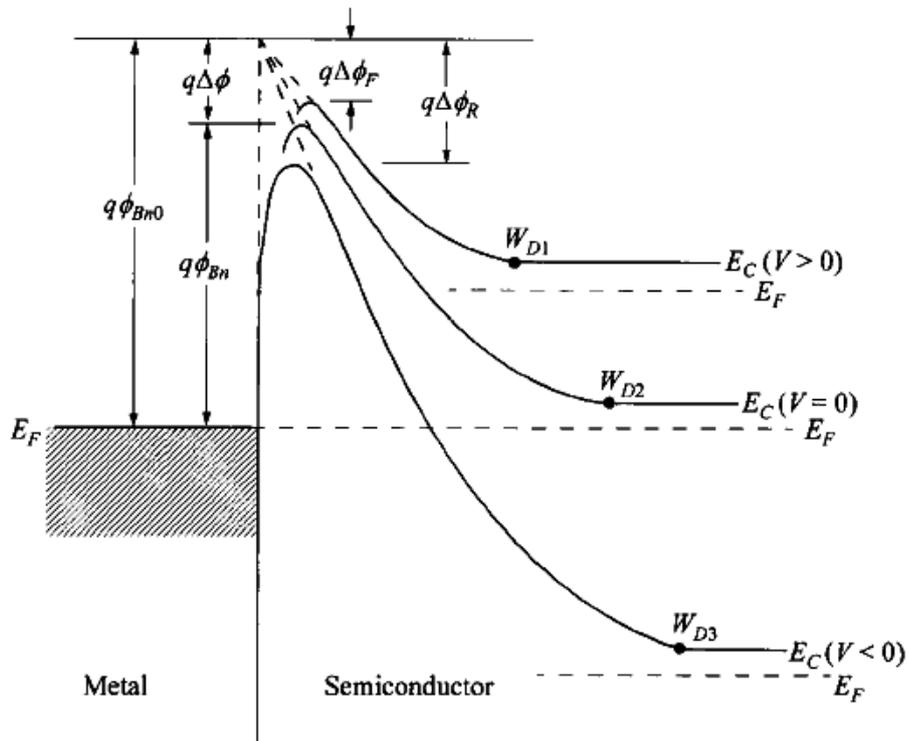


圖 3-11、具有一定電場，由於影像作用力所造成的位障勢扭曲示意圖[16]。

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\epsilon_0|E|}} \quad (\text{式 3-4})$$

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{q|E|}{4\pi\epsilon_0}} = 2|E|x_m \quad (\text{式 3-5})$$

$$q\phi_{Bn} = q\phi_{Bn0} - q\Delta\phi \quad (\text{式 3-6})$$

雖然蕭特基障礙降低看起來好像是一個小值，但是障礙高度及障礙降低是出現電流-電壓關係式的指數項中。因此，障礙高度的微小值改變對蕭特基二極體的電流有一顯著的影響。

3-2-4-3 蕭特基二極體 電流-電壓關係式

在金屬-半導體界面之中，電流的傳導主要是由多數載子所造成的，這乃是與 P-N 界面中的少數載子相反。在具有 N 型半導體的整流接觸之中的基本過程乃是電子越過位障勢的傳輸，這種過程可以以熱離子放射理論 (Thermionic Emission Theory) 來加以描述。

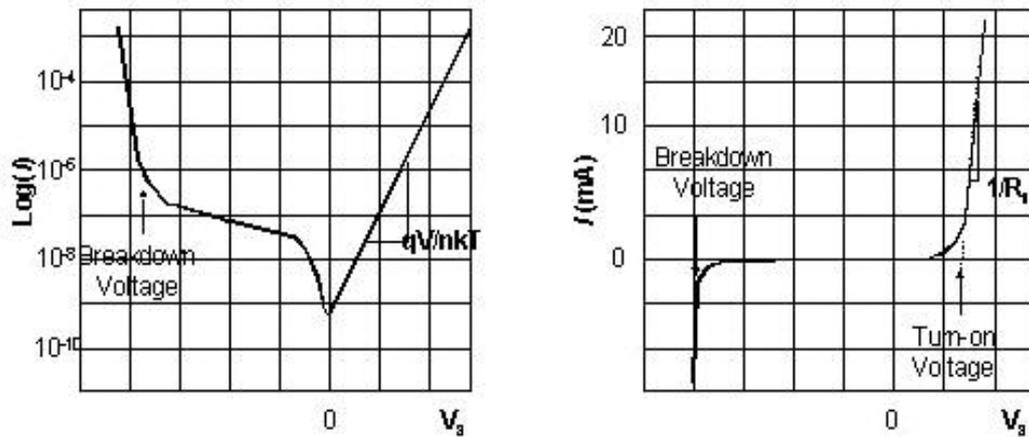


圖 3-12、蕭特基二極體電流-電壓圖[19]。

如半導體-金屬界面之電流傳輸機制來自於熱游離輻射 (Thermionic Emission)，則其電流-電壓之特性將會遵循下列方程式：

$$J = \left(A^* T^2 e^{\frac{-q\phi_B n}{nKT}} \right) \left(e^{\frac{qV}{nKT}} - 1 \right)$$

$$J_s = \left(A^* T^2 e^{\frac{-q\phi_B n}{nKT}} \right) \text{ and } A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} \quad \text{式(3-7)}$$

其中， J 為流經金屬半導體界面之電流密度， J_s 為逆向飽和電流密度，單位皆為安培/平方公尺； A^* 為李察生常數； q 為單一電子所帶的電量大小，即為

1.6×10^{-19} 庫倫； ϕ_B 為金屬半導體接面的蕭基能位障高，單位為伏特； V 為加至金屬半導體界面兩端的電壓，單位為伏特； n 為理想因子，不具單位； k 為波茲曼常數，即為 1.38×10^{-23} 焦耳/絕對溫度； T 為量測時之溫度，單位為絕對溫度。在 $qV \gg nkT$ 之條件下，式 (3-7) 式近似為：

$$J = \left(A^* T^2 e^{\frac{-q\phi_B n}{nKT}} \right) \left(e^{\frac{qV}{nKT}} \right) = A^* T^2 e^{\frac{q(V - \phi_B n)}{nKT}} \quad \text{式(3-8)}$$

穿遂障礙機制：

當半導體之中的的濃參雜度增大時，空乏區的寬度會縮小；因此，當參雜濃度增大時，穿遂通過障礙的機率就會增大。



3-3 矽奈米線場效電晶體閘極效應

3-3-1 矽奈米線濃度參雜變化影響

先計算未加閘極情況下，只有源/汲極電壓下，通道導通電流大小，作為外加閘極後的比較，觀察閘極效應，計算電導值差。

藉由參考圖(3-13)為參雜濃度和電阻率之關係圖，和式(3-9)計算出各種參雜濃度， $V_g=0$ 下通道的導通電流值，得知不同濃度下大約電流的 Order。計算出的值整理如表(3-1):

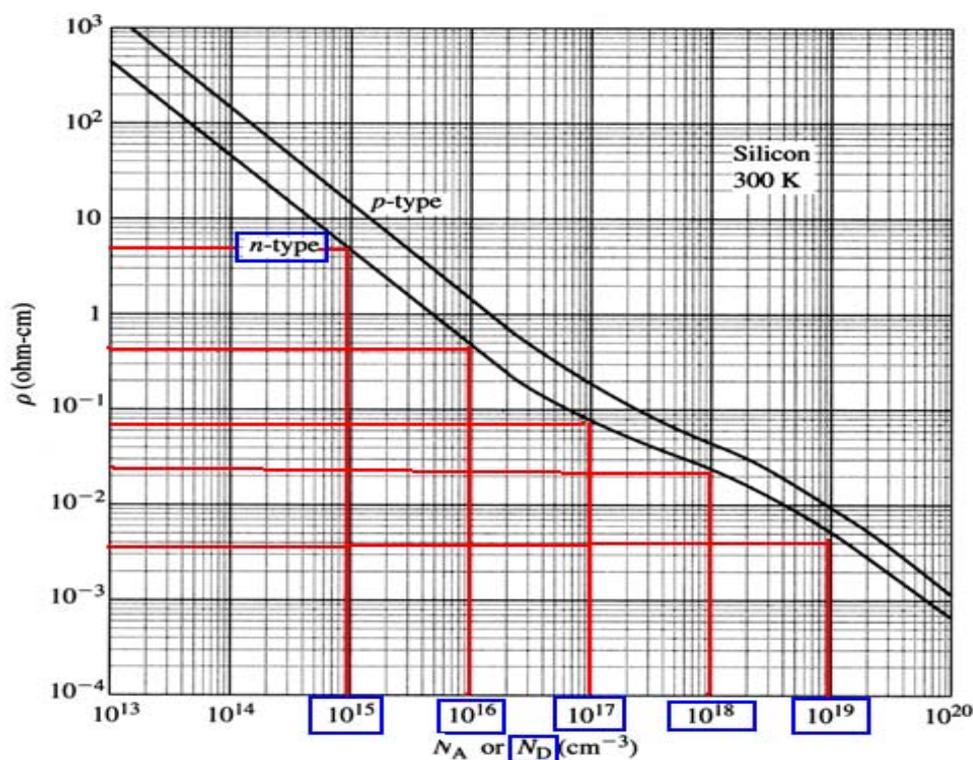


圖 3-13 參雜濃度和電阻率之關係圖[16]。

半導體的歐姆定律的公式：

$$R = \rho \frac{l}{A} \quad R = \frac{V}{I} \quad (\text{式 3-9})$$

R (Ω) 為電阻， ρ 為電阻率 ($\Omega\text{-cm}$)， l 為通道長度， $A = WH(\text{cm}^2)$ ，為通道寬度和通道高度的乘積，即為電流流過通道的截面積。 V 為源汲極的外加電壓值， I 則為此計算下得到的導通電流值。

表 3-1、無外加閘極偏壓下，不同濃度通道導通電流值。

$V_g=0(V_d=0.5V)$	
Si doping Concentration	Drain Current
$1e15(\text{cm}^{-3})$	$I_d=2.1875e-9(A)$
$1e16(\text{cm}^{-3})$	$I_d=2.3333e-8(A)$
$1e17(\text{cm}^{-3})$	$I_d=2.058823529e-7(A)$
$1e18(\text{cm}^{-3})$	$I_d=3.8888888e-7(A)$
$1e19(\text{cm}^{-3})$	$I_d=3.888888e-6(A)$

可看出在尚未加閘極電壓情況下($V_g=0$)，參雜濃度越高($1e15 \text{ cm}^{-3}:10^{-9} \text{ A}$ ， $1e16 \text{ cm}^{-3}:10^{-8} \text{ A}$ ， $1e17 \text{ cm}^{-3}:10^{-7} \text{ A}$ ， $1e18 \text{ cm}^{-3}:10^{-6} \text{ A}$ ， $1e19 \text{ cm}^{-3}:10^{-5} \text{ A}$)，電流越大，(Order 級差異)。

圖 (3-14) ~ 圖 (3-18) 為不同濃度外加不同閘極下的電流電壓圖(I_d _Vd 特性曲線圖)，(N-type 通道外加正閘極電壓，吸引更多(載子)電子，增強通道導通能力 Enhance 如外加負閘極電壓，趕走通道(載子)電子，減低通道導通能力 Depletion)。

在參雜濃度為 $1e15 \text{ cm}^{-3} \sim 1e17 \text{ cm}^{-3}$ 是為電晶體的行為，發現不同參雜濃度的通道受外加閘極影響的能力不同，利用理想電晶體特性曲線性區電流公式，式 (3-10)，又可大約計算外加不同閘極後的電流值各別為多少，發現在外加閘極電壓後，低參雜的通道電流仍可到達 10^{-6} order，不會因導通電流大小而量測到過小電流[20]。

理想電晶體特性曲線性區電流公式：

$$I_{ds} = \mu C_{ox} \frac{W}{L} (V_{gs} - V_{TH}) \quad (\text{式 3-10})$$

μ_n 為電子遷移率 ($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{S}$)，在此定為 $1450 (\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{S})$; C_{ox} 為氧化層電容值，在此定為 $6.9 \times 10^{-8} (\text{F}/\text{cm}^2)$ ， V_{TH} 值則參照下列所模擬 I_d _Vg 圖，用定電流法萃取出值。

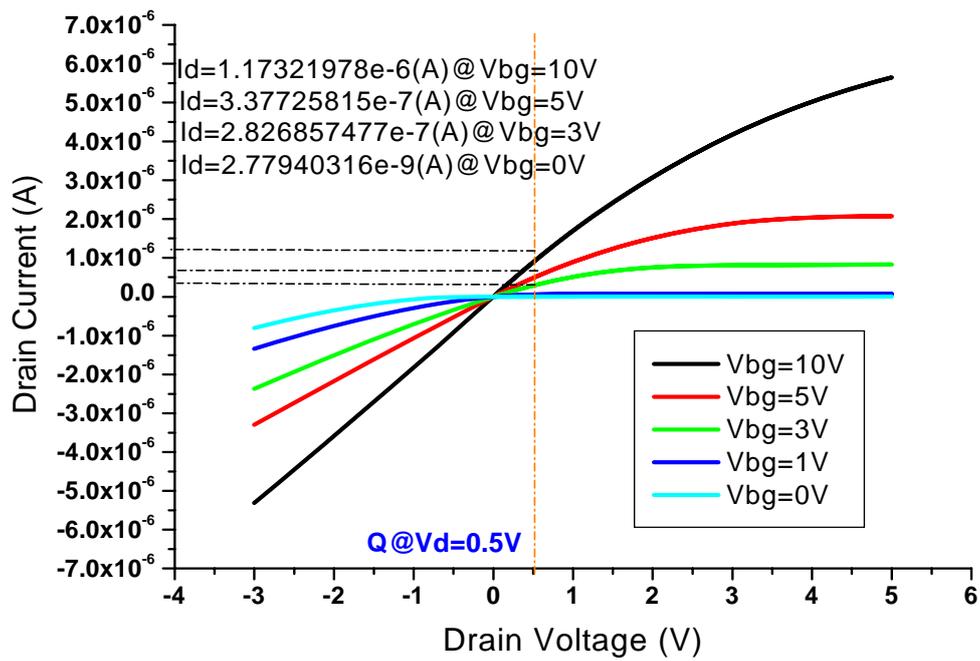


圖 3-14、通道參雜濃度為 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d _Vd 之特性曲線圖。

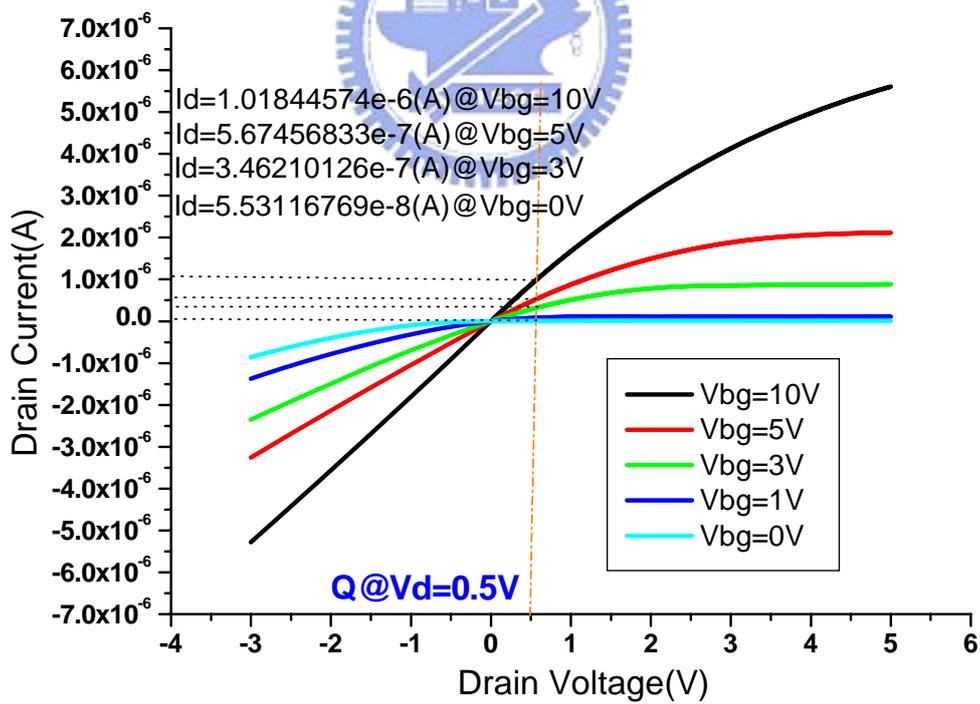


圖 3-15、通道參雜濃度為 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d _Vd 之特性曲線圖。

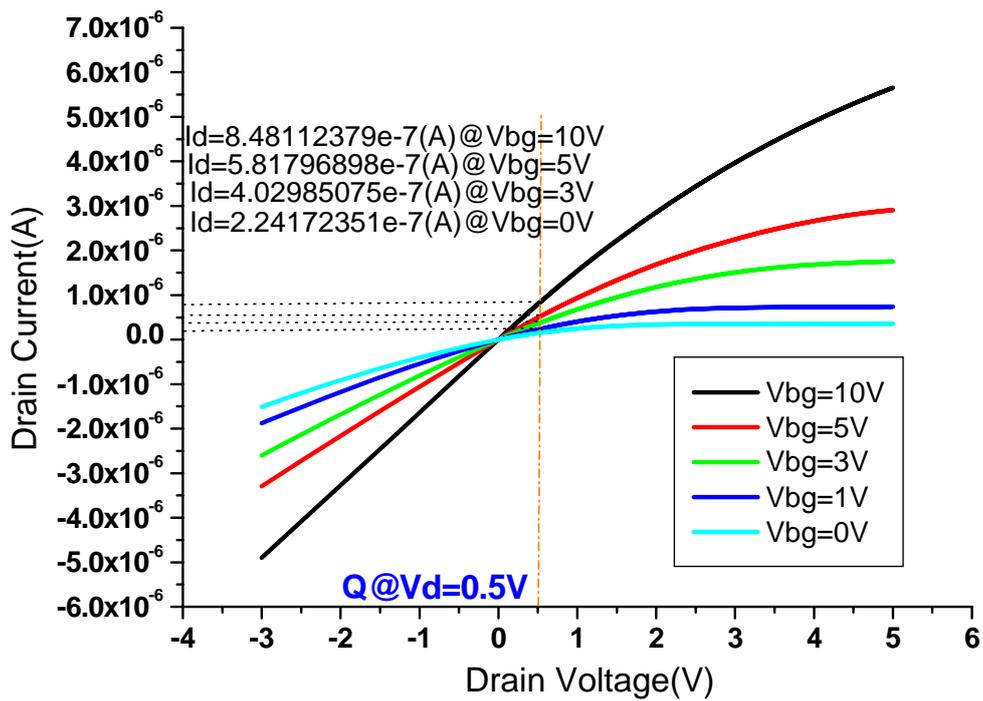


圖 3-16、通道參雜濃度為 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d _Vd 之特性特性曲線圖。

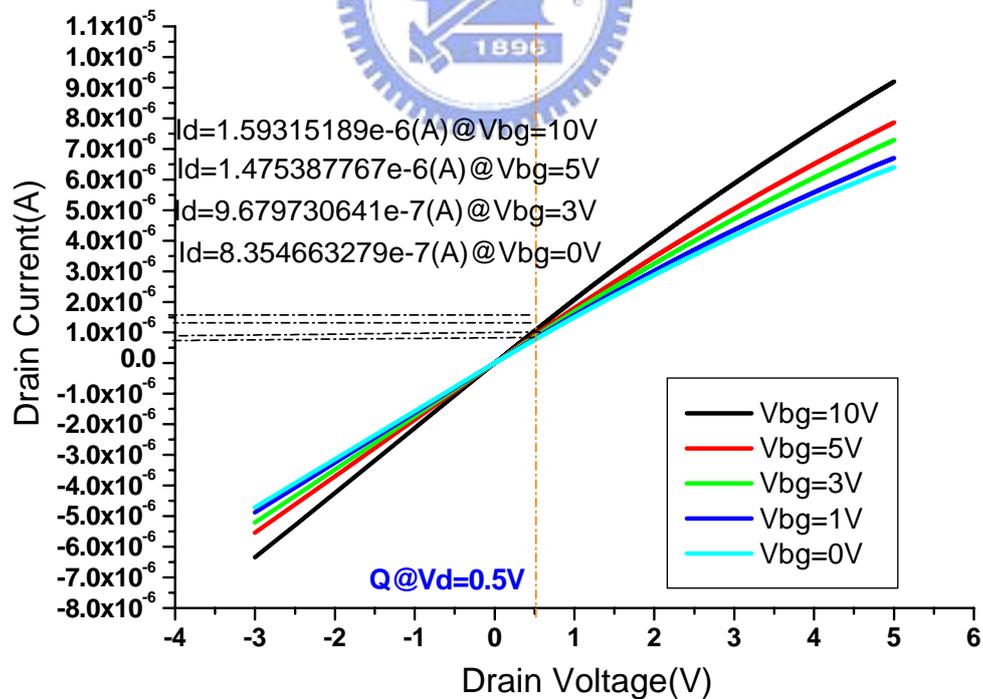


圖 3-17、通道參雜濃度為 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d _Vd 之特性曲線圖。

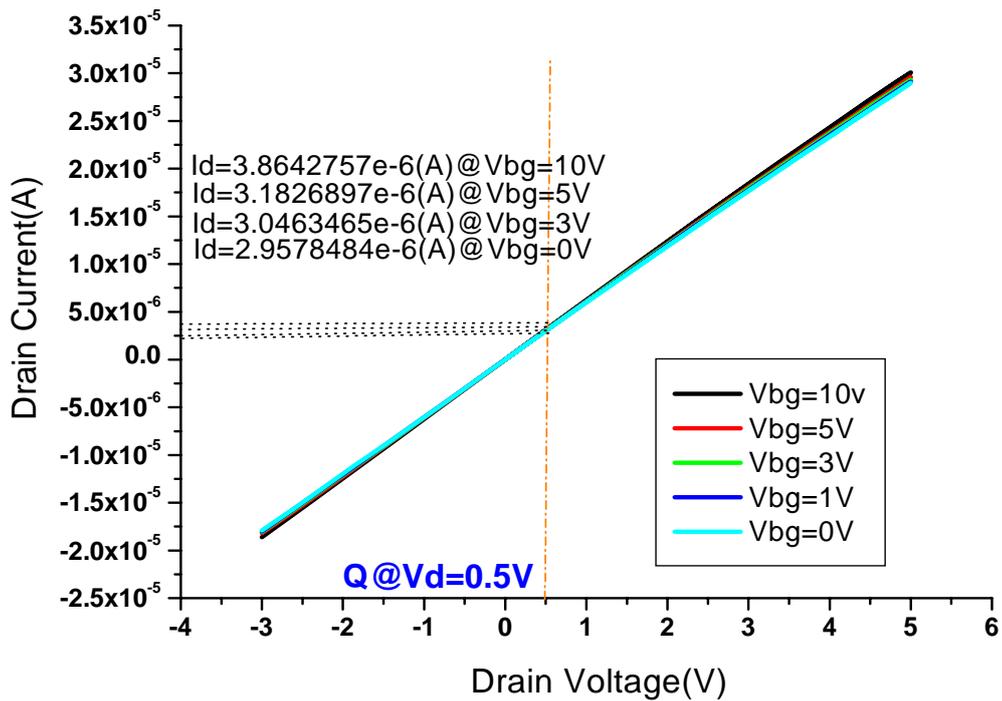


圖 3-18、通道參雜濃度為 $1e19 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d - V_d 之特性曲線圖。

在閘極效應應用之通道參雜濃度越低，受外加不同閘極電壓效應下更顯著，即電導改變量(ΔG)大。通道結構是 $N^+ - N - N^+$ ，通道參雜濃度 $1e15 \text{ cm}^{-3} \sim 1e17 \text{ cm}^{-3}$ 下為電晶體行為(濃度越低電晶體行為越典型，放大效應更明顯:有線性區，飽合區)受外加閘極的調變下開關，即場效電晶體之行為;通道參雜在 $1e18 \text{ cm}^{-3} \sim 1e19 \text{ cm}^{-3}$ 下即為電阻行為，外加 Drain 電壓下通道就已成導通狀態，不需靠閘極來控制，相對於外加閘極調變之下，顯現出效果極小，通道一旦導通，極難用負向大閘極去關掉已導通之電阻。

低參雜到高參雜就是指是參雜物(Dopants)數量多寡，Dopants 數量多寡外加載子本身濃度，會影響通道電性強弱($N=N_D+n$)N 越大，電流越大，Dopants 數量多，閘極越難 Enhance 或 Depletion。

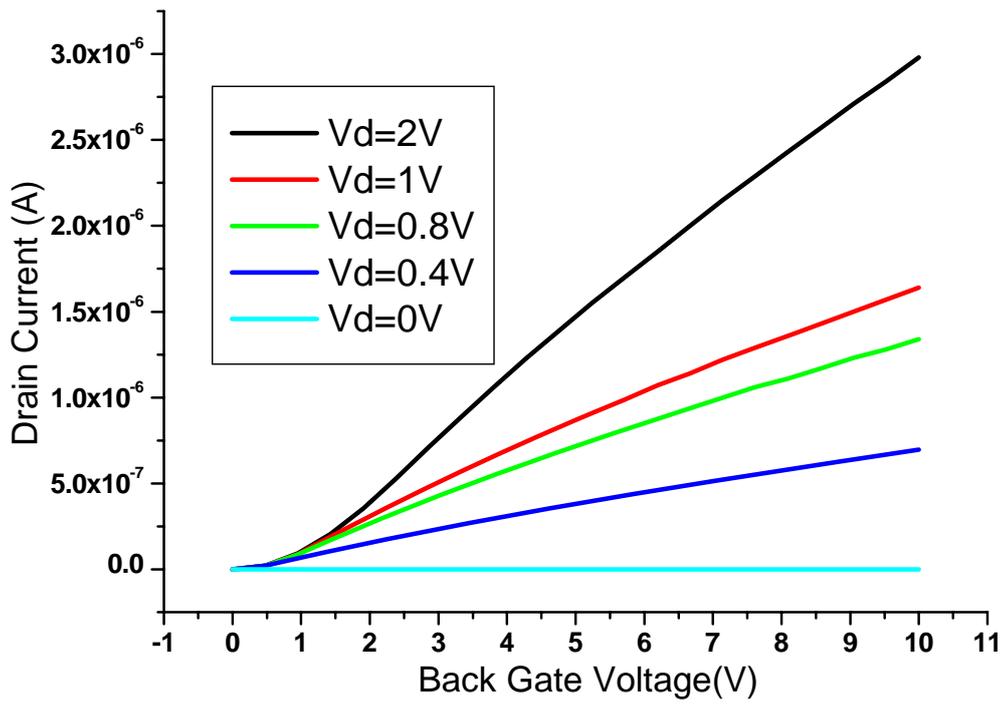


圖 3-19、通道參雜濃度為 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d - V_g 之轉移曲線。

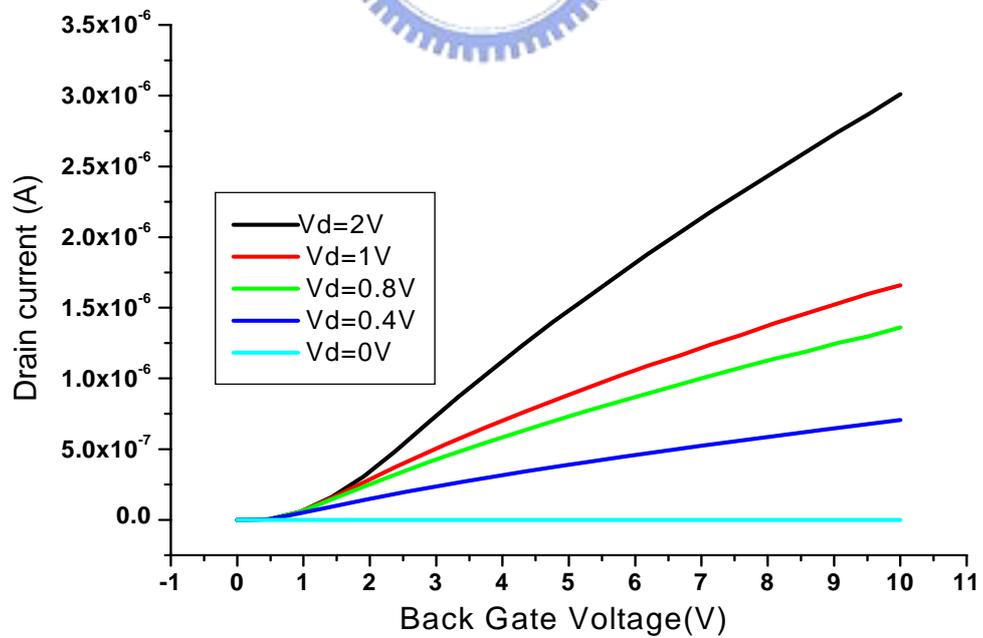


圖 3-20、通道參雜濃度為 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d - V_g 之轉移曲線圖。

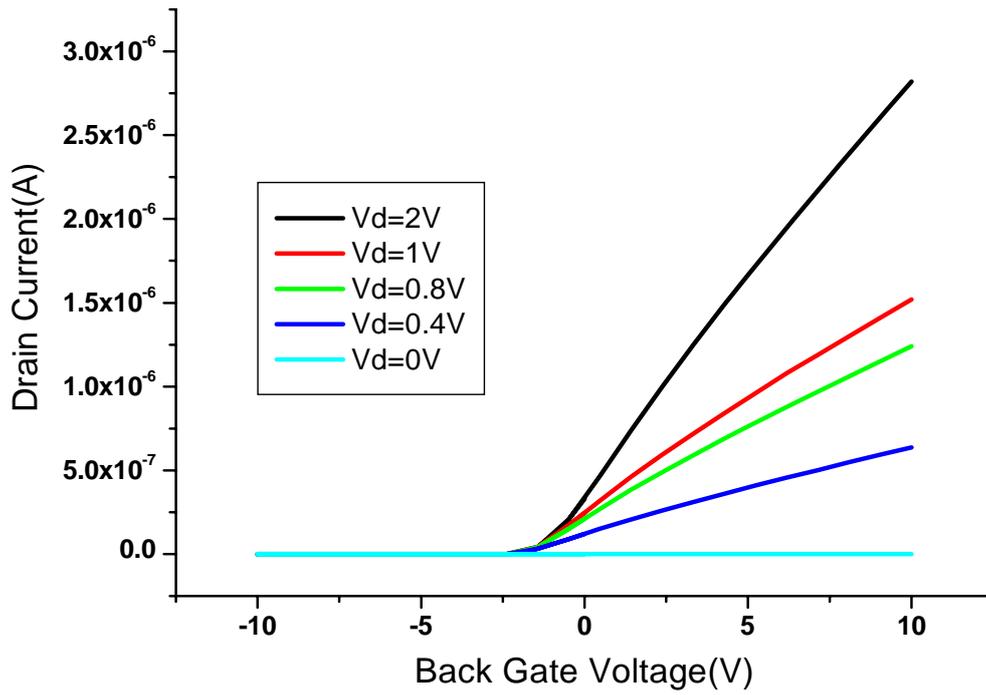


圖 3-21、通道參雜濃度為 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d - V_g 之轉移曲線圖。

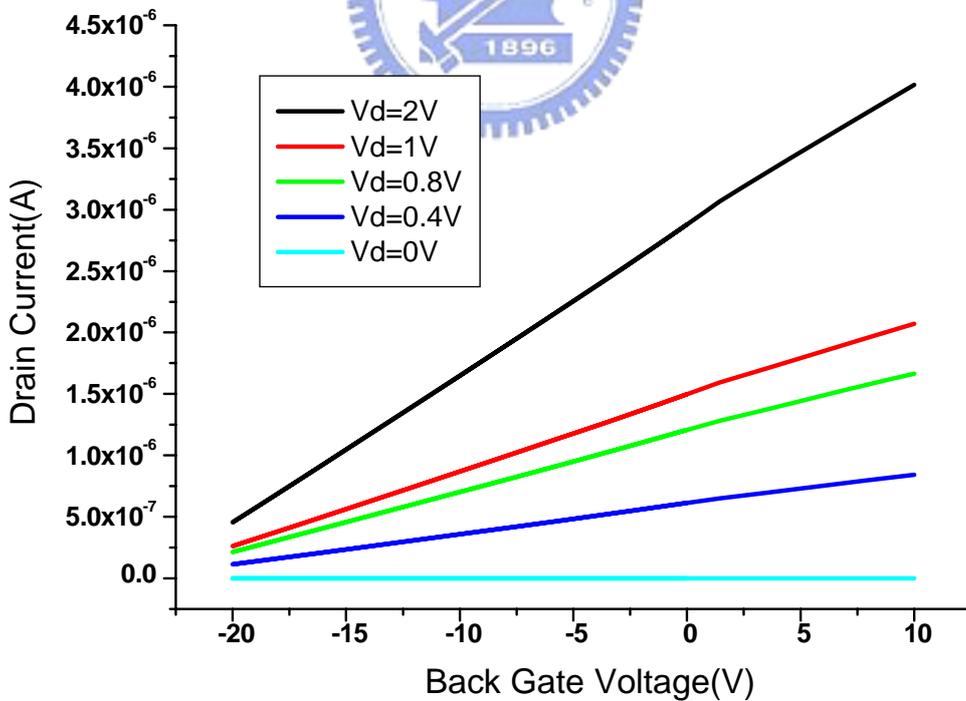


圖 3-22、通道參雜濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d - V_g 之轉移曲

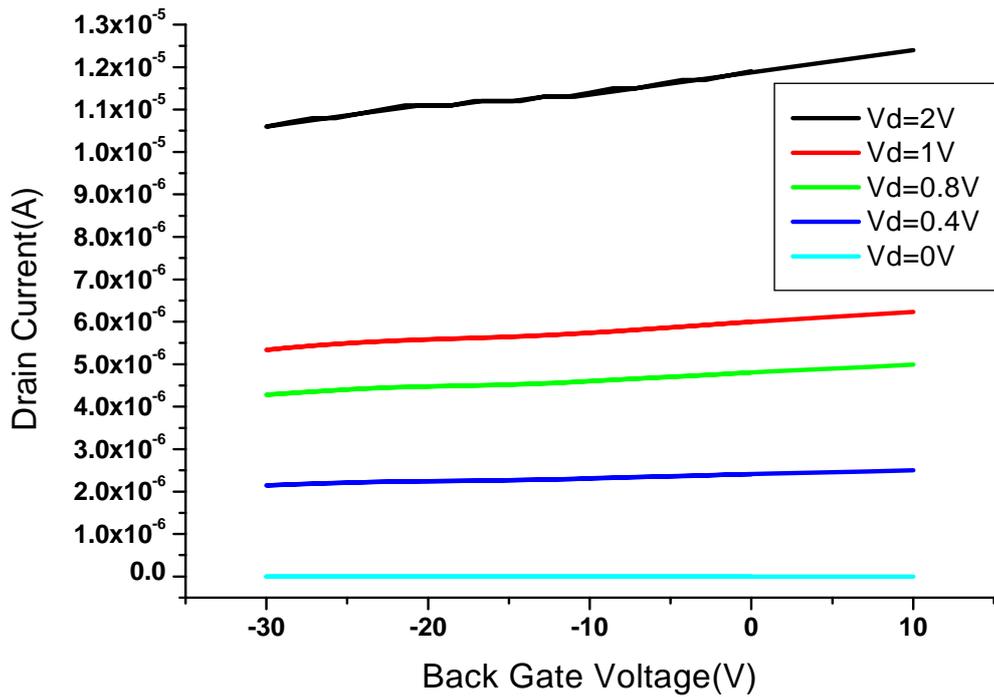


圖 3-23、通道參雜濃度為 $1e19 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d V_g 之轉移曲線圖。

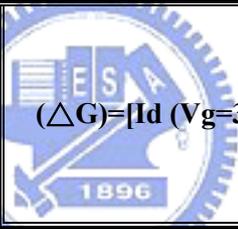
表 3-2、不同通道參雜濃度下的電晶體的臨界電壓值。

Si doping concentration	V_{TH}
$1e15 \text{ cm}^{-3}$	0.43681822 V
$1e16 \text{ cm}^{-3}$	0.25225818 V
$1e17 \text{ cm}^{-3}$	-2.50234 V
$1e18 \text{ cm}^{-3}$	Large negative value
$1e19 \text{ cm}^{-3}$	Very large negative value

表(3-2)，為不同參雜通道參雜濃度下的電晶體的臨界電壓值整理，從表中可觀察到，當通道參雜濃度為 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 時，和矽基板(Substrate)的參雜濃度相當，此時整個元件可視為增強型電晶體， V_{TH} 為 0.437 V 左右；當通道參雜濃度為 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 時，由於比 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 時的濃度稍高，通道裡存在的載子數量比 $1e15 \text{ cm}^{-3}$

稍多，因此需要的臨界導通電壓值(V_{TH})可以稍微小一些，大約在 0.252 V 左右；通道參雜濃度為 $1e15 \text{ cm}^{-3} \sim 1e16 \text{ cm}^{-3}$ ，都是很輕微的參雜(Lightly Doped)，對整個電晶體而言，皆可視為增強型電晶體；當通道參雜濃度為 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ ，電晶體製作完成時，已做好一條參雜 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 的通道，此時電晶體為空乏型電晶體[21]，在外加閘極電壓前已有導通能力，所以用負的臨界電壓即可將此型電晶體開啟，意味著要開關此型電晶體的電晶體電壓值為負的值，在此 V_{TH} 值萃取出來為 -2.50234 V；通道參雜濃度為 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ ，通道的導通能力更好，此時通道為 $N^{++}-N^+-N^{++}$ 的情形，已儼然是條電阻，臨界電壓值為更大負的數值，難以做開關動作；通道參雜濃度為 $1e19 \text{ cm}^{-3}$ ，呈現電阻狀況就比 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 還強烈，臨界電壓值是非常大的負的數值[22]。

表 3-3、不同通道參雜濃度所對應閘極效應程度(電導值變化量 ΔG) 圖。

Si doping concentration	 ΔG $(\Delta G)=[I_d(V_g=3V)-I_d(V_g=0V)]/[I_d(V_g=0V)]$ ($V_d=0.5$)
1e15 cm ⁻³	87.7590375
1e16 cm ⁻³	27.2970822
1e17 cm ⁻³	2.217647058
1e18 cm ⁻³	0.28778229
1e19 cm ⁻³	0.0647780604

表(3-3)整理出不同通道參雜濃度所對應閘極效應程度(電導值變化量 ΔG)。在此計算時，先將 V_D 定在 0.5 V，選取外加閘極為 3 V 時($V_{bg}=3 \text{ V}$)和不加閘極($V_{bg}=0 \text{ V}$)時去計算電導值變化量，可看出趨勢為：通道參雜濃度越低， ΔG 變化越大，閘極效應越明顯，也透露出一項訊息，之後應用在帶電分子偵測上，越低的通道參雜濃度去感應帶電生物分子的電性變化量越靈敏，只要少許的生物分子量即可量測出電性變化。

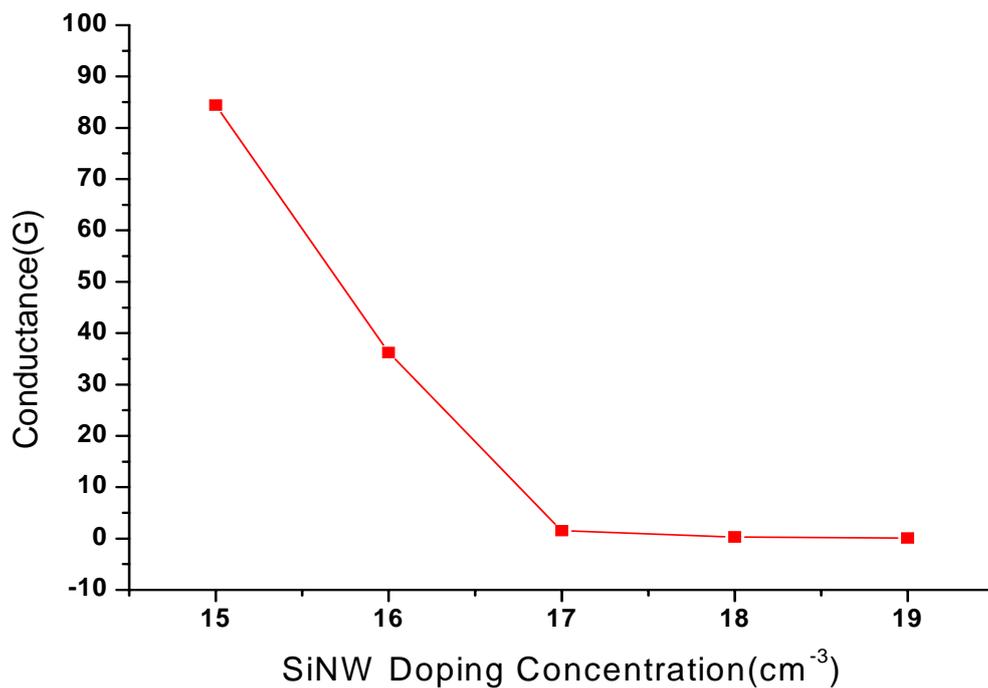


圖 3-24、不同通道參雜濃度和電導值改變量(ΔG)的關係圖。

圖 (3-24) 為表(3-3)做出的趨勢圖，更加明顯示， ΔG 隨著通道參雜濃度的降低而變大[23]。

3-3-2 矽奈米線通道長度與寬度變化影響

在此矽奈米線場效電晶體元件結構下，我們討論的變因除了上節的通道濃度變化情形，在本節要討論矽奈米線通道長度和寬度變化對電導值的影響。在本組實驗討論多組不同通道長度(1 μm 、2 μm 、5 μm 、10 μm)和不同寬度(50 nm、75 nm、100 nm、125 nm、150 nm)。先討論通道長度此項變因，在前面”最佳化”過程以解釋過原因，此時先固定通道寬度為 100 nm 進行去探討，用上節同用方式計算電導值改變量 ΔG ，作出下列趨勢圖：

再利用式(3-10)來解釋:

$$I_{ds} = \mu C_{ox} \frac{W}{L} (V_{gs} - V_{TH})$$

在此定 $W=100 \text{ nm}$ ，若以通道 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 為例， V_{TH} 也是已知(從上節討論得到)，看 $V_{bg}=0 \text{ V}$ 和 $V_{bg}=3 \text{ V}$ 時的變化:

可看出 $L \downarrow \rightarrow I_{ds}(V_{bg}=3) \uparrow \rightarrow \Delta G \uparrow$ 。

可得到通道長度越短，導電值改變越大[23]。

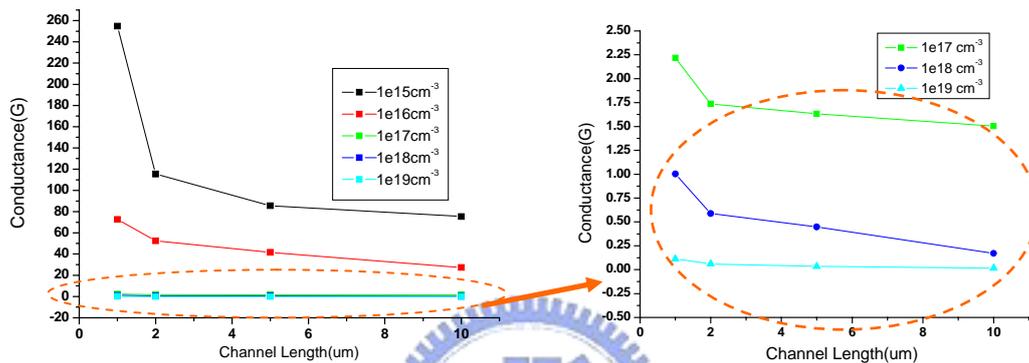


圖3-25、不同通道長度對 ΔG 的變化趨勢圖。

在此定 $L=1 \mu\text{m}$ ， $W \times H=A$ (截面積)越小， H 固定為 35 nm ， $A \downarrow \rightarrow W \downarrow$ ，利用矽奈米線的 High Surface-to-Volume Ratio (高表面積/體積比) 來看，可間接得知 $W \downarrow \rightarrow \Delta G \uparrow$ 。

可得到通道寬度越短，導電值改變越大[21]。

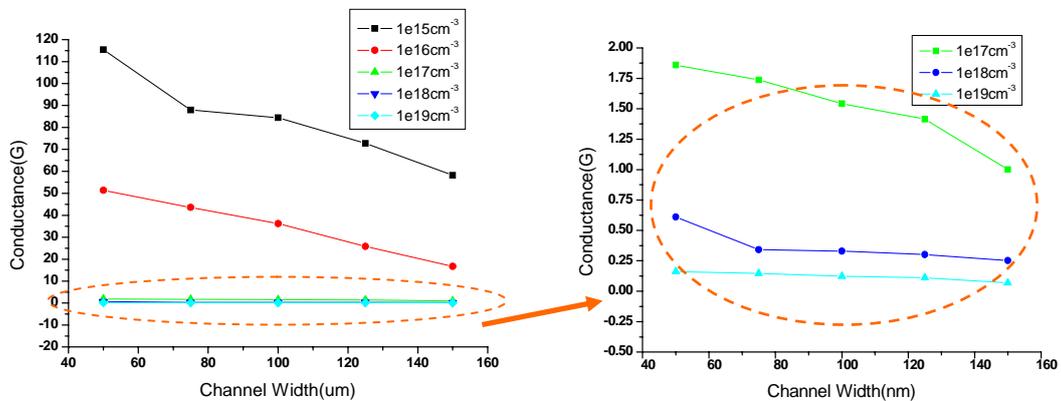


圖3-26、不同通道寬度對 ΔG 的變化趨勢圖。

3-4 蕭特基奈米線閘極效應

3-4-1 蕭特基奈米線濃度參雜變化影響

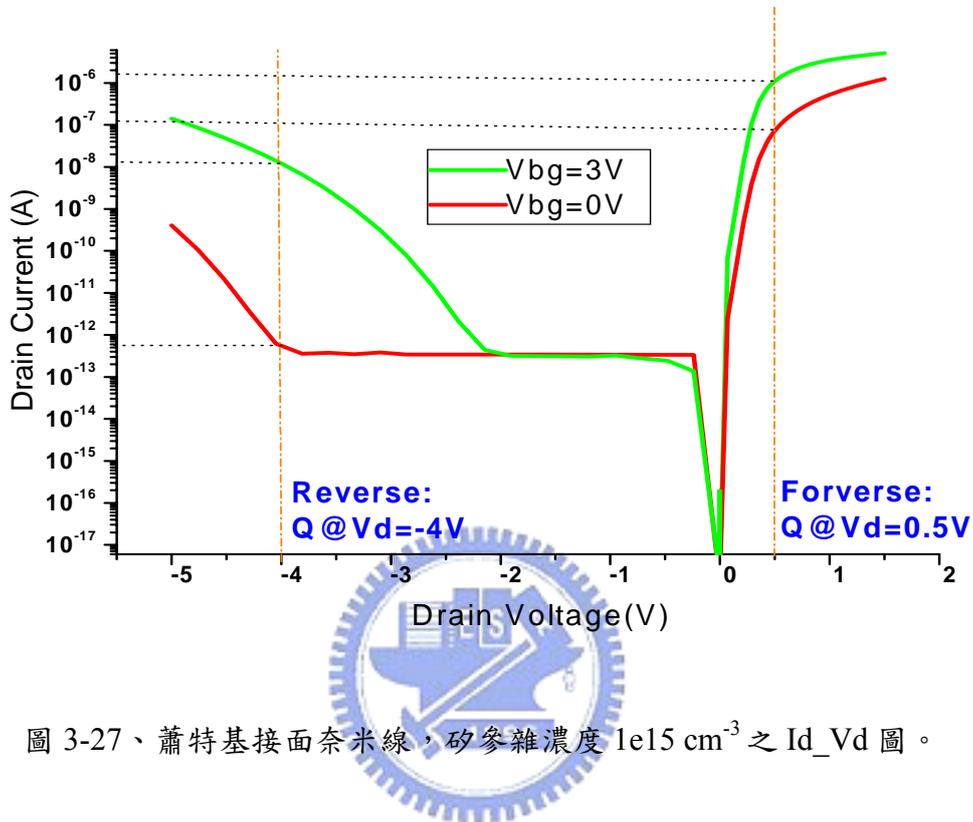


圖 3-27、蕭特基界面奈米線，矽參雜濃度 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d - V_d 圖。

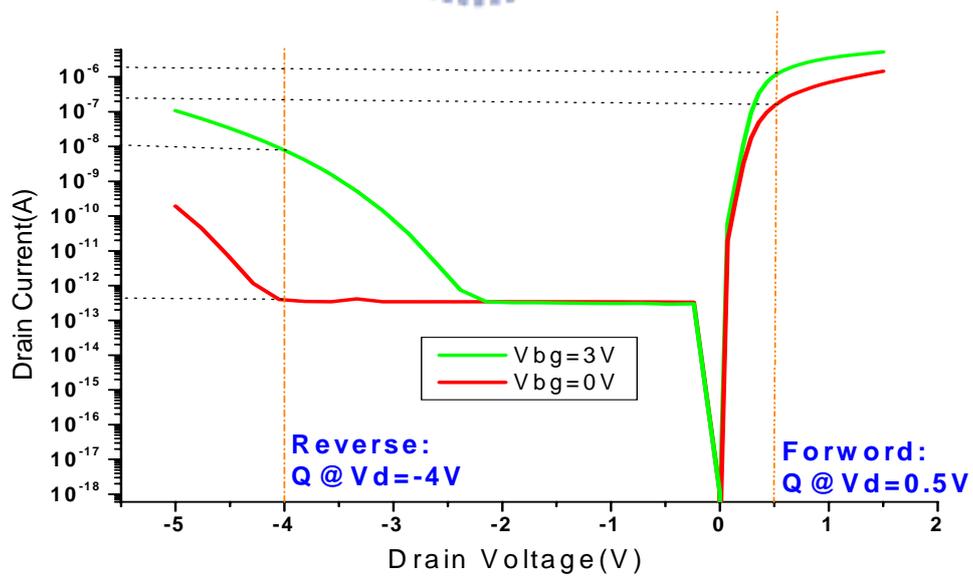


圖 3-28、蕭特基界面奈米線，矽參雜濃度 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d - V_d 圖。

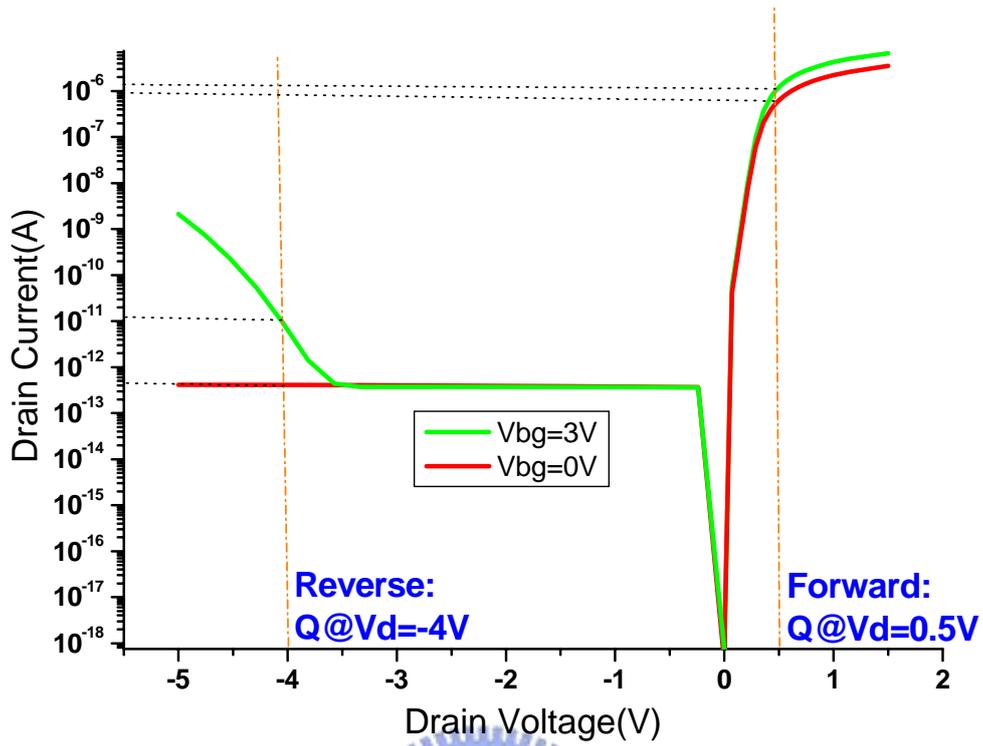


圖 3-29、蕭特基接面奈米線，矽參雜濃度 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d _Vd 圖。

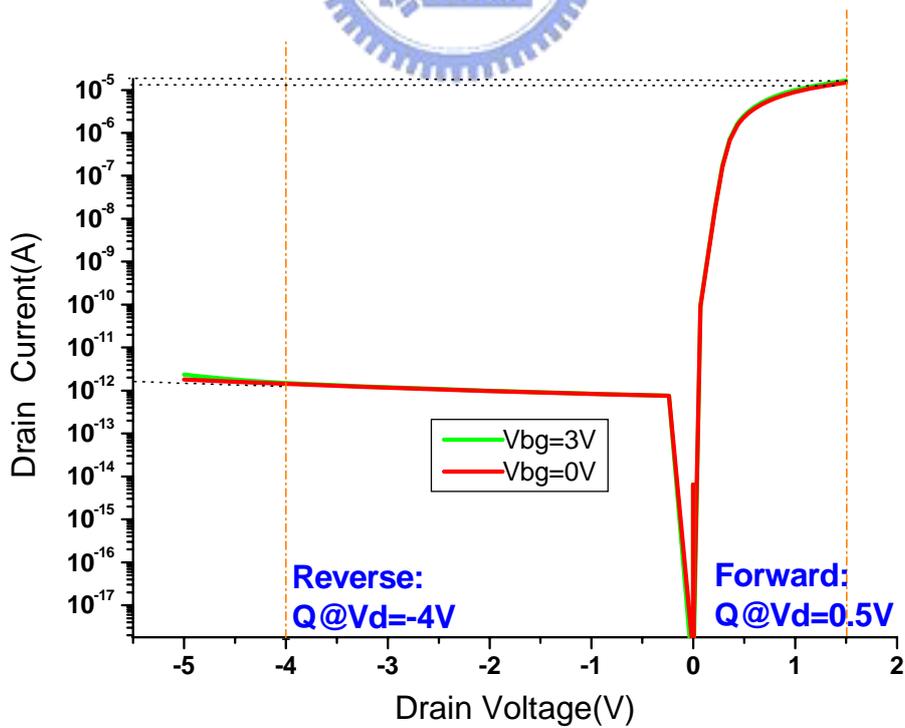


圖 3-30、蕭特基接面奈米線，矽參雜濃度 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d _Vd 圖。

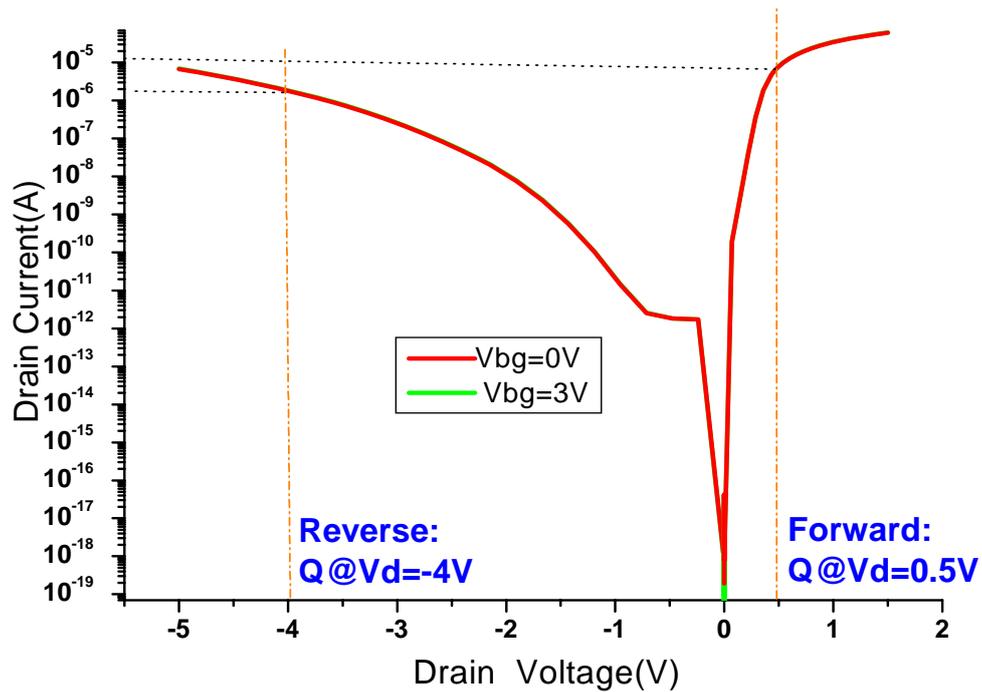


圖 3-31、蕭特基接面奈米線，矽參雜濃度 $1e19 \text{ cm}^{-3}$ 之 I_d _ V_d 圖。

表 3-4、蕭特基接面奈米線在順向偏壓和逆向偏壓之電導改電量之比較。

	Reverse Bias	Forward Bias
	Q @ $V_d=4V$ $V_{bg}=3V$	Q @ $V_d=0.5V$ $V_{bg}=3V$
Si doping concentration: $1e15(\text{cm}^{-3})$	23512.52775	15.15294473
Si doping concentration: $1e16(\text{cm}^{-3})$	21169.17031	7.258214554
Si doping concentration: $1e17(\text{cm}^{-3})$	19.88223431	0.394990533
Si doping concentration: $1e18(\text{cm}^{-3})$	3.90447	0.201748909
Si doping concentration: $1e19(\text{cm}^{-3})$	0.1038	0.091553605

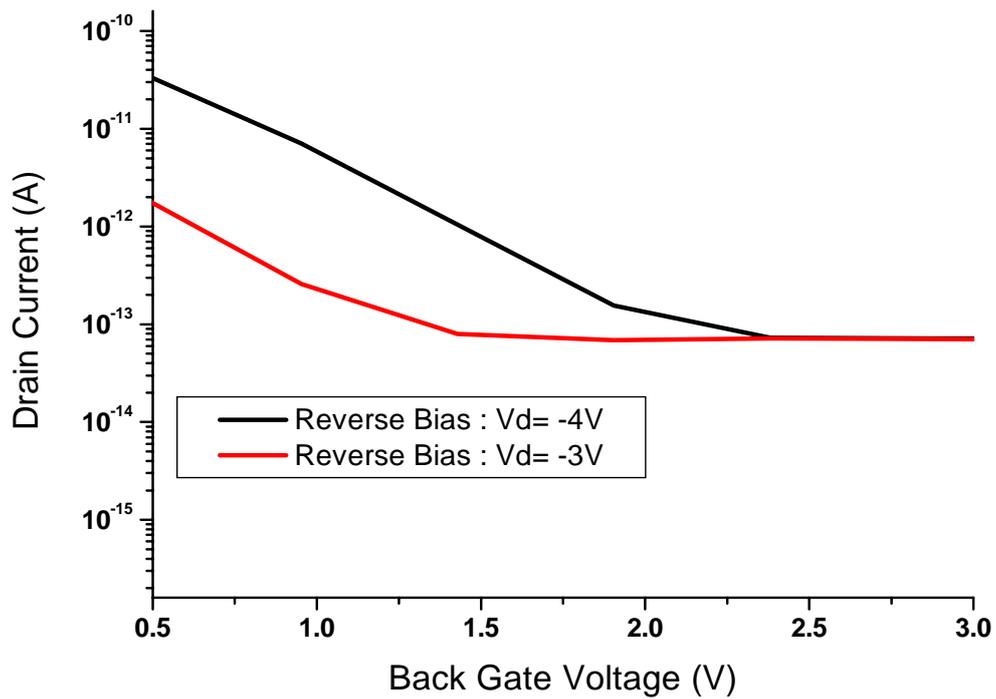


圖 3-32、蕭特基接面奈米線操作在逆向偏壓下之 I_d - V_g 圖

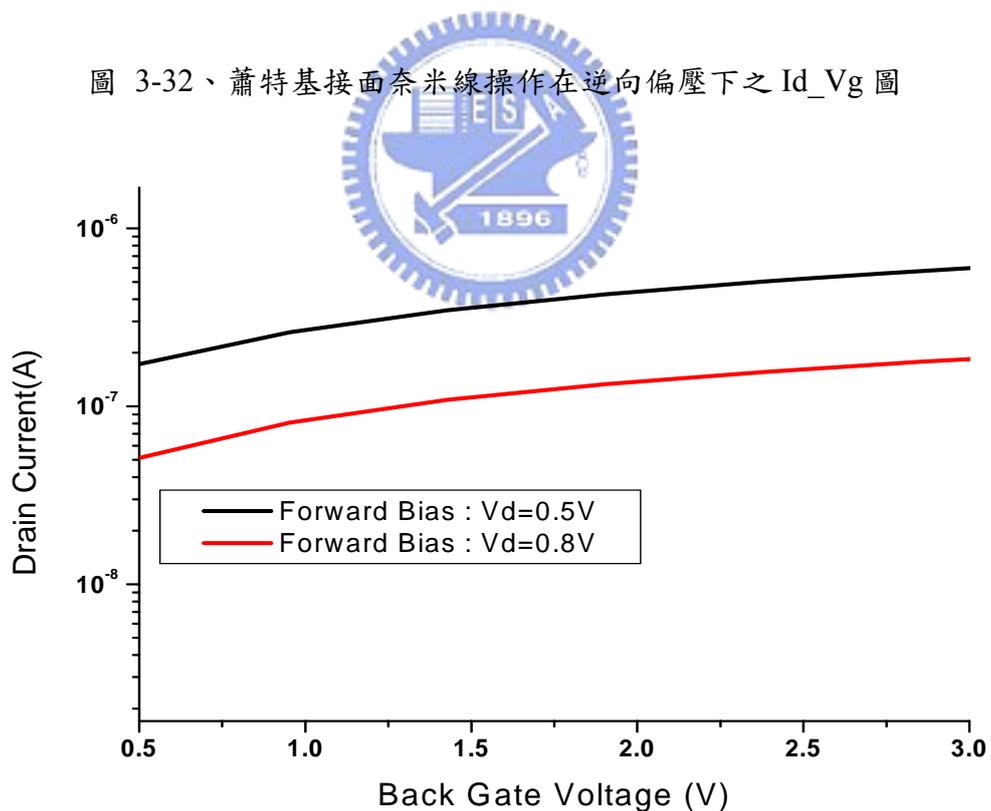


圖 3-33、蕭特基接面奈米線操作在順向偏壓下之 I_d - V_g 圖。

由圖(3-27)~圖(3-31)，我們探討不同蕭特基接面奈米線，矽奈米線的參雜濃度來觀察對閘極效應的影響[24]。我們成功地模擬出蕭特基接面的電流電壓特性：

在順向偏壓下導通電壓(Turn-on voltage)約為0.3 V左右，我們在順向偏壓取0.5 V為工作點(就是比較電導值變化的Vd基準點);在逆向崩潰電壓大約在-5 V，我們工作點取在-4 V(還未達崩潰的範圍內的一基準點)，因為逆偏的Turn-on voltage在不同外加閘極偏壓下約在-3 V左右之範圍內，又觀察到必須超過-3 V之後，又觀察不同閘極偏壓下的電導值變化劇烈是超過-3 V之後，所以折衷選取工作點在-3 V之後，但又在崩潰電壓-5 V之間的-4 V為工作點，可觀測到並計算出相當大的電導值改變量。

所以這組實驗得到2個結論:

- 1.如同矽奈米線場效電晶體一樣，在低濃度的矽奈米線參雜下，外加閘極電壓後，可得到電導值改變量較大的結果，在順偏和逆偏亦是同樣趨勢。
- 2.在逆偏操作下的外加不同閘極電壓，電導值改變量比順偏的條件下操作顯著許多。

由圖(3-32)和圖(3-33)可觀察電流取對數後，各外加不同逆偏值和順偏值，逆偏值隨閘極電壓變化較大(從斜率得知)，又可進一步驗證蕭特基二極體逆向偏壓電流之閘極效應較順向偏壓電流明顯[25]。

3-4-2、蕭特基能帶圖解釋電流機制

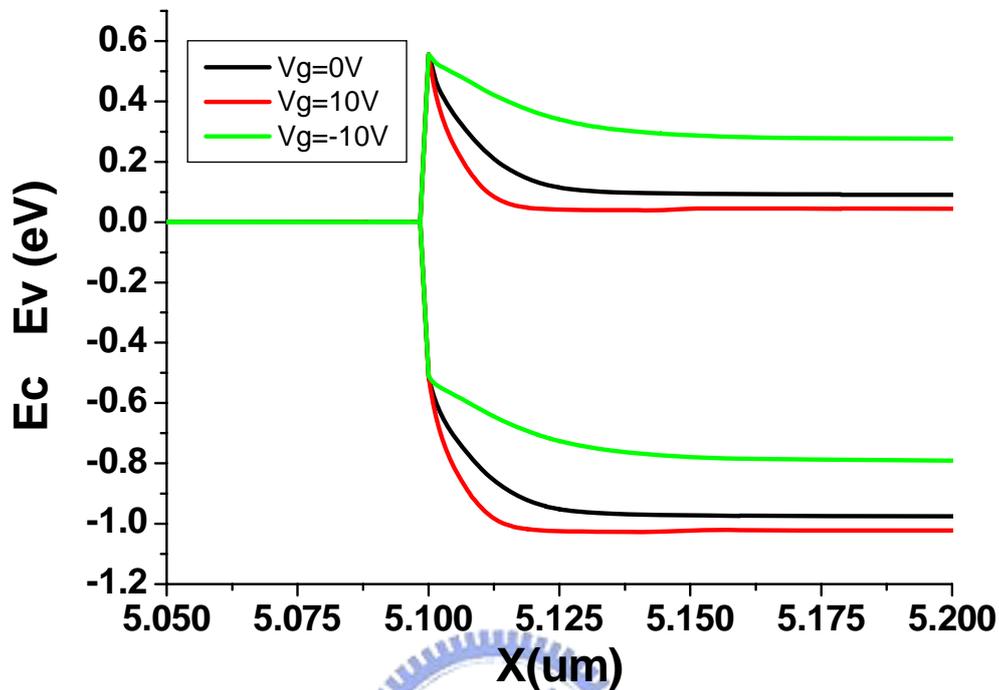


圖 3-34、蕭特基接面奈米線在不同外加閘極下的能帶圖。

圖(3-34)為蕭特基接面奈米線在不同外加閘極下的能帶圖，矽奈米線部分參雜 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ ，本文從 $1e15 \text{ cm}^{-3} \sim 1e19 \text{ cm}^{-3}$ 皆有討論，其萃取的蕭特基能位障高度(Barrier Height)隨不同閘極偏壓下而改變的變化值和空乏區寬度在表(3-5)皆有整理和列出，並套用理論公式計算，來比對模擬的精準度，在此先用蕭特基理想的模型(Barrier Tunneling Model)先來觀察趨勢，至於選用 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 是較為方便觀察的一組圖形， $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 和 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 隨不同閘極的能帶變化太過劇烈， $1e19 \text{ cm}^{-3}$ 的閘極效應很不明顯，折衷取 $1e18 \text{ cm}^{-3}$ 來討論。

由圖(3-34)可觀看到能帶圖在不同閘極偏壓變化下有兩項重點：

1. $V_g > 0 \text{ V}$ ($V_g = 10 \text{ V}$ ，在圖 3-33 中紅線部份)下， E_c 和 E_v 同時往下拉，使得空乏區的寬度變窄，增加的電流穿遂機制發生的比例[26]，內建電位(V_{bi})因此變大，也驗證熱游離發射電流發生機率變小。

2. $V_g < 0V$ ($V_g = -10V$ ，在圖 3-33 中綠線部份)下， E_c 和 E_v 同時往上拉，使得空乏區的寬度變寬，降低了電流穿遂機制發生的比例，內建電位(V_{bi})因此變大，也驗證熱游離發射電流發生機率變大。

表 3-5、蕭特基界面奈米線各參雜濃度下於各不同閘極外加偏壓下的能位障勢的改變值和空乏區的寬度值。(表中黑體字為模擬值，藍體字為理論計值)。

SiNW Doping Concentration	N-type 1e15 cm-3	N-type 1e16 cm-3	N-type 1e17 cm-3	N-type 1e18 cm-3	N-type 1e19 cm-3
$V_g = 0V$					
Barrier Height	0.5774(eV)	0.5772(eV)	0.5745(eV)	0.5565(eV)	0.5358(eV)
	0.6eV				
Depletion Width	840(nm)	273.84(nm)	125.55(nm)	27.3(nm)	13.5(nm)
	827.569nm	261.7003nm	114.7632nm	26.170nm	8.275nm
$V_g = 10V$					
Barrier Height	0.5773(eV)	0.5771(eV)	0.5744(eV)	0.5562(eV)	0.5359(eV)
Depletion Width	50.78(nm)	37.7(nm)	52.8 (nm)	14.5(nm)	12.5(nm)
$V_g = -10V$					
Barrier Height	0.5395(eV)	0.5425(eV)	0.5743(eV)	0.5566(eV)	0.5360(eV)
Depletion Width	52.6(nm)	40.61(nm)	53.7 (nm)	52.4(nm)	16.5(nm)

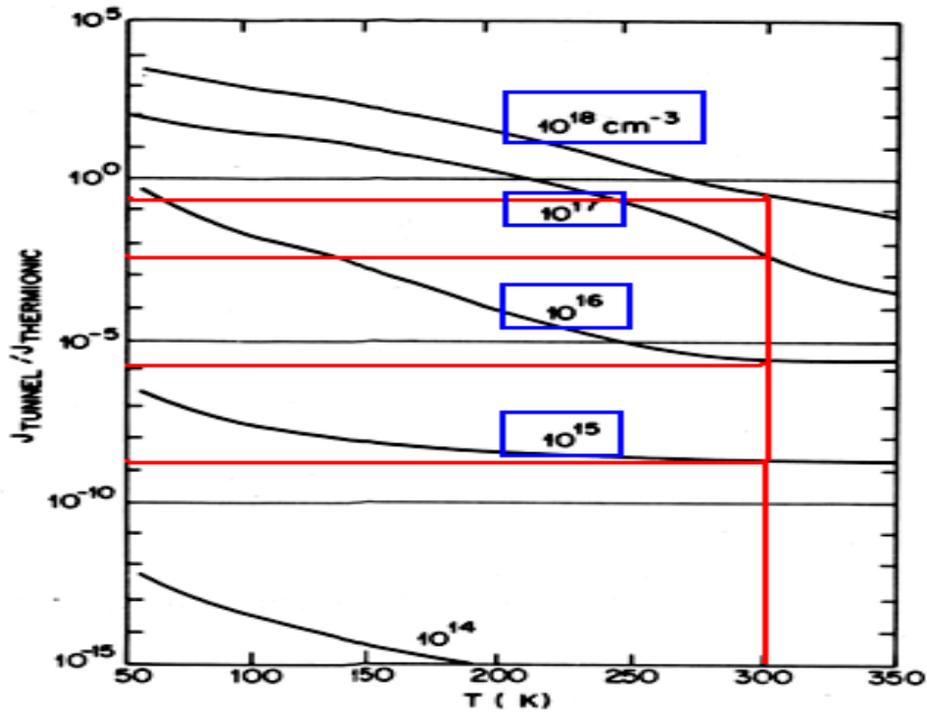


圖 3-35、蕭特基能位障穿隧電流/熱游離輻射之電流比值[16]。

圖(3-35)在說明隨不同蕭特基二極體的矽部份的參雜濃度改變，不同電流產生機制的比例也不同：在低濃度參雜下主要是由熱游離輻射機制主導電流產生，在高濃度參雜下主要是由穿隧電流來主導電流的產生[27]。

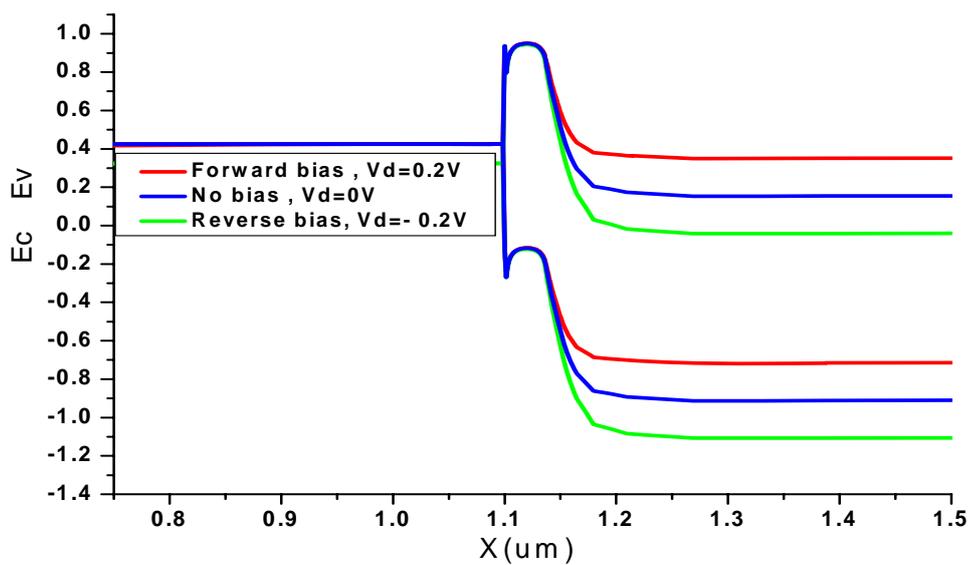


圖 3-36、固定電場下蕭特基能位障下降不理想效應模擬圖。

圖(3-36)是蕭特基二極體的不理想效應，是在固定電場下，由影像電荷所造成的蕭特基能位障下降，此現象為蕭特基二極體實際會發生的狀況，吾人成功在蕭特基二極體的 Barrier Lowering Model 下，在理論的範圍下做合理的調動(在離蕭特基界面處 X_m 的距離下加入影像電荷之效應，依照理論計算後選取適當的外加電場)，成功看到實際 Barrier Lowering 的效應(除了能位障勢的降低，還有圖形拉動後的曲線呈現)。此模擬的矽參雜濃度也為 $1e18\text{ cm}^{-3}$ ，從表(3-5)可得到在 Barrier Tunneling Model 下，Barrier Height 值約為 0.556 eV 左右，在 Barrier Lowering Model 下的 Barrier height 約為 0.524 eV ，大約降低了 0.032 eV 左右，下降值也若在計算的合理範圍之內。但以 $1e18\text{ cm}^{-3}$ 之條件下來討論，算參雜濃度較高的條件，電流的產生應以穿隧電流來主導較多，若是有能位障下降的情況存在，熱游離發射機制發生機率就會提高，因此會出現在高濃度參雜的條件下，改變了原本穿隧電流和熱游離發射電流發生的比例[28]。

在此，我們再進一步討論蕭特基二極體操作在逆向偏壓和順向偏壓時之情況，能帶圖如下圖所示：

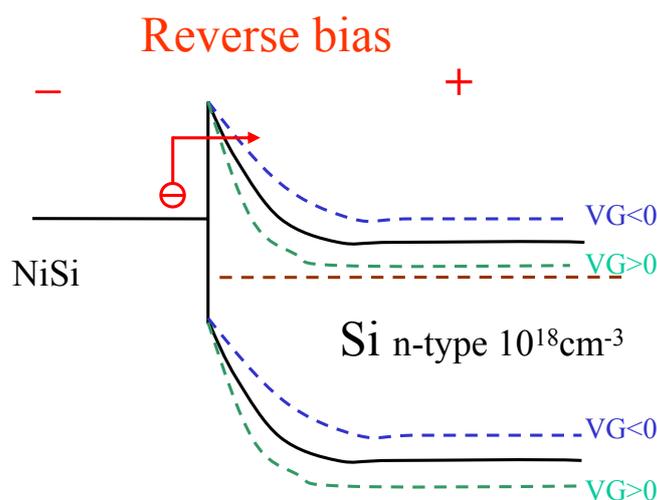


圖 3-37、逆向偏壓下討論電流機制的能帶示意圖[29]。

如圖(3-37)，當蕭特基二極體操作在逆向偏壓時，載子(電子)必須經由金屬部分跨越蕭特基能位障 ϕ_{Bn} 至矽部分而形成電流。此時，若背電極加上正電壓或表面接上帶正電之生物分子，則將造成矽之參雜濃度上升且能帶圖向下拉，也因此，如同上節所述，將造成穿遂電流的上升，而使整體逆向電流上升。同理，若背電極加上負電壓或表面接上帶負電之生物分子，則將造成矽之參雜濃度下降且能帶圖向上拉，也因此造成穿遂電流的下降，而使整體逆向電流下降[29]。

而蕭特基二極體操作在順向偏壓時，能帶圖如下圖所示：

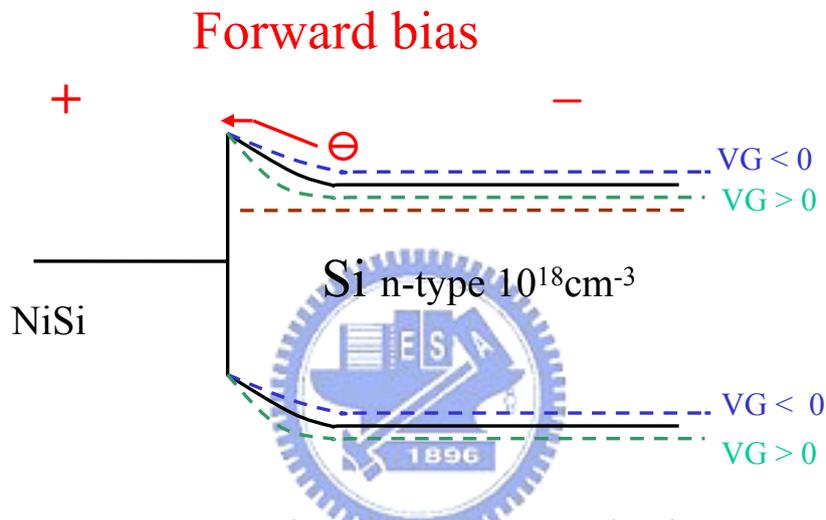


圖 3-38、順向偏壓下討論電流機制的能帶示意圖[29]。

如圖(3-38)，當蕭特基二極體操作在順向偏壓時，載子(電子)必須經由矽部分跨越內建能位障 V_{bi} (Build-In Potential)至金屬部分而形成電流。此時，若背電極加上正電壓或表面接上帶正電之生物分子，則將造成矽之參雜濃度上升且能帶圖向下拉，同樣的，也造成了穿遂電流的上升，但同時，載子所需跨越的內建能位障 V_{bi} 卻也因此而增加，載子需要較大的能量才能跨越增高的內建能位障，造成熱游離輻射電流(Thermionic Current)的降低。同理，若背電極加上負電壓或表面接上帶負電之生物分子，則將造成矽之參雜濃度下降且能帶圖向上拉，也造成了穿遂電流的下降，但同時，載子所需跨越的內建能位障 V_{bi} 卻也因此而下降，載子只需較低的能量即可跨越降低的內建能位障，造成熱游離輻射電流的上升[30]。

經由本節之討論，可知蕭特基二極體在逆向偏壓時，電流受閘極電壓之影響只需考慮穿遂電流對於整體電流之影響，所以閘極效應較為明顯；反觀在順向偏壓時，除了考慮穿遂電流之外，還需考慮內建能位障改變對熱游離輻射電流之影響，且當穿遂電流上升時，熱游離輻射電流下降，當穿遂電流下降時，熱游離輻射電流則上升，所以閘極效應較為微弱。

3-5 矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線之閘極效應之比較

表 3-6、矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線之閘極效應之比較圖。

	SiNW FET	SBNW Reverse Bias	SBNW Forward Bias
	Q @ Vd=0.5V (Vbg=3V)	Q @ Vd=-4V (Vbg=3V)	Q @ Vd=0.5 (Vbg=3V)
Si doping concentration: 1e15(cm ⁻³)	84.41791	23512.52775	15.15294473
Si doping concentration: 1e16(cm ⁻³)	36.18841	21169.17031	7.258214554
Si doping concentration: 1e17(cm ⁻³)	1.54263	19.88223431	0.394990533
Si doping concentration: 1e18(cm ⁻³)	0.32888	3.90447	0.201748909
Si doping concentration: 1e19(cm ⁻³)	0.100386	0.1038	0.091553605

由表（3-6）綜合比較矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線的閘極效應，即電導改變量的大小程度（ ΔG ），可得到兩點結論：

1. 兩種元件在不同參雜濃度的改變下去研究，都是以低參雜 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ 或 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 的 ΔG 變化較明顯。
2. 兩種元件同種參雜濃度比較，是以蕭特基接面奈米線之逆偏操作下之 ΔG 變化較順偏操作下明顯，也比矽奈米線場效電晶體的閘極效應來的好。

第四章

矽奈米線生場效電晶體和蕭特基接面奈米線應用於生物分子感測器之模擬特性分析

4-1 實驗目的

在本文第三章討論過元件最佳化，選出兩種不同元件(SiNW FET 和 SBNW)於 ΔG 變化最大的條件下，應用於生物分子感測，研究討論如何達到感測靈敏度的極限(Sensitivity Limit)，以最少的分子待測量，在最佳條件的元件下操作，達到最高的電性變化。

4-2 表面修飾 AEAPTMS 與金奈米粒子

我們將在元件表面修飾帶電之生物分子。其中，我們選用AEAPTMS及金奈米粒子。

由於 AEAPTMS 分子帶正電，可視為帶正偏壓的副閘極，對矽質奈米線而言會感應出電子，本實驗的奈米線 N 型半導體，主要載子為電子，所以帶正偏壓的副閘極會增加通道的電子載子數，空乏區會產生並延伸到通道中，造成電流飽和的現象。

由於金奈米粒子(Gold Nano-Particles)帶負電，可視為帶負偏壓的副閘極[30]，對矽質奈米線而言會感應出電洞，本實驗的奈米線 N 型半導體，主要載子為電子，所以帶負偏壓的副閘極會減少通道的電子載子數，導致要導通需要施加的閘極偏壓往負的方向移動，以產生更多的電子去彌補因為副閘極造成的損失。

4-3 元件結構和物理

4-3-1 矽奈米線生物感測器

4-3-1-1 元件結構和參數

1. Device: Si Nanowire FET

2. Channel width: 50 nm

元件最佳化後，選定通道寬度為 50 nm。

3. Channel length: 1 μm

元件最佳化後，選定通道長度為 1 μm 。

4. Channel thickness: 35 nm。

5. Si Doping concentration: n-type 10^{15} cm^{-3}

元件最佳化後，選定通道參雜濃度為 10^{15} cm^{-3} 。

6. Source/Drain concentration: n-type 10^{20} cm^{-3}

7. Bulk Oxide thickness: 150 nm

8. Substrate Si Doping concentration: p-type 10^{15} cm^{-3}

9. AEAPTMS thickness: 1 nm

根據實驗數據，SAM 上 AEAPTMS 後的膜厚度為 1nm，由於實際 AEAPTMS 分子密度目前尚未能確定，在此論文討論時先設定 $10^{12} \text{ particles/cm}^2$ 。

10. Gold Nano Particles density: $1.3 \times 10^{11} \text{ particles/cm}^2 \sim 2.71 \times 10^{12} \text{ particles/cm}^2$

根據實驗數據，金奈米粒子的密度範圍，在此論文先設定 $10^{12} \text{ particles/cm}^2$ 。

11. 電荷濃度的定義：

(Charge Concentration) C:

電荷濃度(單位面積帶電量)=總電荷量/帶電荷之總面積(q/cm^2)

$C = (\text{Total Charge Quantity: } Q(C))/(\text{Total Area: } A(\text{cm}^2)) = N / \text{cm}^2 (q/\text{cm}^2)$

$q = 1.6 \times 10^{-19} (\text{Column})$

$Q = Nq$: Total Charge Quantity (Column)

N: Molecules number

N / cm^2 : Molecules density

N / cm^2 (q/cm^2): Unit Charge Quantity per Unit Area

Binding Molecules Density \rightarrow Charge Concentration[31]

\rightarrow 1. AEAPTMS: 10^{12} particles/ $\text{cm}^2 \rightarrow 10^{12}$ q/ cm^2

2. 金奈米粒子: 10^{12} particles/ $\text{cm}^2 \rightarrow 10^{12}$ q/ cm^2

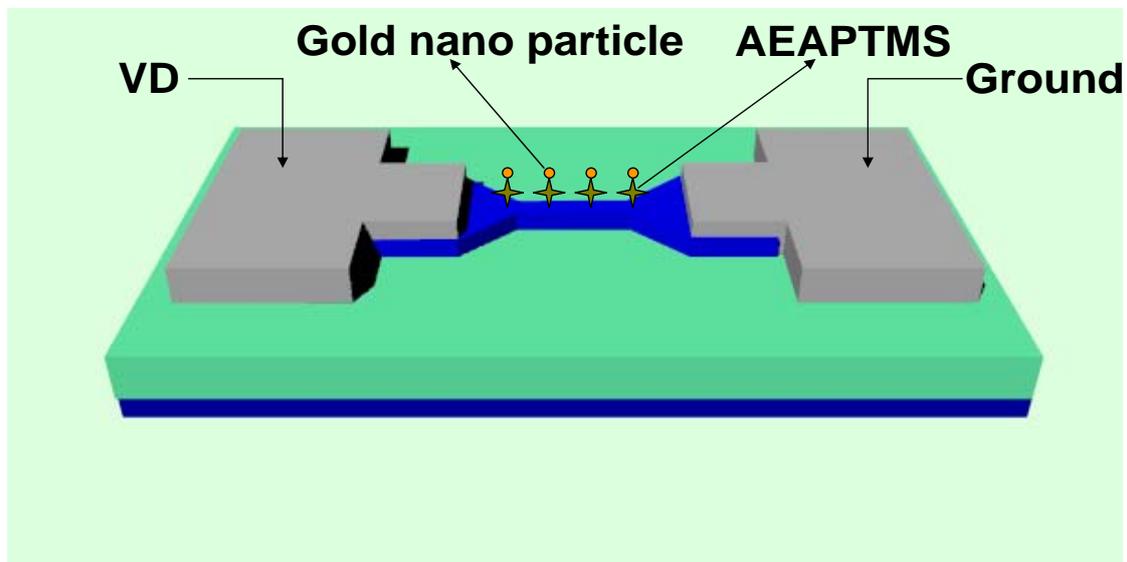


圖 4-1、矽奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子)。

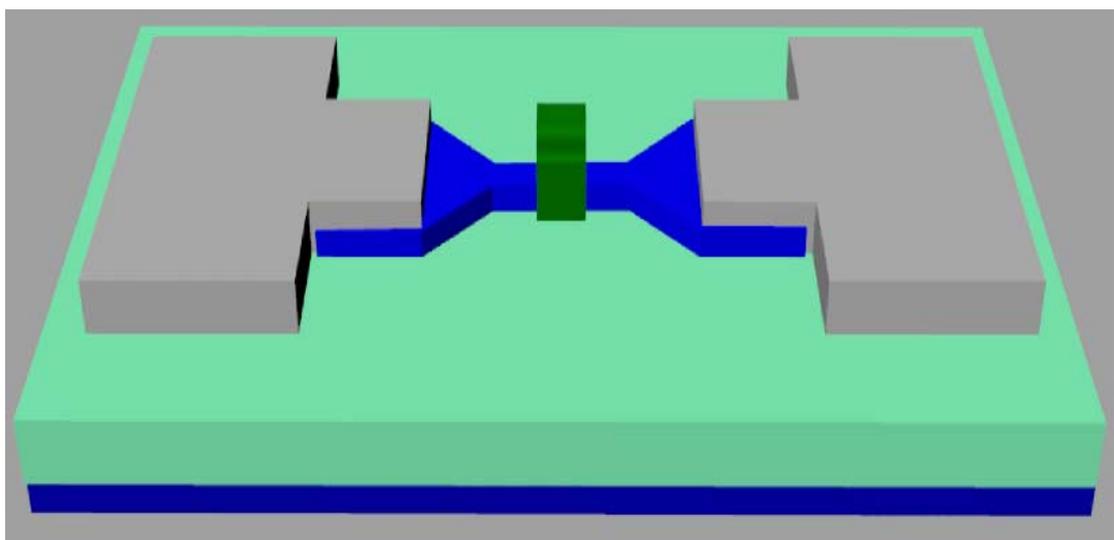


圖 4-2、矽奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子)相當於有一個上電極極(副閘極)示意圖[32]。

4-3-1-2 矽奈米線經過表面修飾後的電性圖

圖(4-3)表示未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的表面電位圖，通道表面電位大約位在 0.05 V。

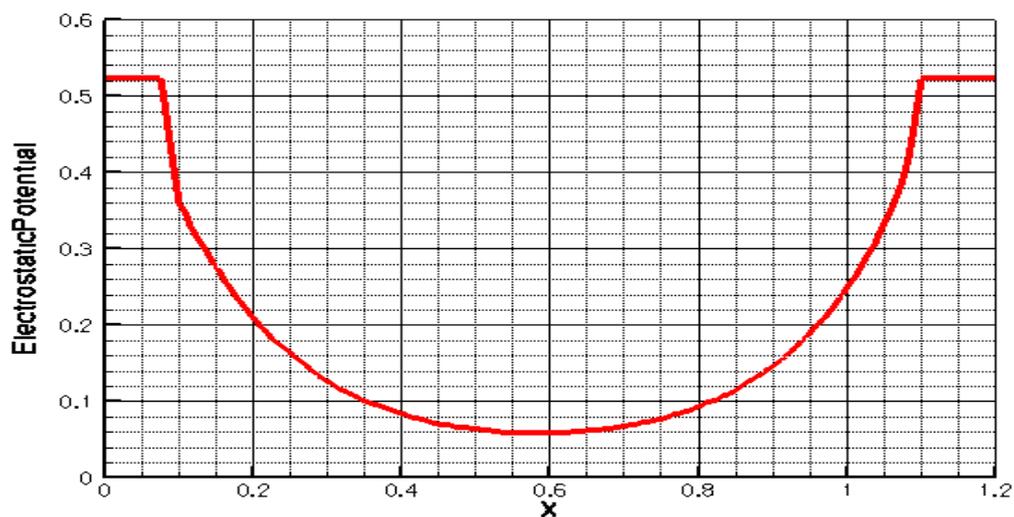


圖 4-3、矽奈米線場效電晶體未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的表面電位圖。

圖(4-4)為未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的通道電位分布圖，可清楚看到通道部份表面電位很低，表示未經任何表面修飾，無帶電之上閘極效應。

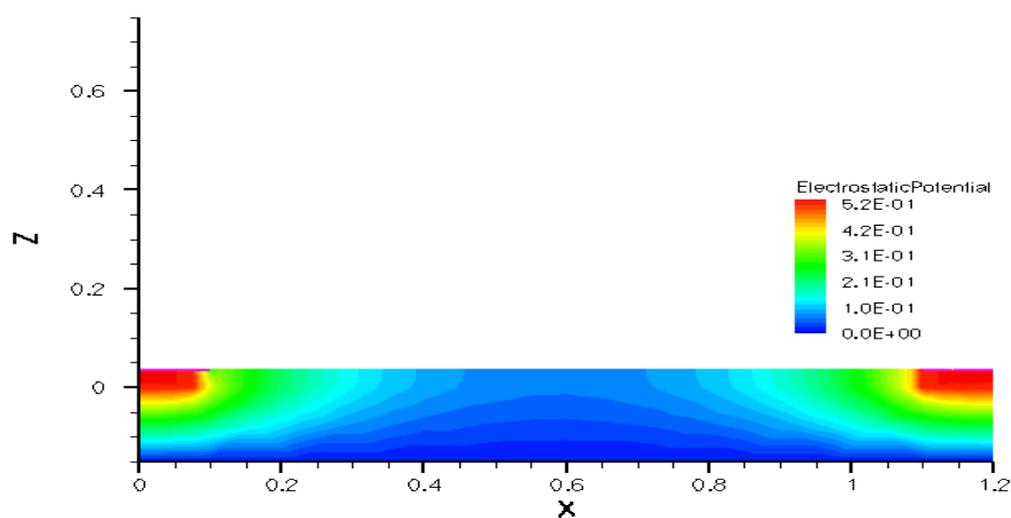


圖 4-4、矽奈米線場效電晶體未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的通道電位分布圖。

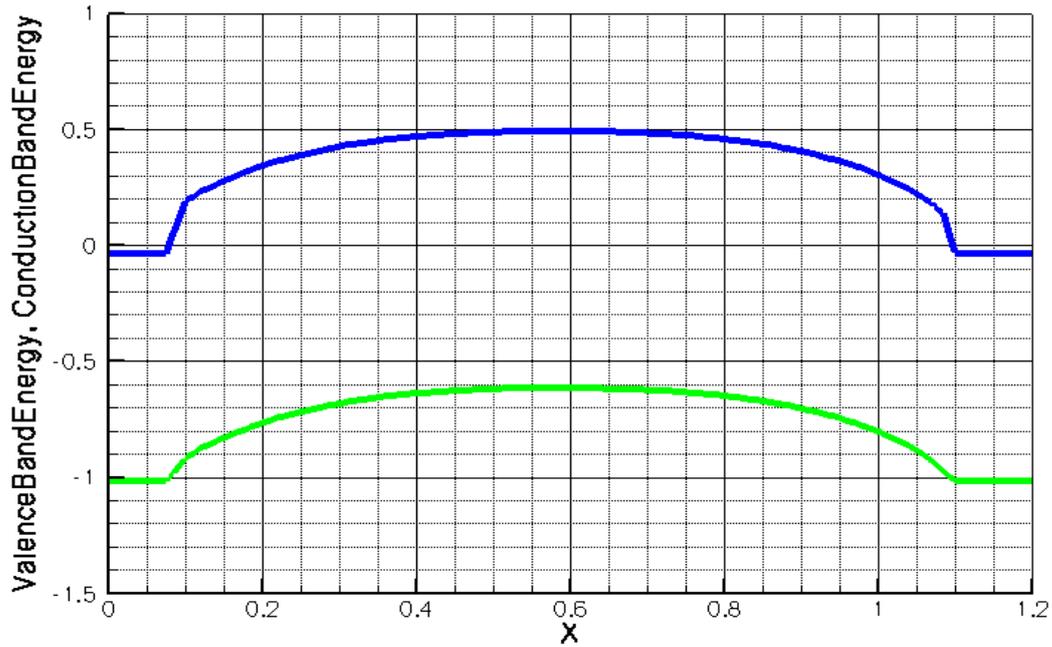


圖 4-5、矽奈米線場效電晶體未經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾前的能帶圖。

圖(4-6)為金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的表面電位圖，金奈米粒子的密度為 10^{12} particles/cm²，相當於電荷密度 -10^{12} q/cm²，和修飾前的 0.05 V 相比，金奈米粒子修飾的結果降低了 0.45 V 的表面電位，意指密度為 10^{12} particles/cm² 的金奈米粒子等同於 0.45 V 的帶負電的上閘極效應。

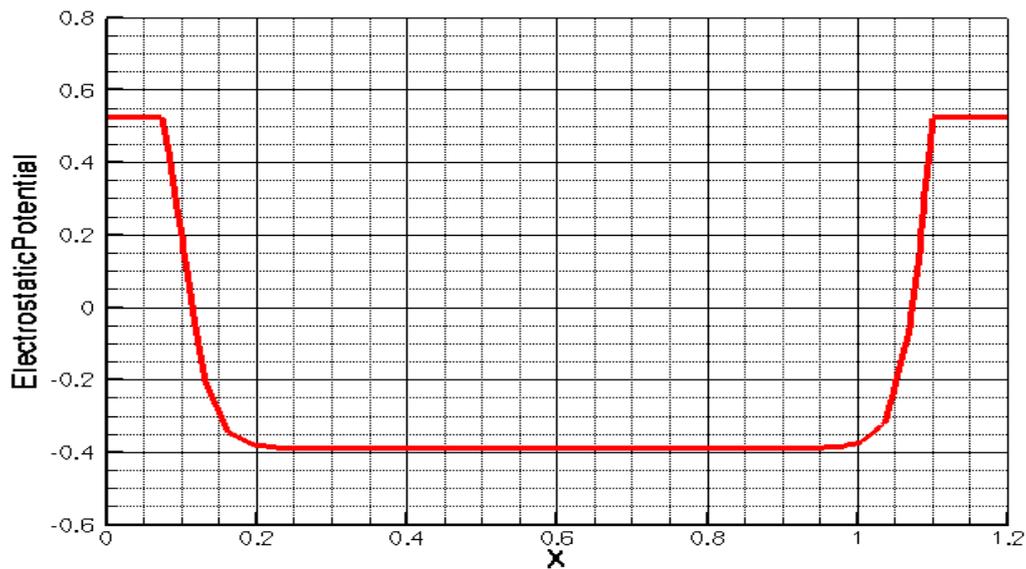


圖 4-6、矽奈米線場效電晶體經金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的表面電位圖。

圖(4-7)是經過金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的通道電位分布圖，可清楚看到表面通道部份的電位和其他 Silicon 的地方的電位相比，表面通道電位是最低的(呈深藍色的)，有 0.45 V 的負上閘極去空乏(Depletion)本為 N-type 參雜濃度為 10^{15} cm^{-3} 通道，使得通道的表面電位最低。

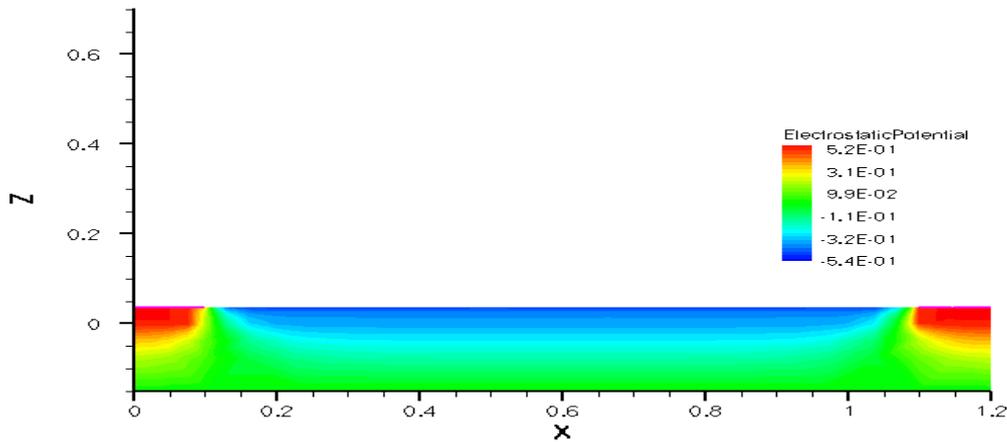


圖 4-7、矽奈米線場效電晶體經過金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的通道電位分布圖。

圖(4-8)為經過 AEAPTMS 修飾後(帶正電的上閘極)的表面電位圖，AEAPTMS 密度為 $10^{12} \text{ particles/cm}^2$ ，相當於電荷密度 10^{12} q/cm^2 ，和修飾前的 0.05 V 相比 AEAPTMS 修飾的結果提升了 0.35 V 的表面電位，意指密度為 $10^{12} \text{ particles/cm}^2$ 的 AEAPTMS 等同於 0.35 V 的帶正電的上閘極效應。

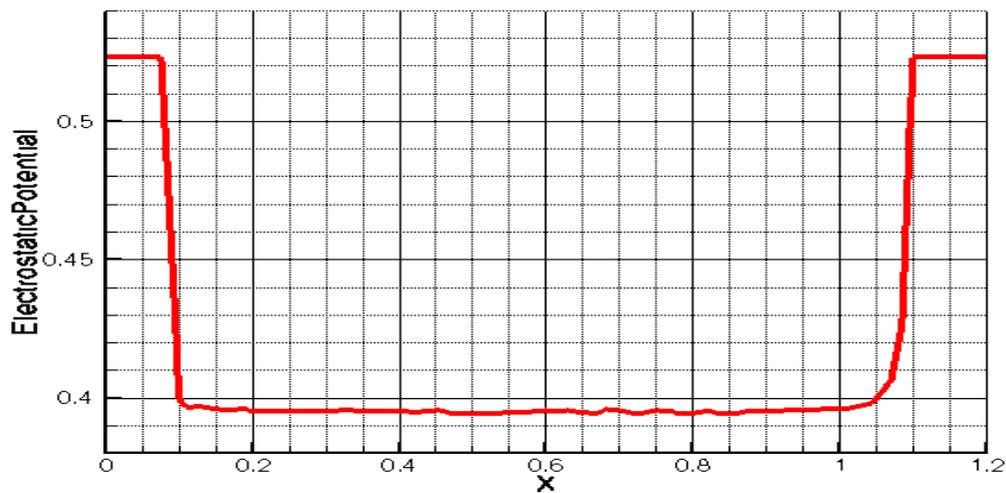


圖 4-8、矽奈米線場效電晶體經過 AEAPTMS 修飾後(帶正電的上閘極)的表面電位圖。

圖(4-9)為經過金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的能帶圖，由於 0.45 V 的負上閘極去空乏通道，使得同為 N-type 的源極和汲極端和通道相比，電位能落差更大[32, 33]。

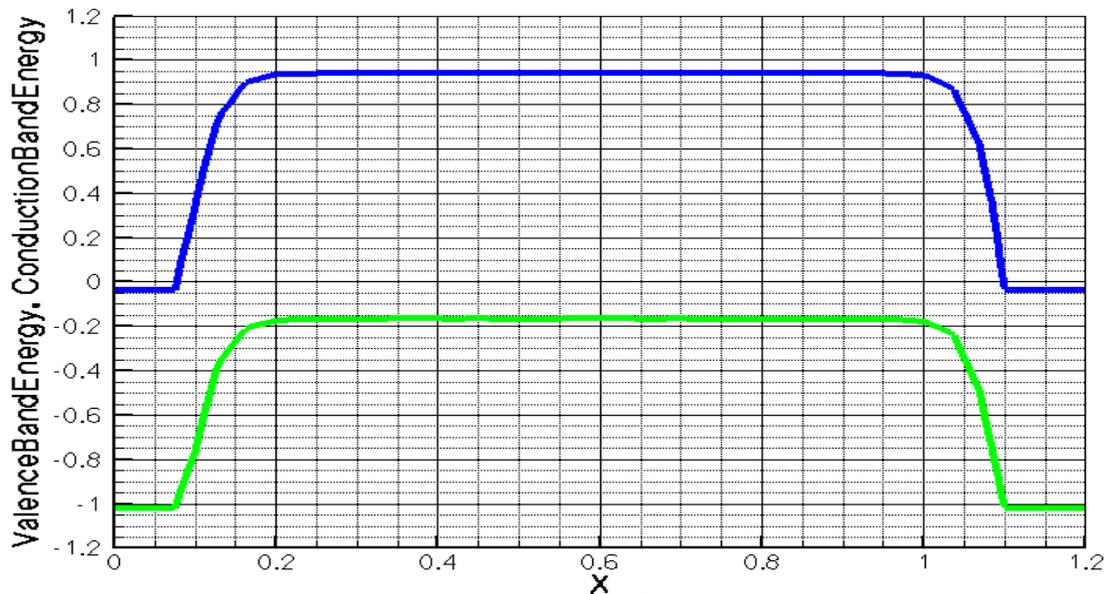


圖 4-9、矽奈米線場效電晶體經過金奈米粒子表面修飾後(帶負電的上閘極)的能帶圖。

圖(4-10)為經過 AEPTMS 表面修飾後(帶正電的上閘極)的能帶圖，由於 0.35 V 的帶正電的上閘極去增強通道，使得同為 N-type 的源極和汲極端和通道相比，電位能落差變小[32, 33]。

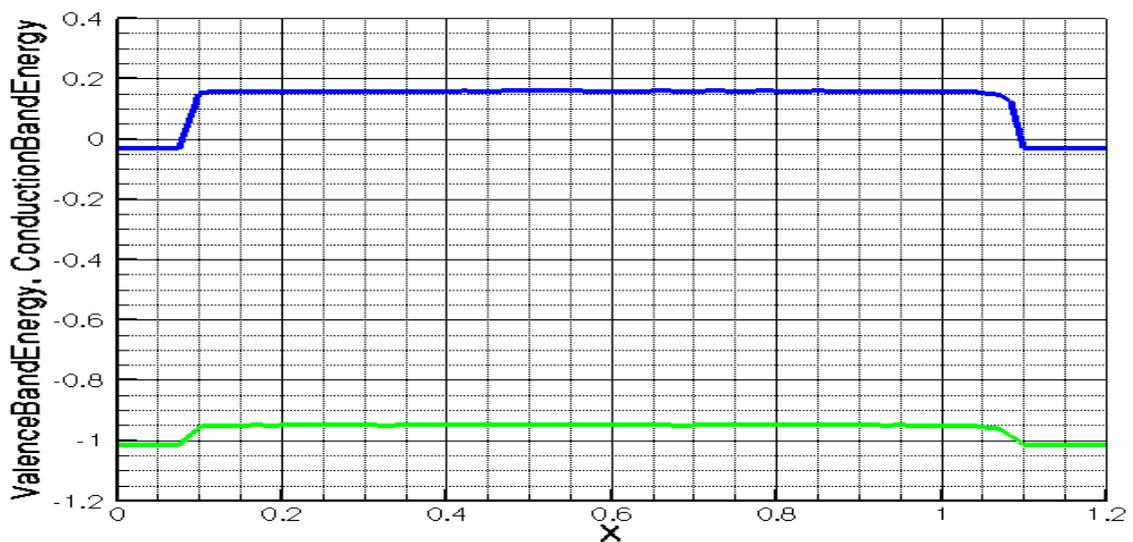


圖 4-10、矽奈米線場效電晶體經過 AEPTMS 修飾後(帶正電的上閘極)的能帶圖。

圖(4-11)是經 AEAPTMS 表面修飾後(帶正電的上閘極)的通道電位分布圖，可清楚看到表面通道部份的電位和其他 Silicon 的地方的電位相比，表面通道電位是最高的(呈橘紅色)，有 0.35 V 的帶正電的上閘極去增強(Enhance)本為 N-type 參雜濃度為 10^{15} cm^{-3} 通道，使得通道的表面電位提高許多。

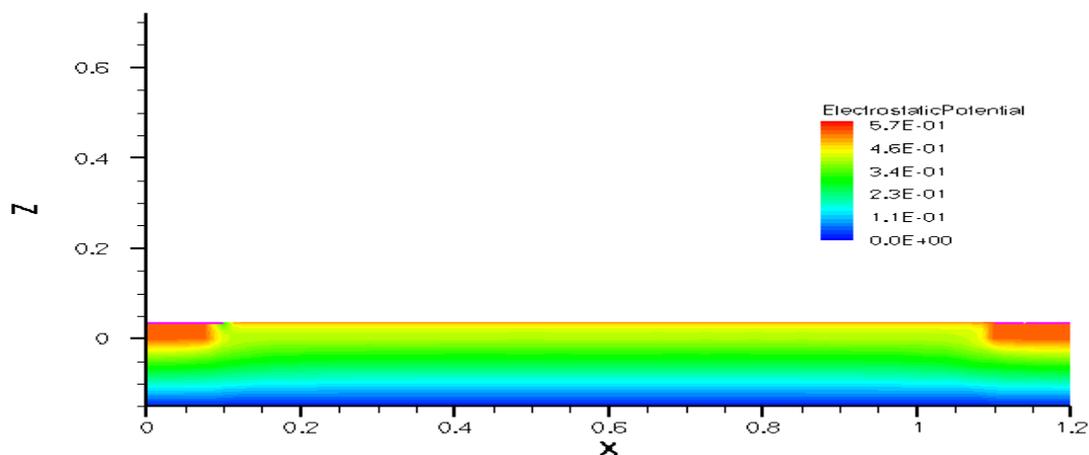


圖 4-11、矽奈米線場效電晶體經過 AEAPTMS 表面修飾後(帶正電的上閘極)的通道電位分布圖。

4-3-1-3 靈敏度計算

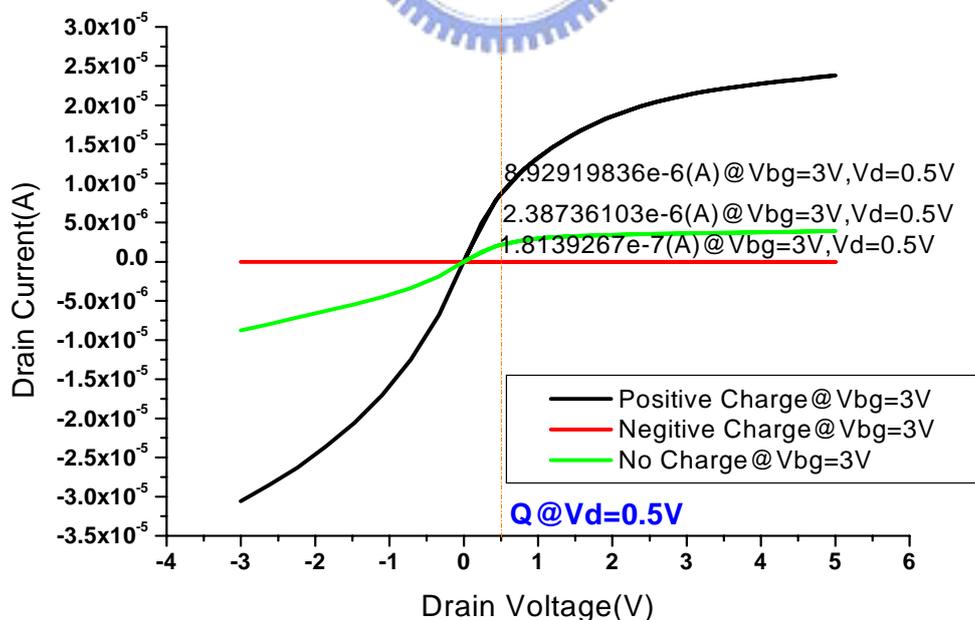


圖 4-12、矽奈米線場效電晶體個別經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾後無任何修飾的通道電流比較圖。

Sensitivity (靈敏度) 的定義[34]：

$$S = (|G - G_0|)/(G_0) = \Delta G/G_0 \quad (\text{式 4-1})$$

$$G_0 = [q \mu_n N_D (W)(H)]/L = qN_DWH/(L) \quad (\text{式 4-2})$$

未加電荷前的矽奈米線電導值：

$$\Delta G = (I - I_0)/(\Delta V_D) \quad (\text{式 4-3})$$

電導值變化量

G: Conductance (S)

q : the Electronic Charge(1.6×10^{-19} C)

μ_n : the Mobility of the Electron($1450 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)

N_D :Uniform Continuous Donor Doping Density(cm^{-3})

W: Nano-wire Channel Width (cm)

H: Nano-wire Channel Thickness (cm)

L: Nano-wire Channel Length (cm)

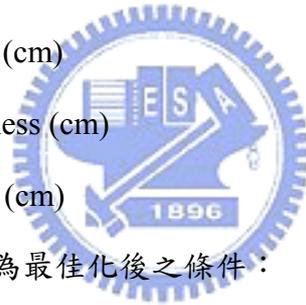


圖 (4-12) 模擬的結構條件為最佳化後之條件：

L=1 μm , W=50 nm , H=35 nm , $N_D=1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$:

$$G_0 = [q \mu_n N_D (W)(H)]/L = q\mu_n N_DWH/(L)$$

$G_0=0.0406 \text{ S}$

- **Positive Charge: ($C=1 \times 10^{12} \text{ q/cm}^2$)**

$$\Delta G = [\text{Adding Positive Charge (I)}] - [\text{No Charge (I)}] = \mathbf{2.740196078}$$

$$S = (2.740196078)/(0.0406) = \mathbf{67.49251424}$$

加上相當於正電荷濃度為 $1 \times 10^{12} \text{ q/cm}^2$ 後的電導值變化量為 2.740196078; 參雜濃度 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 通道長度為 1 μm , 寬度為 50 nm 的最佳化的情況下, 未加電荷前的矽奈米線電導值為 0.0406 S, 根據上述靈敏度公式定義計算, 此條件下外加正電荷後的靈敏度極限為 67.49251424。

- **Negative charge: ($C=-1e12 \text{ q/cm}^2$)**

$$\Delta G = [\text{Adding Negative Charge (I)}] - [\text{No Charge (I)}] = 0.924016862$$

$$S = (0.924016862) / (0.0406) = \underline{\underline{2.275903616}}$$

加上相當於負電荷濃度為 $1e12 \text{ q/cm}^2$ 後的電導值變化量為 0.924016862; 參雜濃度 $1e15 \text{ cm}^{-3}$, 通道長度為 $1 \mu\text{m}$, 寬度為 50 nm 的最佳化的情況下, 未加電荷前的矽奈米線電導值為 0.0406 S , 根據上述靈敏度公式定義計算, 此條件下外加正電荷後的靈敏度極限為 **2.275903616**。

奈米線用來作為生物分子感應器早已被廣泛應用, 由於奈米尺度下具有高的表面積比, 當有生物分子吸附在奈米線上時, 生物分子上面所帶的電荷會改變奈米線場效電晶體的電性。

4-3-2 蕭特基界面奈米線之生物感測器

4-3-2-1 元件結構和參數

1. Device: Schottky Barrier Nanowire

2. Workfunction: NiSi: 4.65 eV

3. Channel width: 50 nm

元件最佳化後, 選定通道寬度為 50 nm 。

4. Channel length: $1 \mu\text{m}$

元件最佳化後, 選定通道長度為 $1 \mu\text{m}$ 。

5. Channel thickness: 35 nm

6. Si Doping concentration: n-type 10^{15} cm^{-3}

元件最佳化後, 選定通道參雜濃度為 10^{15} cm^{-3} 。

7. Source/Drain concentration: n-type 10^{20} cm^{-3}

8. Bulk Oxide thickness: 150 nm

9. Substrate Si Doping concentration: p-type 10^{15} cm^{-3}

10. AEAPTMS thickness: 1 nm



根據實驗數據，SAM 上 AEAPTMS 後的膜厚度為 1nm，由於實際 AEAPTMS 分子密度目前尚未能確定，在此論文討論時先設定 10^{12} particles/cm²。

→AEAPTMS: 10^{12} particles/cm² → $C=10^{12}$ q/cm²

11. Gold Nano Particles density: 1.3×10^{11} particles / cm² ~ 2.71×10^{12} particles / cm²

根據實驗數據，金奈米粒子的密度範圍，在此論文先設定 10^{12} particles / cm²
 10^{12} particles/cm² → $C=-10^{12}$ q/cm²。

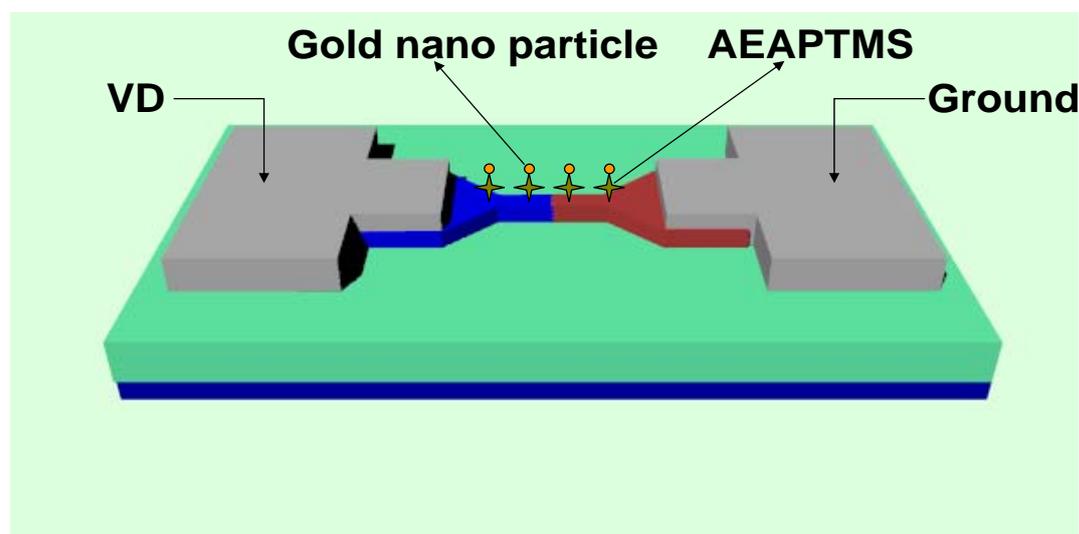


圖 4-13、在蕭特基奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子)示意圖。

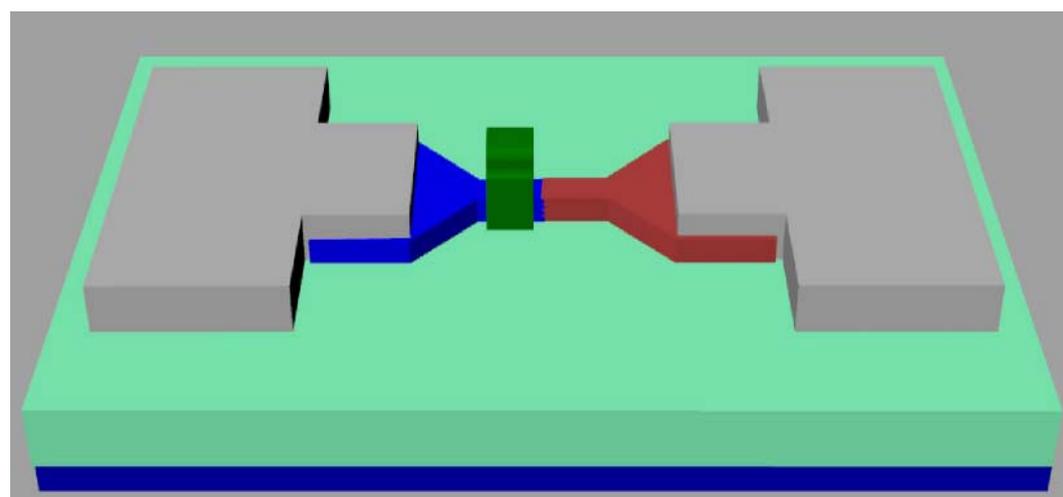


圖 4-14、蕭特基奈米線通道上經過表面修飾(AEAPTMS 和金奈米粒子)相當於有一個上電極極(副閘極)示意圖。

4-3-2-2 蕭特基奈米線經過表面修飾後的電性圖

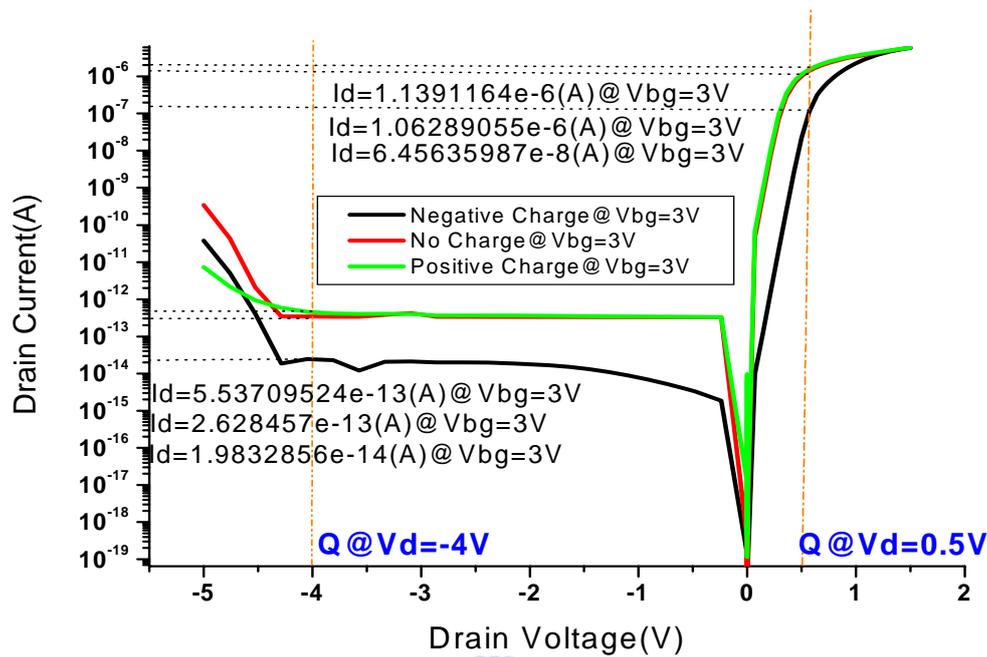


圖 4-15、蕭特基奈米線個別經過 AEAPTMS 和金奈米粒子表面修飾後和無任何修飾的通道電流比較圖。

圖 (4-15) 模擬的結構條件為最佳化後之條件：

$L=1 \mu\text{m}$ ， $W=50 \text{ nm}$ ， $H=35 \text{ nm}$ ， $N_D=1e15 \text{ cm}^{-3}$ ：

➤ Forward Bias(順向偏壓情況)

Positive Charge: ($C=1e12 \text{ q/cm}^2$)

$$\Delta G = [\text{Adding Positive Charge (I)}] - [\text{No Charge (I)}] = 0.071715615$$

參雜濃度 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ ，通道長度為 $1 \mu\text{m}$ ，寬度為 50 nm 的最佳化的情況下，加上相當於正電荷濃度為 $1e12 \text{ q/cm}^2$ 後的電導值變化量為 0.071715615 。

● **Negative charge: ($C=-1e12 \text{ q/cm}^2$)**

$$\Delta G = [\text{Adding Negative Charge (I)}] - [\text{No Charge (I)}] = 0.937475349$$

參雜濃度 $1e15 \text{ cm}^{-3}$ ，通道長度為 $1 \mu\text{m}$ ，寬度為 50 nm 的最佳化的情況下，加上相當於負電荷濃度為 $1e12 \text{ q/cm}^2$ 後的電導值變化量為 0.937475349 。

➤ Reverse Bias(逆向偏壓情況)

● **Positive Charge: (C=1e12 q/cm²)**

$$\Delta G = [\text{Adding Positive Charge (I)}] - [\text{No Charge (I)}] = 12.25237767$$

參雜濃度 1e15 cm⁻³，通道長度為 1 μm，寬度為 50 nm 的最佳化的情況下，加上相當於正電荷濃度為 1e12 q/cm² 後的電導值變化量為 12.25237767。

● **Negative charge: (C=-1e12 q/cm²)**

$$\Delta G = [\text{Adding Negative Charge (I)}] - [\text{No Charge (I)}] = 1.106594969$$

參雜濃度 1e15 cm⁻³，通道長度為 1 μm，寬度為 50 nm 的最佳化的情況下，加上相當於負電荷濃度為 1e12 q/cm² 後的電導值變化量為 1.106594969。

由此又可驗證，在通道加上等量正負電荷的分子數，操作在逆偏的電導值改變量(ΔG)比操作在順偏的還顯著。在此特別說明，蕭特基奈米線並無計算靈敏度(S)此項數值量，蕭特基奈米線 G₀ 尚未切確被定義出(此奈米線為金屬/矽界面)，先以基本的電導值變化(ΔG)量來觀察和比較。



4-3-3 矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線應用於分子偵測之比較

表(4-1)為矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線應用於分子偵測之電導值改變量(ΔG)比較圖。

表 4-1、矽奈米線場效電晶體和蕭特基奈米線應用於分子偵測之電導值改變量(ΔG)比較圖。

	SiNW FET	SBNW forward bias	SBNW reverse bias
Positive Charge	2.740196078	0.07175615	12.25237767
Negative Charge	0.924016862	0.93747349	1.10659496

兩種元件(三種操作機制下), 以外加正電荷來比較, (ΔG)變化是以蕭特基界面奈米線之逆偏操作最明顯。

兩種元件(三種操作機制下), 以外加負電荷來比較, (ΔG)變化是以蕭特基界面奈米線之逆偏操作最明顯。



第五章

結論

由以上之實驗結果與討論，可以歸納出以下之結論：

1. 成功利用 TCAD 模擬出矽奈米場效電晶體的特性，探討不同通道濃度，尺寸長度，寬度，驗證在低濃度($1e15 \text{ cm}^{-3}/1e16 \text{ cm}^{-3}$)、小尺寸下，閘極效應最為明顯，電導值改變量最多，適合用於生物分子偵測，且當表面修飾不同帶電分子時，也驗證此項趨勢，並計算出靈敏度(Sensitivity)，預測靈敏度極限(Sensitivity Limit)，提供實際實驗參考用。
2. 成功利用 TCAD 模擬出蕭特基二極體的基本特性，並驗證蕭特基二極體逆向偏壓電流之閘極效應較順向偏壓電流明顯，且當表面修飾不同帶電分子時，逆向偏壓電流之改變亦較為明顯。因此，逆向偏壓電流為蕭特基二極體生物感測器之主要感測機制。
3. 成功驗證上述兩項結論後，再比較此兩種元件，得到：蕭特基二極體奈米線在小尺寸(矽奈米線部分通道長 $1 \mu\text{m}$; 通道寬度 $50 \text{ nm} \sim 100 \text{ nm}$)低濃度參雜($1e15 \text{ cm}^{-3}/1e16 \text{ cm}^{-3}$)的逆偏電壓操作下，可達到比順偏操作和矽奈米線場效電晶體更顯著的閘極效應。由以上所得到之結果，我們預測在未來，蕭特基二極體之生物感測器可能超越場效電晶體，成為未來應用於生物分子感測之主要元件。
4. 藉由上述幾項成功驗證，也利用 TCAD 建立了所探討設計之目標元件之物理模型，也對於仿效生物分子帶電荷數量與電性結合元件的操作下，展現合理的趨勢，建立近似對於將來實驗提供正確可靠的參考平台。

第六章

未來展望

第五章已歸納出本文實驗成果，但生物分子應用上的研究仍有很大的發展空間，在此，我們對於未來之工作有幾項建議：

1. 本文生物分子應用僅探討到在空氣的環境下接上帶電分子的情形，現今的生物感測元件大都在有溶液的環境下進行，因為不同的待測生物分子需要不同的生存環境，意指存在溶液的環境下，通常這些溶液都有帶電(溶液會解離，有帶電離子存在)，所以除了接上的生物分子的帶電量會影響通道的導電性，分子周圍的溶液裡的離子也會對通道造成影響，也因此有研究 Debye Length 和 Ion Strength 的議題出現[35]，此模型若要在半導體的 TCAD 中建構，會是非常龐大的議題，建議從 2D 的結構測試驗證，測試成功穩定後再往 3D 發展[36,37]。
2. 若在溶液的環境下做分子偵測的研究，實驗實體會是要建構流道，流道的材料通常為 PDMS，目的是要蓋住電極的地方，讓溶液只流通經過矽奈米線(通道的部份)，若要深入研究，PDMS 和 SOI 上的 Oxide 之間還有考慮到接合間的作用力，又更為複雜，若要利用 TCAD 完成此系統建構，還必須搭配自行編寫的程式，再載入 TCAD 中去執行[37, 38]。
3. 若生物分子偵測元件已建構成功，可在設計外部電路接上元件，成為生物分子偵測晶片[39]。

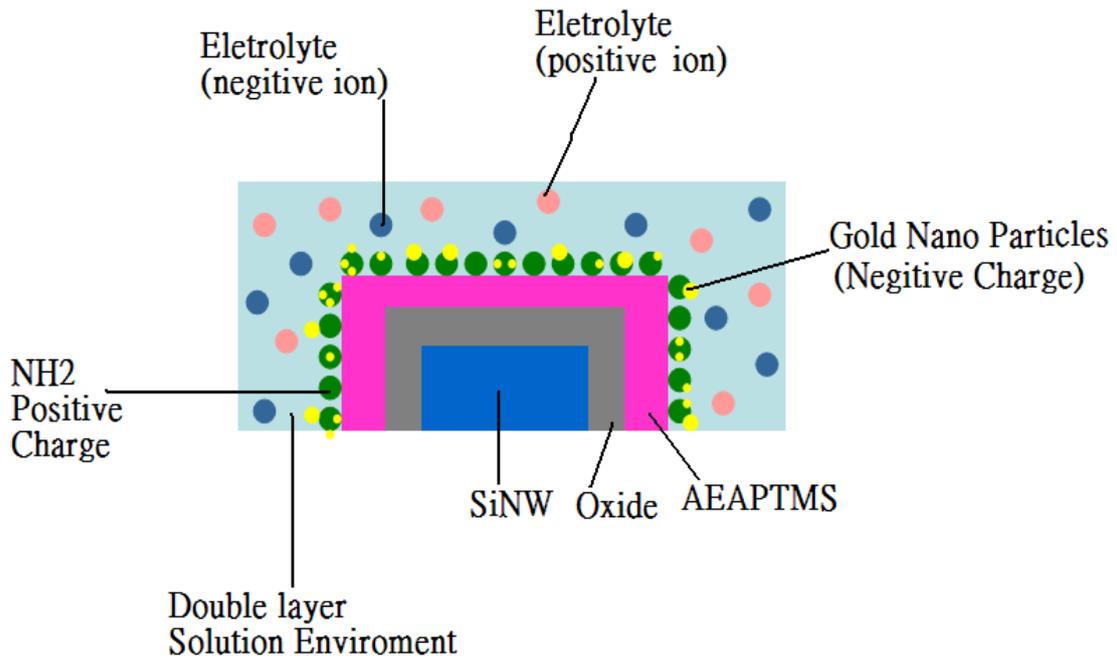


圖 6-1、生物分子在溶液環境下的感測元件 2D 圖。

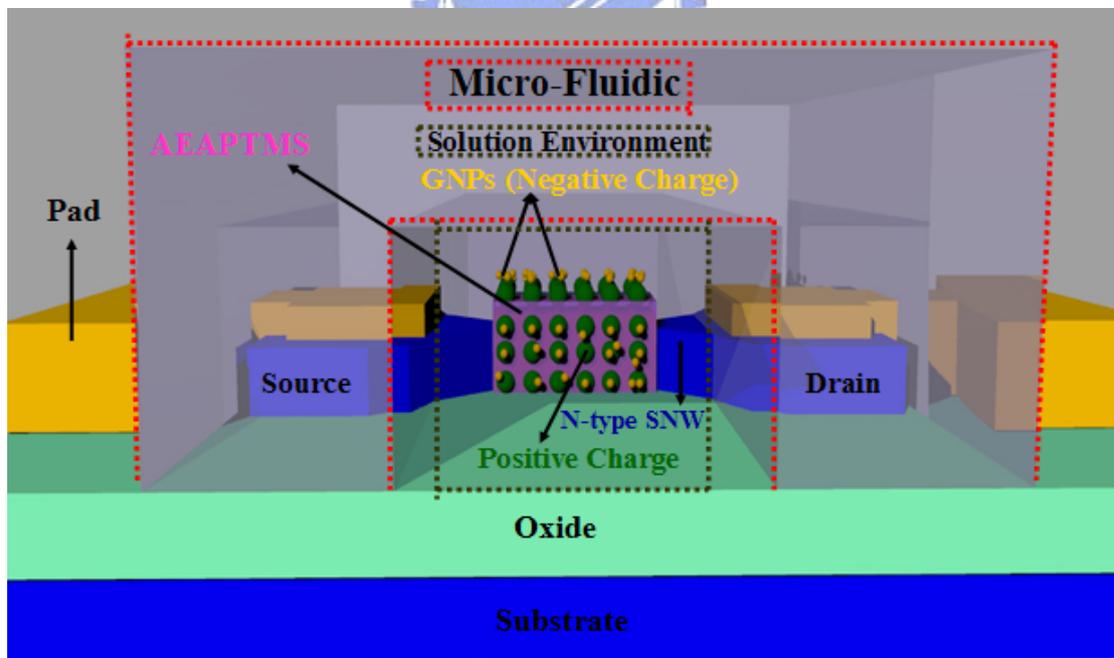


圖 6-2、生物分子在溶液環境下的感測元件 3D 圖。

參考文獻

- [1] Y. Cui, Q. Wei, H. Park, and C. M. Lieber, "Nanowire Nanosensors for Highly Sensitive and Selective Detection of Biological and Chemical Species," *Science*, Vol. 293, No.5533, pp. 1289-1292, 2001.
- [2] H. R. Byon, and H. C. Choi, "Network Single-Walled Carbon Nanotube-Field Effect Transistors with Increased Schottky Contact Area for Highly Sensitive Biosensor Applications," *J. AM. CHEM. SOC.*, Vol. 128, pp. 2188-2189, 2006.
- [3] B. L. Allen, P. D. Kichambare, and A. Star, "Carbon Nanotube Field-Effect-Transistor-Based Biosensors," *Adv. Mater.*, Vol. 19, No. 11, pp. 1439–1451, 2007.
- [4] T. Yamada, "Modeling of kink-shaped carbon-nanotube Schottky diode with gate bias modulation," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 80, No. 21, pp. 4027-4029, 2002.
- [5] J. T. Sheu, C. C. Chen, P. C. Huang, Y. K. Lee, and M. L. Hsu, "Selective Deposition of Gold Nanoparticles on SiO₂/Si Nanowires for Molecule Detection," *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 44, No. 4B, pp. 2864–2867, 2005.
- [6] 李義明，"奈米級金氧半場效電晶體量子修正模式與應用"，*奈米通訊*，第十卷，第三期，91年。
- [7] 劉晉良，"半導體數學漫談"，*數學傳播*，第24卷，第2期，89年。
- [8] M. H. Yang, K. B. K. Teo, and W. I. Milne, "Carbon nanotube Schottky diode and directionally dependent field-effect transistor using asymmetrical contacts," *Appl. Phys. Lett.* 87, No.25, pp. 25311-25313, 2005.
- [9] D. Vasileska, D. Mamaluy, H. R. Khan, K. Raleva, and S. M. Goodnick, "Semiconductor Device Modeling," *J. Comput. Theor. Nanosci*, Vol. 5, No. 6, pp. 999-1030, 2008.

- [10] P. J. Burke, "Nanotubes and Nanowires," World Scientific, pp.297-362, 2007.
- [11] Y. Li, J. Y. Huang, and B. S. Lee, "Effect of the single grain boundary position on surrounding-gate polysilicon thin film transistors" *Semicond. Sci. Technol.*, Vol. 23, pp. 015019-015023, 2008.
- [12] M. G. Ancona, Z. Yu, R. W. Dutton, P. J. Vande Voorde, M. Cao, and D. Vook, "Density-gradient analysis of MOS tunneling," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 47, No. 12, pp.2310-2319, 2006.
- [13] <http://www.nanohub.org/>
- [14] J. Pierre, "Nanowire Quantum Effect In Trigate SOI MOSFETs," *Nanoscaled Semiconductor-on-Insulator Structures and Devices*, pp.129-142, 2007.
- [15] J. P. Colinge, J. C. Alderman, W. Xiong, and C. R. Cleavelin, "Quantum-Mechanical Effects in Trigate SOI MOSFETs," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 53, No. 5, pp. 1131-1136, 2006.
- [16] S. M. Sze, "Physics of Semiconductor Devices", Wiley-Interscience, 3rd Edition, pp.134-373, 2007.
- [17] N. Biswas, J. Gurganus, and V. Misraa, "Work function tuning of nickel silicide by co-sputtering nickel and silicon," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 87, No. 17, pp. 171908-171910, 2005.
- [18] D. A. Neamen, "Semiconductor Physics & Devices," Mc-Graw-Hill, 3rd Edition, pp. 375-415, 2003.
- [19] <http://paper review\Schotty\Schottky Diode.htm>
- [20] Y. Cui, X. Duan, J. Hu, and C. M. Lieber, "Doping and Electrical Transport in Silicon Nanowires," *J. Phys. Chem. B*, Vol. 104, No. 22, pp. 5214-5216, 2000.
- [21] S. Birner, T. Zibold, T. Andlauer, T. Kubis, M. Sabathil, A. Trellakis, and P. Vogl, "nextnano: General Purpose 3-D Simulations," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 54, No. 9, pp. 2137-2142, 2007.

- [22] J. Guo, J. Wang, E. Polizzi, S. Datta, and M. Lundstrom, "Electrostatics of Nanowire Transistors," *IEEE Trans. Nanotech.*, Vol. 2, No.4, pp. 329-334, 2003.
- [23] P. R. Nair, and M. A. Alam, "Design Considerations of Silicon Nanowire Biosensors," *IEEE Trans. Electron on Devices*, Vol. 54, No.12, pp.3400-3408, 2007.
- [24] J. Guo and M. S. Lundstrom, "A computational study of thin-body, double-gate, Schottky barrier MOSFETs," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 49, No.11, pp.1897-1902, 2002.
- [25] M. Jang ,and J Lee, "Analysis of Schottky Barrier Height in Small Contacts Using a Thermionic-Field Emission Model," *ETRI Journal*, Vol. 24, No.6, pp. 455-461, 2002.
- [26] J. Guo, S. Datta, and M.S. Lundstrom, " A numerical study of scaling issues for Schottky barrier carbon nanotube transistors, " *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 51, No. 2, pp. 172-177, 2004.
- [27] C. Lu, L. An, Q. Fu, and J. Liua, "Schottky diodes from asymmetric metal-nanotube contacts," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 88, No. 13, pp. 133501-133503, 2006.
- [28] D. L. John, L. C. Castro, J. P. Clifford, and D. L. Pulfrey, "Electrostatics of coaxial schottky-barrier nanotube field-effect transistors, " *IEEE Trans. Nanotech.*, Vol. 2,No.3, pp. 175-180, 2003.
- [29] C. T. Li, and J. T. Sheu, "Comparison of SiNW FETs with SB NW Diodes in Molecules Detection," Master's thesis, Institute Nanotechnology College of Engineering, National Chiao Tung University, pp. 32-34, 2007.
- [30] K. Yang, H. Wang, K. Zou, and X. Zhang," Gold nanoparticle modified silicon nanowires as biosensors," *Nanotechnology*, Vol. 17, No.11, pp. S276–S27, 2006.
- [31] N. Elfstro, R. Juhasz, I. Sychugov, T. Engfeldt, A. E. Karlstro, and J. Linnros,"

- Surface Charge Sensitivity of Silicon Nanowires: Size Dependence," *Nano Lett.*, Vol.7, No. 9, pp. 2608-2612, 2007.
- [32] S. M. Koo, Q. Li, M. D. Edelstein, C. A. Richter, and E. M. Vogel, "Enhanced Channel Modulation in Dual-Gated Silicon Nanowire Transistors, " *Nano Lett.*, Vol. 5, No.12, pp. 2519-2523, 2005.
- [33] J. W. Jerome,"Analysis of Charge Transport: A Mathematical Study of Semiconductor Devices," Springer-Verlag, pp.525-572, 1995.
- [34] S. Xiong, and J. Bokor, "Sensitivity of Double-Gate and FinFET Devices to Process Variations, " *IEEE Trans. on Electron Device*, Vol. 50, No.11, pp. 2255-2259, 2005.
- [35] A.L. Kukla, and Y. M. Shirshov, "Computer simulation of transport processes in biosensor microreactors," *Sensors and Actuators B*, Vol. 48, pp. 461–466, 1998.
- [36] F. S. Zhou, and Q. H. Wei, "Scaling Laws for NanoFET Sensors," *Nanotechnology*, Vol. 19, pp. 015504-015510, 2008.
- [37] U. Yogeswaran, and S. M. Chen, "A Review on the Electrochemical Sensors and Biosensors Composed of Nanowires as Sensing Material," *Sensors*, Vol. 8, pp.290-313, 2008.
- [38] P. E. Sheehan, and L. J. Whitman, "Detection Limits for Nanoscale Biosensors," *Nano Lett.*, Vol. 5, No. 4, pp. 803-807, 2005.
- [39] M. W. Shinwari, M. J. Deen, and D. Landheer, "Study of the electrolyte-insulator-semiconductor field-effect transistor (EISFET) with applications in biosensor design," *Microelectronics Reliability*, Vol. 47, No.12, pp. 2025–2057, 2006.