



**HAL**  
open science

# Transport électronique dans les nanostructures fortement désordonnées

Yann Leroy

► **To cite this version:**

Yann Leroy. Transport électronique dans les nanostructures fortement désordonnées. Physique [physics]. Université Louis Pasteur - Strasbourg I, 2001. Français. NNT : . tel-00001987

**HAL Id: tel-00001987**

**<https://theses.hal.science/tel-00001987>**

Submitted on 20 Nov 2002

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ LOUIS PASTEUR - STRASBOURG I  
U.F.R. DE PHYSIQUE

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE LOUIS PASTEUR

Discipline : Physique de la Matière Condensée

par

Yann LEROY

Transport électronique dans les nanostructures  
fortement désordonnées

Directeur de thèse : Pr. A. GOLTZENÉ

Soutenue le 17 décembre 2001, devant le Jury composé de :

M. A. BIEBER  
Mme A.-S. CORDAN  
M. A. GOLTZENÉ  
M. G. GUILLOT  
Mme M. MOUIS



# Remerciements

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de PHysique et Application des SEMiconducteurs (PHASE) de Strasbourg : je remercie le Directeur, Daniel MATHIOT, Professeur à l'ULP, de m'avoir accueilli durant cette période.

Toute ma gratitude et mon amitié vont à mon directeur de thèse, Alfred GOLTZENÉ, Professeur à l'ULP et directeur de l'équipe ERM/PHASE, avec qui j'ai eu plaisir à travailler. J'ai beaucoup appris à son contact, tant sur le plan scientifique qu'humain, et je le remercie de la confiance et du soutien qu'il m'a portés. Je remercie vivement Anne-Sophie CORDAN, Maître de Conférences à l'École Nationale Supérieure de Physique de Strasbourg (ENSPS), d'avoir co-encadré cette thèse, et de m'avoir guidé sur les chemins de la recherche scientifique.

J'exprime ma reconnaissance à André BIEBER, Professeur à l'ULP, à Gérard GUILLOT, Professeur à l'INSA et Directeur du Laboratoire de Physique de la Matière de Lyon, et à Mireille MOUIS, Chargée de Recherches HDR au Laboratoire LPCS/CNRS de Grenoble, d'avoir accepté d'être les rapporteurs interne et externes de mon travail, et de participer à ce jury.

Ce travail de thèse doit beaucoup au groupe d'Huguette LAUNOIS au Laboratoire de Microstructure et de Microélectronique (L2M) de Bagnex, et plus particulièrement à Christophe VIEU, Anne PÉPIN et Magaly MEIJAS qui nous ont fourni les données sans lesquelles ce travail n'aurait pu être validé : merci à eux.

J'en profite pour remercier les membres de l'équipe ERM/PHASE pour les discussions utiles, et en particulier Yannick HERVÉ.

Je remercie Yann POUILLON pour l'aide qu'il m'a apporté lors de la rédaction de ce manuscrit, et plus particulièrement pour sa relecture attentive.

Un grand merci à Francine GOLTZENÉ qui a eu la patience de relire attentivement ce manuscrit.



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Contexte de la thèse</b>	<b>5</b>
1.1 Généralités	5
1.2 Dispositifs à blocage de Coulomb	6
1.3 Simulateurs existants	8
1.3.1 Simulateurs Monte Carlo	8
1.3.2 Simulateurs par l'Équation Pilote	9
1.3.3 Simulateurs hybrides	9
1.4 Conclusion	10
Bibliographie	11
<b>2 Théorie</b>	<b>15</b>
2.1 Blocage de Coulomb	15
2.1.1 Boîte à électrons	15
2.1.2 Transistor à un électron	17
2.2 Dispositifs à réseaux de nano-plots	19
2.2.1 Source et drain	19
2.2.2 Plots	19
2.2.3 Jonctions	20
2.2.3.1 Résistance	21
2.2.3.2 Capacité de jonction	21
2.2.4 Théorie orthodoxe	23
2.3 Effet tunnel	24
2.3.1 Transmission tunnel	24
2.3.2 Taux de transition tunnel	25
2.3.3 Résistance tunnel	27
2.3.3.1 Calcul semi-classique	27
2.3.3.2 Calcul quantique	30
2.3.3.3 Comparaison des deux approches	32
2.4 État d'équilibre du système	35
2.4.1 Énergie libre	35
2.4.2 Énergie électrostatique	35
2.4.3 Travail des électrons	36
Bibliographie	37

<b>3</b>	<b>Outil de simulation</b>	<b>39</b>
3.1	Objets simulés . . . . .	39
3.1.1	Dispositifs multi-jonction tunnel . . . . .	39
3.1.1.1	Dispositif expérimentaux . . . . .	39
3.1.1.2	Modèle numérique . . . . .	39
3.1.2	Électrodes et grille . . . . .	41
3.1.3	Modèle de plot . . . . .	41
3.1.4	Modèle de jonction tunnel . . . . .	42
3.1.5	Matrice capacité . . . . .	42
3.1.5.1	Forme de $C$ . . . . .	43
3.2	Calcul du taux de transition tunnel . . . . .	44
3.2.1	Taux de transition tunnel . . . . .	44
3.2.2	Énergie libre . . . . .	44
3.2.2.1	Énergie électrostatique . . . . .	44
3.2.2.2	Travail des électrons . . . . .	45
3.3	Approches de la simulation : Équation Pilote et Monte Carlo . . . . .	46
3.3.1	L'effet tunnel : un processus stochastique . . . . .	46
3.3.2	Méthode de l'équation pilote . . . . .	46
3.3.3	Méthode de Monte Carlo . . . . .	47
3.4	Structure du simulateur . . . . .	49
3.4.1	Paramètres du simulateur . . . . .	49
3.4.2	Organigramme . . . . .	49
3.4.3	Noyau du simulateur . . . . .	51
3.4.4	Approche quasi-1D . . . . .	51
3.4.4.1	Recherche du chemin dominant . . . . .	52
3.5	Détermination des caractéristiques électriques . . . . .	53
3.5.1	Évolution temporelle . . . . .	53
3.5.1.1	Évolution des charges . . . . .	53
3.5.1.2	Évolution du courant . . . . .	53
3.5.2	Courant moyen . . . . .	55
3.5.3	Tension de seuil . . . . .	56
	Bibliographie . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Simulation quasi-1D</b>	<b>61</b>
4.1	Objectif . . . . .	61
4.2	Méthode . . . . .	61
4.3	Validation . . . . .	62
4.3.1	Conditions de calcul . . . . .	62
4.3.2	Résultats . . . . .	62
4.3.2.1	Accélération . . . . .	62
4.3.2.2	Réponses électriques . . . . .	63
4.4	Conclusion . . . . .	68
	Bibliographie . . . . .	69

<b>5 Résultats</b>	<b>71</b>
5.1 Objectifs . . . . .	71
5.2 Caractéristiques électriques : validation du simulateur . . . . .	71
5.2.1 Courant dans les dispositifs ( $I(t)$ , $I(V)$ ) . . . . .	72
5.2.1.1 Évolution temporelle . . . . .	72
5.2.1.2 Courbes courant-tension ( $I(V)$ ) . . . . .	74
5.2.2 Tension de seuil ( $V_{th}$ ) . . . . .	75
5.2.3 Validation . . . . .	76
5.3 Influence des paramètres des réseaux . . . . .	77
5.3.1 Caractéristiques temporelles . . . . .	77
5.3.2 Tension de seuil $V_{th}$ . . . . .	79
5.3.2.1 Comportement moyen . . . . .	79
5.3.2.2 Dispersion de $V_{th}$ . . . . .	81
5.3.2.3 Réduction de la dispersion . . . . .	82
5.4 Conclusion . . . . .	84
Bibliographie . . . . .	85
<b>Conclusion</b>	<b>87</b>
<b>A Matrice capacité C</b>	<b>91</b>
A.1 Lien entre plots et jonctions . . . . .	91
A.2 Systèmes d'équations linéaires . . . . .	92
A.3 Matrice C . . . . .	92
<b>B Variation d'énergie électrostatique</b>	<b>95</b>
<b>C Équation de Schrödinger</b>	<b>99</b>
C.1 Barrière de potentiel rectangulaire . . . . .	99
C.2 Électron dans un cylindre infini . . . . .	101
C.2.1 Forme de l'équation de Schrödinger . . . . .	101
C.2.2 Résolution des équations . . . . .	102
C.2.3 Fonction d'onde de l'électron . . . . .	103
Bibliographie . . . . .	105





# Liste des tableaux

4.1	Gains de simulation avec l'approche quasi-1D . . . . .	63
A.1	Indices des jonctions par rapport à un plot . . . . .	91



# Table des figures

1.1	Loi de Moore . . . . .	5
1.2	Exemples de dispositifs expérimentaux à blocage de Coulomb . . . . .	7
2.1	Boîte à électrons . . . . .	15
2.2	Énergie de charge de la boîte à électrons . . . . .	16
2.3	Évolution du nombre moyen d'électrons dans la boîte à électrons . . . . .	17
2.4	Transistor à un électron . . . . .	17
2.5	Principe du contrôle d'électron . . . . .	17
2.6	Courant dans un transistor à un électron . . . . .	18
2.7	Représentation d'un réseau plan de nano-plots . . . . .	19
2.8	Jonction tunnel entre deux plots . . . . .	21
2.9	Barrière de potentiel d'une jonction Métal/Isolant/Métal . . . . .	24
2.10	Modélisation classique d'une résistance tunnel . . . . .	28
2.11	Modélisation par une jonction cylindrique . . . . .	30
2.12	Niveaux de Fermi d'une jonction tunnel soumise à une tension $V$ . . . . .	31
2.13	Calcul du rayon du canal de la jonction . . . . .	33
2.14	Comparaison des modèles de résistance tunnel . . . . .	34
2.15	Résistance tunnel et capacité en fonction de $d$ . . . . .	34
3.1	Réseau multi-jonctions 1D . . . . .	40
3.2	Réseau multi-jonctions 2D . . . . .	40
3.3	Organigramme du simulateur . . . . .	50
3.4	Organigramme de recherche du chemin dominant . . . . .	52
3.5	Exemple de réseau simulé . . . . .	53
3.6	Exemple de courbe de courant simulé <i>via</i> l'équation (3.21) . . . . .	54
3.7	Exemple de courbe de courant simulé <i>via</i> l'équation (3.23) . . . . .	55
3.8	Exemple de courbe courant-tension . . . . .	56
3.9	Exemple de courbe $V_{th}(T)$ . . . . .	57
4.1	Comparaison de $\langle V_{th} \rangle$ pour les réseaux 2D . . . . .	64
4.2	Comparaison de $\langle V_{th} \rangle$ pour les réseaux 3D . . . . .	65
4.3	Comparaison de $\langle V_{th} \rangle$ pour les réseaux 3D (suite) . . . . .	66
4.4	Comparaison de la dispersion de $V_{th}$ pour les réseaux 2D . . . . .	67
4.5	Comparaison de la dispersion de $V_{th}$ pour les réseaux 3D . . . . .	68
5.1	Courbe expérimentale d'évolution temporelle du courant . . . . .	72

5.2	Évolution temporelle du courant pour un réseau 1D . . . . .	73
5.3	Évolution temporelle du courant pour un réseau 2D . . . . .	73
5.4	Courbes courant-tension expérimentales . . . . .	74
5.5	Intensité du courant simulé en fonction de la tension appliquée . . . . .	75
5.6	Comparaison de tensions de seuil simulées et expérimentales . . . . .	75
5.7	Courbes normalisées de tensions de seuil . . . . .	76
5.8	Fluctuations géantes expérimentales . . . . .	77
5.9	Fluctuations géantes simulées . . . . .	78
5.10	Courbes seuil-température pour des réseaux 1D et 2D . . . . .	79
5.11	Évolution de $V_{th}$ avec $M$ pour des réseaux 1D et 2D . . . . .	80
5.12	Courbes $V_{th}(T)$ pour des réseaux 3D . . . . .	80
5.13	Dispersion de $V_{th}$ pour des réseaux 1D et 2D . . . . .	81
5.14	Dispersion de $V_{th}$ pour des réseaux 3D . . . . .	82
5.15	$V_{th}$ et dispersion pour les réseaux corrigés . . . . .	83
5.16	Effet de la diminution du rayon des plots sur $V_{th}$ . . . . .	84
C.1	Barrière de potentiel rectangulaire . . . . .	99
C.2	Potentiel de confinement cylindrique . . . . .	101
C.3	Probabilité de présence radiale pour $p = 0$ . . . . .	105
C.4	Probabilité de présence radiale pour $p = 1$ . . . . .	105

# Introduction

La progression de la miniaturisation et des performances en micro-électronique a suivi la loi de Moore, donnant la progression de l'intégration avec les années, depuis près de 40 ans. Cette évolution a été permise par les avancées technologiques, aussi bien du côté de la métallurgie du silicium que des procédés de fabrication des structures. Diverses innovations ont eu lieu, mais le silicium et la lithographie optique ont toujours été conservés.

Dès que l'on a réussi à réaliser des structures avec des pas inférieurs à  $0.5 \mu m$ , l'avantage des autres semiconducteurs (III-V par exemple) a diminué. En effet, ce n'était plus la mobilité, mais la vitesse limite des porteurs qui devenait le critère essentiel. D'autre part, les inconvénients, tels que le risque de ségrégation de phases, ne permettaient plus de réaliser des processeurs comprenant de  $10^7$  à  $10^9$  transistors dépourvus de défauts.

Toute cette évolution s'est faite sans que, fondamentalement, la modélisation quasi-classique des dispositifs ne change. Depuis quelques années, on sait toutefois que des limitations surviendront vers les années 2010 – 2015. La première d'entre elles concerne la lithographie optique, qui atteindra ses limites lorsque le pas des structures passera en-dessous d'environ  $0.05 \mu m$ . D'autre part, les "fuites" tunnel deviendront gênantes pour le fonctionnement conventionnel des transistors, lorsque l'épaisseur d'oxyde ( $SiO_2$  par exemple) entre la grille et le canal sera de quelques nanomètres. Finalement, la troisième limitation concerne la consommation des systèmes. En effet, il faudra à la fois limiter le dégagement de chaleur dû à la densité élevée des puces, et abaisser les besoins énergétiques de celles-ci, afin de satisfaire aux contraintes de toute l'électronique portable.

Cette échéance a conduit à établir des prévisions pour les nouvelles filières. La première, à long terme, concerne le développement des voies moléculaires, optiques, et autres voies exotiques (spin-tronique par exemple). La seconde, à court terme, prévoit d'étendre la filière silicium.

Pour cette dernière, on a cherché à réaliser des composants ultimes, c'est à dire des composants permettant de contrôler les électrons un à un (aujourd'hui, 1 *bit* est représenté par environ  $10^3$  électrons). Dès le début des années 90, des solutions ont déjà été envisagées. On a cherché à créer un MOS ultime, ou un transistor à un électron (SET, *Single Electron Transistor*) basé sur le blocage de Coulomb. Néanmoins, des difficultés se sont présentées rapidement : les dimensions requises sont maintenant dans le domaine quantique. Il faut donc des simulateurs qui intègrent ces effets, ce qui n'était pas le cas auparavant.

Simultanément, depuis 10 – 15 ans, le régime mésoscopique, intermédiaire entre le monde microscopique (atomes) et macroscopique, est l'objet d'une activité très intense de recherche fondamentale, aussi bien expérimentale que théorique. Depuis quelques années, le domaine

des composants ultimes pour l'électronique a indiscutablement profité de ces travaux. Cela a conduit à la conception d'une nouvelle électronique. Nous examinerons ici les SET, basés sur le contrôle des électrons par le blocage de Coulomb.

L'utilisation de ces dispositifs n'est pas sans difficulté. La première a été perçue immédiatement : il faut des structures à l'échelle du nanomètre, en particulier, pour le blocage de Coulomb, dont le paramètre pertinent est la tension de seuil de blocage  $V_{th}$ . Celle-ci est directement liée à l'énergie de charge  $E_c$  des plots. Pour avoir  $E_c \gtrsim 0.1 \text{ eV}$  à température ambiante, il faut que les plots aient des dimensions de l'ordre de quelques nanomètres. Une telle dimension n'est pas réalisable avec précision par lithographie optique, ni même par lithographie électronique. C'est pour cette raison que l'essentiel des résultats fondamentaux a été obtenu sur des structures, élaborées par lithographie, fonctionnant seulement à très basse température (quelques degrés Kelvin au maximum).

A partir du moment où cette limitation a été perçue, des essais ont été tentés pour contourner partiellement les conditions sur les dimensions en prenant de petits réseaux. Dans certains cas, les résultats ont été positifs, mais même si ce n'était pas mentionné, il était évident que le désordre allait mener à une dispersion des caractéristiques. Sur ce point, cependant, aucune donnée n'était disponible.

Le but de notre travail a été de vérifier les prévisions déjà faites dans des cas simples, et par une étude systématique, de préciser les limitations de tels dispositifs, grâce à une simulation numérique aussi réaliste que possible. Au moment où ce travail a débuté, un laboratoire possédant la technologie lourde nécessaire à la réalisation de ce type de structure, était engagé dans la même recherche. Nous avons profité de cette collaboration pour valider nos outils de simulation.

Pour éviter de bloquer l'évolution de ces derniers, nous avons prévu d'incorporer toutes les possibilités. Néanmoins, dès le départ, il était évident que l'élément critique concernait les propriétés des réseaux eux-mêmes ; il ne fallait donc pas introduire immédiatement d'autres électrodes que le drain et la source.

C'est pour cette raison que tous les résultats concerneront le système source - réseau de plots - drain, et nous prendrons toujours des paramètres expérimentaux constants, correspondant à l'état de l'art lorsque notre travail a démarré. Ceci rendra les comparaisons plus faciles.

Enfin, un point très important concerne la justification systématique des approximations introduites dans notre simulateur. En effet, dans notre cas, le but est l'obtention des valeurs réelles des paramètres à partir des données expérimentales. Il faut tout d'abord que l'ensemble des hypothèses soit auto-cohérent. Il ne faudra pas que les erreurs introduites par des hypothèses simplificatrices soient plus grandes que celles, inévitables, liées aux données expérimentales, par exemple à la mesure des dimensions : ces dernières ne sont supérieures aux distances inter-atomiques que d'un ordre de grandeur au maximum.

La structure du manuscrit sera la suivante :

Au chapitre 1, nous verrons en détail le contexte de ce travail, et particulièrement les dispositifs expérimentaux qui en sont à l'origine. Nous préciserons, après avoir fait un bilan des simulateurs existant dans ce domaine, les raisons qui nous ont poussés à développer notre propre outil.

Au chapitre 2, le principe de fonctionnement des dispositifs à blocage de Coulomb sera expliqué. Nous y préciserons les hypothèses et les modèles nécessaires à la réalisation d'un simulateur réaliste.

Le chapitre 3 quant à lui décrira le simulateur proprement dit, et les choix effectués pour son implémentation. Nous y développerons une méthode d'accélération de la simulation des réseaux à deux et trois dimensions, par une approche quasi-1D.

Le chapitre 4 s'appliquera à démontrer la validité de l'approche de simulation quasi-1D, et donnera une estimation de l'accélération apportée.

Enfin, le chapitre 5 donnera, après la validation du simulateur, les résultats concernant l'étude de l'influence du désordre géométrique sur les caractéristiques électriques des réseaux multi-jonctions tunnel. Nous y ferons une proposition de modification de la conception des dispositifs pour réduire la dispersion induite par le désordre.

Finalement, nous pourrions conclure l'ensemble de ce travail.





# Chapitre 1

## Contexte de la thèse

### 1.1 Généralités

La miniaturisation des composants de base de la micro-électronique a vu ses limites repoussées de plus en plus en fonction de l'évolution des technologies de fabrication. Ainsi, depuis près de 40 ans, l'augmentation de l'intégration des composants a suivi la loi de Moore, qui prévoyait que le nombre de transistors par  $cm^2$  doublait tous les 12 mois. La figure 1.1 illustre le facteur essentiel qui engendre cette loi, en montrant l'évolution de la taille des structures de base des transistors en fonction des années. Après s'être ralentie dans les années 80, ces dernières années l'évolution est à nouveau revenue à son rythme initial.

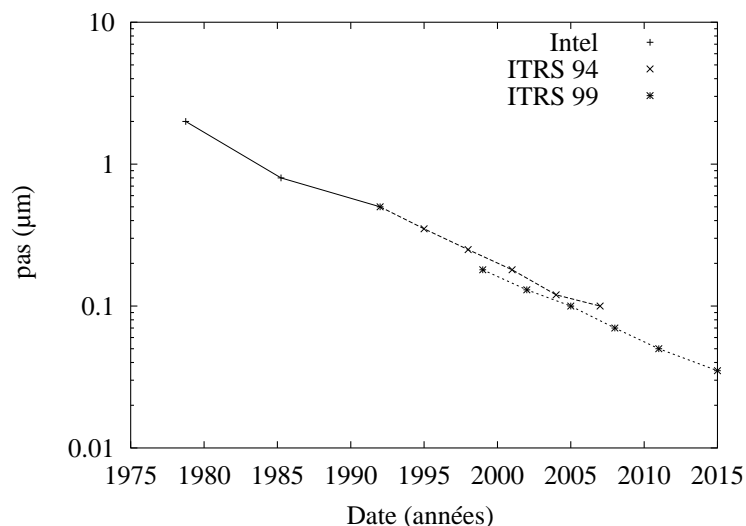


FIG. 1.1: Évolution du pas en fonction des années. Les données récentes proviennent des données estimées par l'ITRS en 1994 et 1999.

Cette progression se poursuivra encore quelques années, mais la limite fatidique se profile à l'horizon, et les prévisions annoncent qu'au-delà de 2010 – 2015 les structures actuelles à base de silicium (Si) ne pourront plus évoluer. Le principal problème provient de la lithographie optique, servant à réaliser la géométrie des transistors : elle ne pourra plus être utilisée

en-dessous d'un pas de 30 *nm*. D'ores et déjà, la mise en oeuvre de procédés lithographiques dans le domaine de l'ultraviolet extrême exige de résoudre d'importants défis technologiques [1]. Le second frein à l'évolution des techniques actuelles est dû à la couche d'isolant entre le canal et la grille du transistor. En effet, en-dessous d'environ 3 *nm*, le SiO<sub>2</sub> est perméable aux fuites tunnel, et celles-ci viennent perturber le fonctionnement conventionnel des transistors. Pour pallier à ce problème, il est envisagé de changer de matériau, afin d'avoir un diélectrique plus "opaque" que SiO<sub>2</sub> à des dimensions plus faibles. Néanmoins, cela crée d'autres problèmes car on sort alors de la technologie de SiO<sub>2</sub>.

De nombreuses voies de recherche sont apparues dans le but de trouver des technologies de substitution. On cherche à réaliser des fonctions similaires aux actuels transistors, ou à mémoriser de l'information de manière plus compacte. Parmi les différents axes qui offrent des opportunités, on peut citer la nano-électronique, l'électronique moléculaire, la nano-spin, l'opto-électronique ou encore les composants Josephson. Ces derniers sont envisagés depuis longtemps en raison de leur rapidité de commutation, mais ils ne sont malheureusement pas utilisables au-delà d'une centaine de Kelvin. La nano-électronique, sur laquelle porte ce travail, présente l'avantage de pouvoir rester compatible avec la technologie du silicium, qui est à l'heure actuelle la seule à être maîtrisée au niveau industriel, pour les circuits à très hautes intégrations.

La nano-électronique est basée sur le contrôle d'une charge individuelle pour véhiculer l'information. Elle s'oriente selon deux axes, le développement d'un transistor MOS ultime [2,3] et les dispositifs à blocage de Coulomb [4]. Ces derniers sont apparus suite aux travaux effectués sur les films fins pour lesquels le transfert de charge par effet tunnel, combiné avec des effets coulombiens, dominait [5,6], et du fait de l'avancée technologique dans la réalisation de structures de faibles dimensions.

Grâce à cette approche, l'intégration devrait être augmentée tout en diminuant les effets thermiques et les problèmes liés à la consommation des dispositifs. Malheureusement, il a rapidement été constaté que le gain en vitesse serait négligeable avec ce type de dispositifs. Néanmoins, il reste l'application aux mémoires, pour lesquelles la vitesse est moins critique.

La question qui se pose à présent est de savoir s'il est possible de réaliser de telles structures fonctionnant à température ambiante. Cela requiert en effet des énergies de charge  $E_c > 0.1 \text{ eV}$  et de faibles dispersions des caractéristiques électriques, pour pouvoir satisfaire les contraintes de l'intégration en micro-électronique.

## 1.2 Dispositifs à blocage de Coulomb

Leur principe repose sur le phénomène de blocage de Coulomb qui régule le transfert de charge parmi des conducteurs isolés. Un électron arrivant sur un conducteur de capacité  $C$  amène une énergie de charge  $E_c = e^2/2C$  sur ce dernier. Si cette énergie est supérieure à l'agitation thermique ( $E_c \gg k_B T$ ), le mouvement de l'électron sera possible, mais il sera conditionné par son environnement électrostatique, et l'on pourra contrôler son trajet au sein de structures particulières.

Si l'on veut créer des structures fonctionnelles à température ambiante, il faut que l'énergie  $E_c = e^2/2C$  soit suffisamment importante. Il est donc nécessaire que la capacité des conducteurs mis en oeuvre soit très faible (environ  $10^{-19} F$ ), ce qui se traduit par des dimensions de structure de l'ordre du nanomètre. A ces dimensions, les conducteurs sont isolés par des barrières tunnel au travers desquelles les électrons vont transiter. L'épaisseur de ces barrières va déterminer la résistivité de la jonction, et donc celle du dispositif formé par l'ensemble des conducteurs. Afin que la résistivité reste faible ( $< 10^{12}\Omega$ ), il faut là aussi avoir des distances entre plots de l'ordre du nanomètre. Toutes ces distances doivent être contrôlées. Or, une distance de  $1 nm$  représentant environ 4 distances inter-atomiques, un tel contrôle est difficile.

Un gain est espéré si l'on ne réalise plus des structures ayant un seul conducteur, mais plutôt des réseaux de plots conducteurs. En effet, le contrôle sur les dimensions des structures diminue car on peut faire appel à des procédés de dépôts pour les plots. Malheureusement, un tel procédé de fabrication s'accompagne d'un grand désordre géométrique sur la position des plots.

Les dispositifs expérimentaux fabriqués par l'équipe avec laquelle nous avons collaboré, et sur lesquels est basé notre travail, sont composés de réseaux de plots d'or de quelques nanomètres de diamètre, déposés entre des électrodes sur un substrat isolant de  $SiO_2$  [7]. Des dispositifs analogues ont également été fabriqués par d'autres équipes [8]. Les dispositifs sont réalisés par la combinaison de dépôts de films granulaires et de lithographie électronique à très haute résolution [9]. Des exemples de dispositifs expérimentaux se trouve sur la figure 1.2.

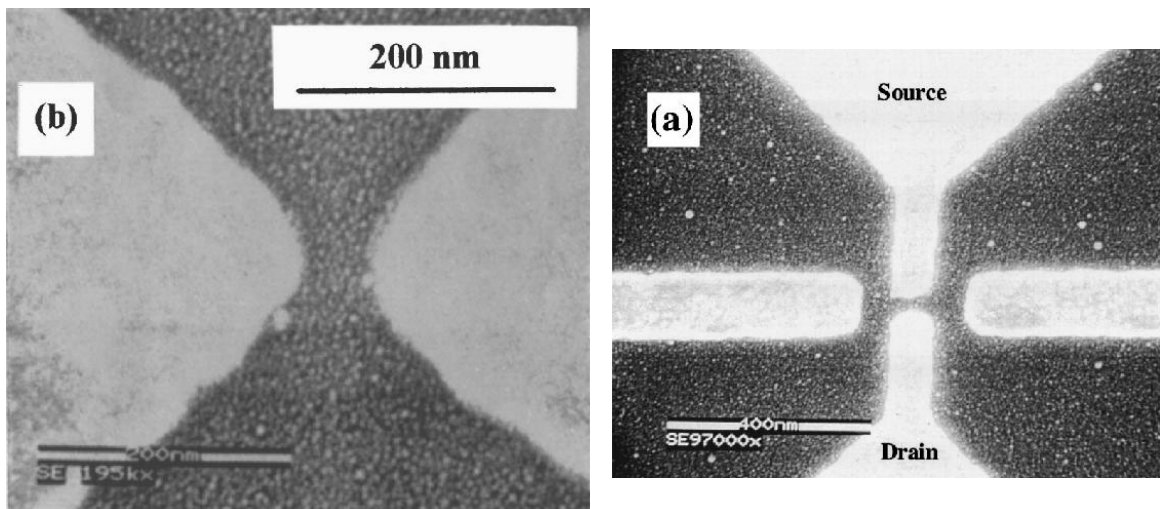


FIG. 1.2: Exemples de dispositifs expérimentaux du L2M.

Afin de déterminer l'applicabilité de tels dispositifs, il est indispensable de déterminer la dispersion des caractéristiques induites par le désordre et la valeur du bruit. Même si par la suite ces dispositifs sont susceptibles d'être couplés avec une grille, il est d'abord important de caractériser les dispositifs de plots eux-mêmes. Il ne sera donc pas nécessaire de tenir compte, dans un premier temps, de l'existence d'autres électrodes hormis la source et le drain.

D'autre part, comme on peut le voir sur la figure 1.2, chaque plot est entouré d'un nombre de voisins variant de trois à six. En moyenne, on peut considérer que chaque plot à quatre voisins, et l'utilisation d'un réseau à maille carrée constituera une bonne approche pour la simulation de ces dispositifs.

## 1.3 Simulateurs existants

L'étude théorique de dispositifs multi-jonctions tunnel a rapidement nécessité l'utilisation de la simulation numérique pour prévoir les caractéristiques des éléments étudiés. L'étude de dispositifs ayant deux jonctions tunnel, bien que très largement abordée analytiquement [10–12], est à l'origine des premiers simulateurs dans le domaine des dispositifs à blocage de Coulomb.

K. MULLEN *et al.* [13] ont initié les premiers travaux où apparaissent les bases de la simulation de type Monte Carlo de dispositifs à jonctions tunnel. L'étude avait pour but de comprendre l'évolution de la résistance de films fins formés par des gouttes métalliques dans un isolant [6]. L'approche consistait à considérer le film comme équivalent à un grand nombre de dispositifs à deux jonctions en parallèle, afin de reproduire le comportement courant-tension à travers le film. Le simulateur décrit est très simple et permet uniquement la détermination du courant stationnaire dans un dispositif à deux jonctions tunnel.

Depuis ces travaux, un grand nombre d'approches de simulation a été développé, justifié par l'intérêt croissant porté aux dispositifs à un électron et à l'élaboration des éléments de base d'une logique à un électron (fonctions ET, OU, etc.). Ces simulateurs peuvent être groupés en plusieurs catégories, selon les principes de simulation choisis.

### 1.3.1 Simulateurs Monte Carlo

Le principe des simulateurs, regroupés dans la première catégorie, est de reproduire le mouvement des électrons en effectuant des tirages aléatoires selon des critères déterminés par la physique du problème, comme l'a introduit N. METROPOLIS dans ses travaux [14]. C'est dans cette catégorie que s'insère le travail exposé dans la suite.

Les premiers simulateurs avaient pour but de comprendre la dynamique du transport de charge dans des réseaux unidimensionnels puis bidimensionnels [15–18]. Ils considèrent des réseaux ordonnés géométriquement (où toutes les jonctions tunnel sont identiques) à une température nulle. Curieusement, bien qu'étant postérieur aux travaux de K. MULLEN *et al.*, c'est l'algorithme proposé par N.S. BAKHVALOV *et al.* [16] qui est retenu pour la réalisation de simulations par la méthode de Monte Carlo. L'idée principale est de déterminer la durée au bout de laquelle un évènement tunnel a lieu dans le dispositif et ensuite de choisir aléatoirement à travers quelle jonction le mouvement s'effectue.

Parallèlement aux études sur la dynamique du transport de charges, la théorie commence à prévoir des dispositifs à jonctions tunnel ayant des fonctions particulières. Ainsi l'équipe de J. L. GEERLIGS introduit la pompe à électron pour des recherches en métrologie [19], et K. K. LIKHAREV [20] et J. R. TUCKER [21] définissent la logique à un électron (SEL, *Single Electron Logic*) basée sur un inverseur utilisant le blocage de Coulomb. On voit alors apparaître des simulateurs plus perfectionnés, capables de simuler des dispositifs ayant des géométries plus complexes [22,23], voire quelconque, comme MOSES (*MONte Carlo Single Electronics Simulator*) de R. CHEN [24] ou SIMON (*SIMulation Of Nano-structures*) de C. WASSHUBER [25].

En marge des travaux où le blocage de Coulomb est prépondérant, on voit naître des travaux en thermométrie. Dans ce cas précis, les dispositifs à jonctions tunnel sont utilisés dans des domaines où le blocage de Coulomb ne domine plus [26–29]. Là encore des simulateurs

de type Monte Carlo sont utilisés pour prévoir et comprendre le comportement de réseaux unidimensionnels de jonctions tunnel.

Outre l'intérêt porté par les physiciens à ces dispositifs, la réalisation de simulateurs pour des dispositifs de grande taille a suscité un intérêt du point de vue informatique. La parallélisation massive de ce type de simulation est donc également envisagée dans les travaux de X. WANG *et al.* [30]. Cependant, une telle approche suppose d'avoir à disposition un ordinateur puissant ayant un grand nombre de noeuds.

### 1.3.2 Simulateurs par l'Équation Pilote

L'utilisation de simulateurs de type Monte Carlo n'est pas l'unique moyen d'arriver aux caractéristiques électriques de dispositifs à jonction tunnel. L'équation pilote permet également d'y accéder, par le biais d'un bilan cinétique des mouvements sur les plots. Avec cette approche, on détermine la probabilité d'occupation des différents plots du dispositif multi-jonctions tunnel, puis les caractéristiques courant-tension, ou les états de charge représentant des erreurs pour une fonction spécifique. Néanmoins par ce moyen, il n'est pas possible d'étudier le bruit stochastique.

Le simulateur le plus abouti de cette catégorie est SENECA (*Single Electron NanoElectronic Circuit Analyser*), réalisé par L. FONSECA *et al.* [31,32]. Il est dédié à l'étude de l'apparition d'erreur par rapport à une configuration de départ, dans des dispositifs variés. Il inclut des phénomènes tunnel d'ordre élevé (*cotunneling*) et résoud l'équation pilote dépendant du temps, pour des dispositifs multi-jonctions tunnel. Néanmoins, il requiert l'usage de beaucoup de mémoire, et repose sur un algorithme relativement complexe.

La plupart des autres simulateurs de cette catégorie se limite à résoudre le problème en régime stationnaire. Mais cela nécessite des ressources importantes pour déterminer les configurations les plus probables, les dispositifs ayant la possibilité d'accumuler un nombre élevé de charges. La taille des dispositifs pouvant être étudiée par cette voie est rapidement limitée par la mémoire disponible. La recherche se porte donc sur des méthodes d'optimisation de cette approche [33,34].

### 1.3.3 Simulateurs hybrides

Une dernière catégorie de simulateur peut être isolée. Elle regroupe les simulateurs qui font appel à plusieurs approches.

L'utilisation combinée de l'équation pilote et de l'approche Monte Carlo est abordée par C. WASSHUBER dans le simulateur SIMON [35]. Ce simulateur est de type Monte Carlo, tel qu'on l'a vu précédemment, mais il incorpore des phénomènes tunnel d'ordre élevé comme pour SENECA. Ces phénomènes sont pris en compte par une résolution particulière de l'équation pilote. Le logiciel SIMON a été développé dans le but d'étudier des dispositifs particuliers, mais en incorporant divers éléments extérieurs (source de tension, courant, résistance, ampli, ...).

Les derniers simulateurs apparus dans la littérature sont de type SPICE <sup>1</sup>. Un composant particulier a été ajouté aux bibliothèques de ces logiciels. Celui-ci simule un dispositif

<sup>1</sup><http://infopad.eecs.berkeley.edu/icdesign/SPICE/>

à jonctions tunnel par un traitement qui repose sur une linéarisation des équations de fonctionnement de structures simples (transistor à un électron, inverseur ,...), permettant d'établir un circuit équivalent simple [36].

## 1.4 Conclusion

Parmi tous ces simulateurs, très peu sont accessibles aisément. Ils sont pour la plupart développés pour des usages internes et n'ont pas été prévus pour être mis à disposition d'autres groupes de recherche, ou seulement par l'intermédiaire de la description de l'algorithme utilisé.

Parmi ceux qui sont accessibles, MOSES [24] et SIMON [25,35] sont les plus élaborés et sembleraient convenir à l'étude que nous voulons mener. Malheureusement, la mise en oeuvre de ces derniers nous a montré qu'ils ne permettaient pas de mener facilement une étude statistique sur des dispositifs ayant un important désordre géométrique. En effet, sans tenir compte de la complexité inhérente à la description du dispositif lui-même, trop de paramètres de simulation sont modifiés lorsque l'on passe d'un dispositif à un autre. Cela nécessiterait un trop grand nombre d'interventions de notre part pour la caractérisation d'ensembles statistiques. Ces simulateurs sont plus orientés vers l'étude complète d'un circuit particulier que vers l'étude systématique de dispositifs plus génériques.

Par conséquent, afin de pouvoir caractériser l'effet du désordre sur des dispositifs multi-jonctions tunnel, il a été décidé de développer notre propre simulateur Monte Carlo. C'est donc ce travail qui constitue la base de mon travail de thèse.

## Bibliographie

- [1] T. Ito and S. Okazaki. “Pushing the limits of lithography”. *Nature*, 406, pp 1027–1031, 2000.
- [2] H.-S. P. Wong, D. J. Frank, P. M. Solomon, C. H. J. Wann, and J. J. Welser. “Nanoscale CMOS”. *Proc. IEEE*, 87(4), pp 537–570, 1999.
- [3] Y. Naveh and K. K. Likharev. “Modeling of 10-nm-scale ballistic MOSFET’s”. *IEEE Electron Dev. Lett.*, 21(5), pp 242–244, 2000.
- [4] K. K. Likharev. “Single-electron devices and their applications”. *Proc. IEEE*, 87(4), pp 606–632, 1999.
- [5] C. J. Gorter. “A possible explanation of the increase of the electrical resistance of thin metal films at low temperature and small field strengths”. *Physica*, 17, pp 777–780, 1951.
- [6] I. Giaever and R. H. Zeller. “Superconductivity of Small Tin Particles Measured by Tunneling”. *Phys. Rev. Lett.*, 20(26), pp 1504–1507, 1968.
- [7] A. Pépin, C. Vieu, M. Mejias, Y. Jin, F. Carcenac, J. Gierak, C. David, L. Couraud, H. Launois, A. S. Cordan, Y. Leroy, and A. Goltzené. “Temperature evolution of multiple tunnel junction devices made with disordered two-dimensional arrays of metallic islands”. *Appl. Phys. Lett.*, 74(20), pp 3047–3049, 1999.
- [8] W. Chen and H. Ahmed. “Fabrication and physics of 2 nm islands for single electron devices”. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 13(6), p 2883, 1995.
- [9] M. Mejias. *Fabrication et étude de dispositifs à blocage de Coulomb réalisés en combinant le dépôt de films granulaires d’or et la lithographie électronique à très haute résolution*. Thèse, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 1998.
- [10] M. H. Devoret and H. Grabert. “Introduction to single charge tunneling”. Dans M. H. Devoret and H. Grabert, editors, *Single charge tunneling : Coulomb blockade phenomena in nanostructure*, volume 294 of *Nato ASI Series*, chapitre 1, pages 1–20. Plenum Press, New York, 1992.
- [11] G.-L. Ingold and Y. V. Nazarov. “Charge tunneling rates in ultrasmall junctions”. Dans M. H. Devoret and H. Grabert, editors, *Single charge tunneling : Coulomb blockade phenomena in nanostructure*, volume 294 of *Nato ASI Series*, chapitre 2, pages 21–108. Plenum Press, New York, 1992.
- [12] G. Schön. “Single-electron tunneling”. Dans *Quantum transport and dissipation*, chapitre 3, pages 149–212. Viley-VCH, 1998.
- [13] K. Mullen, E. Ben-Jacob, R. C. Jaklevic, and Z. Schuss. “I-V characteristics of coupled ultrasmall-capacitance normal tunnel junctions”. *Phys. Rev. B*, 37(1), p 98, 1988.
- [14] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Oxford University Press, 1999.
- [15] M. Amman, E. Ben-Jacob, and K. Mullen. “Charge solitons in 1-D array of mesoscopic tunnel junctions”. *Phys. Lett. A*, 142(6), p 431, 1989.
- [16] N. S. Bakhvalov, G. S. Kazacha, K. K. Likharev, and S. I. Serdyukova. “Single-electron solitons in one-dimensional tunnel structures”. *Sov. Phys. JETP*, 68(3), p 581, 1989.



- [17] U. Geigenmüller and G. Schön. “Single-electron effects in arrays of normal tunnel junctions”. *EuroPhys. Lett.*, 10(8), p 765, 1989.
- [18] N. S. Bakhvalov, G. S. Kazacha, K. K. Likharev, and S. I. Serdyukova. “Statics and dynamics of single-electron solitons in two-dimensional arrays of ultrasmall tunnel junctions”. *Physica B*, 173, p 319, 1991.
- [19] L. J. Geerligs, V. F. Anderegg, P. A. M. Holweg, J. E. Mooij, H. Pothier, D. Esteve, C. Urbina, and M. H. Devoret. “Frequency-locked turnstile device for single electrons”. *Phys. Rev. Lett.*, 64(22), p 2691, 1990.
- [20] K. K. Likharev. “Correlated discrete transfer of single electrons in ultrasmall tunnel junctions”. *IBM J. Res. Develop.*, 32(1), p 144, 1988.
- [21] J. R. Tucker. “Complementary digital logic based on the ‘Coulomb blockade’”. *J. Appl. Phys.*, 72(9), pp 4399–4413, 1992.
- [22] N. Kuwamura, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi. “Simulation of single-electron logic circuits”. *Elec. Comm. Japan*, 77(9), p 65, 1994.
- [23] H. Fukui, M. Fujishima, and K. Hoh. “Simple and stable single-electron logic utilizing tunnel-junction load”. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 34, p 1345, 1995.
- [24] R. H. Chen, A. N. Korotkov, and K. K. Likharev. “Single-electron transistor logic”. *Appl. Phys. Lett.*, 68(14), p 1954, 1996.
- [25] C. Wasshuber and H. Kosina. “A single-electron devices and circuits simulator”. *Superlat. and Microstruc.*, 21(1), p 37, 1997.
- [26] J. P. Pekola, K. P. Hirvi, J. P. Kaupinen, , and M. A. Paalanen. “Thermometry by arrays of tunnel junctions”. *Phys. Rev. Lett.*, 73(21), p 2903, 1994.
- [27] K. P. Hirvi, J. P. Kaupinen, A. N. Korotkov, M. A. Paalanen, and J. P. Pekola. “Arrays of normal metal tunnel junctions in weak Coulomb blockade regime”. *Appl. Phys. Lett.*, 67(14), p 2096, 1995.
- [28] K. P. Hirvi, M. A. Paalanen, and J. P. Pekola. “Numerical investigation of one-dimensional tunnel junction arrays at temperatures above the Coulomb blockade regime”. *J. Appl. Phys.*, 80(1), p 256, 1996.
- [29] S. Farhangfar, K. P. Hirvi, J. P. Kaupinen, J. P. Pekola, , J. J. Toppari, D. V. Averin, and A. N. Korotkov. “One dimensional arrays and solitary tunnel junctions in the weak Coulomb blockage regime : CBT thermometry”. *J. Low Temp. Phys.*, 108(1), p 191, 1997.
- [30] X. Wang, V. P. Roychowdhury, and Pratheep Balasingam. “Scalable massively parallel algorithms for computational nanoelectronics”. *Parallel Comp.*, 22, pp 1931–1963, 1997.
- [31] L. R. C. Fonseca, A. N. Korotkov, K. K. Likharev, and A. A. Odintsov. “A numerical study of the dynamics and statistics of single electron systems”. *J. Appl. Phys.*, 78(5), p 3238, 1995.
- [32] L. R. C. Fonseca, A. N. Korotkov, and K. K. Likharev. “A numerical study of the accuracy of single-electron current standards”. *J. Appl. Phys.*, 79(12), p 9155, 1996.
- [33] A. S. Cordan and A. Goltzené. “Optimization of the master equation set for a multidot tunnel structure”. *Eur. Phys. J. AP*, 7, p 137, 1999.

- 
- [34] M. B. A. Jalil and M. Wagner. “Reduced master equation analysis of multiple-tunnel junction single-electron memory device”. *J. Appl. Phys.*, 88(2), p 869, 2000.
  - [35] C. Wasshuber, H. Kosina, and S. Selberherr. “SIMON - A simulator for single-electron tunnel devices and circuits”. *IEEE Trans. Comp. Aided Design Integr. Circ. Sys.*, 16(9), p 937, 1997.
  - [36] M. Kirihara, K. Nakazato, and M. Wagner. “Hybrid circuit simulator including a model for single electron tunneling devices”. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 38, p 2028, 1999.



# Chapitre 2

## Théorie

Le but de ce chapitre est de présenter la théorie sous-jacente à la réalisation d'un simulateur de dispositifs multi-jonctions tunnel. Il présente les différentes notions entrant dans le fonctionnement de ce type de dispositifs, ainsi que les approximations nécessaires à la modélisation des objets devant être incorporés dans le simulateur, et surtout leur justification.

### 2.1 Blocage de Coulomb

Le phénomène de blocage de Coulomb résulte de la combinaison de propriétés classiques et quantiques. L'aspect classique repose sur l'interaction coulombienne de charge sur des conducteurs, imposant qu'une charge apporte une énergie  $E_c = e^2/2C$  lorsqu'elle arrive sur un conducteur de capacité  $C$ . L'aspect quantique prend en compte le phénomène d'"effet tunnel". C'est la combinaison de ces effets qui permet d'envisager le contrôle individuel du transport électronique. Plusieurs dispositifs ont été proposés.

#### 2.1.1 Boîte à électrons

Le dispositif le plus simple faisant intervenir le blocage de Coulomb est la boîte à électrons, schématisée sur la figure 2.1. Elle met en oeuvre une jonction tunnel, caractérisée ici par sa capacité  $C_j$  et sa résistance  $R_{Tj}$ , une capacité de charge  $C_G$  et une source de tension  $V$ . Le noeud (ou plot) formé entre la jonction et la capacité de charge, permet le stockage d'électrons ; on le caractérise par le nombre  $n$  d'électrons excédentaires par rapport au plot neutre.

Lorsque la tension  $V$  est nulle, le système étant initialement neutre, on a alors  $n = 0$ . Lorsqu'on applique une tension non nulle, le noeud voit son potentiel passer à  $V_p = VC_G/(C_j + C_G)$ . *A priori*, la différence de potentiel aux bornes de la jonction tunnel facilite d'autant plus le passage des électrons que la valeur de  $V$  est élevée. Néanmoins, un électron ne peut passer par effet tunnel à travers la jonction que si l'énergie de charge est suffisante.

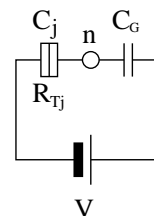


FIG. 2.1: Schéma d'une boîte à électrons.

L'énergie de charge du système comportant  $n$  électrons sur le plot est donnée par la relation suivante ( $e > 0$ ) :

$$E_{ch}(n, V) = \frac{(ne - C_G V)^2}{2(C_j + C_G)} . \quad (2.1)$$

Pour un nombre  $n$  d'électrons donné, l'énergie du système évolue selon une parabole en fonction de la tension appliquée  $V$ . La figure 2.2 présente l'énergie du système en fonction du nombre d'électrons sur le plot et du potentiel appliqué. Lorsque  $n$  électrons sont présents sur le plot, pour une tension comprise entre  $(n - 1/2)e/C_G$  et  $(n + 1/2)e/C_G$ , l'ajout d'un électron supplémentaire coûterait trop d'énergie au système (passage à la parabole supérieure). En effet, il faut vaincre la répulsion coulombienne créée par les  $n$  électrons. Le système présente alors un blocage de Coulomb : on ne peut pas ajouter un électron supplémentaire. Par contre, lorsque la tension est supérieure à  $(n + 1/2)e/C_G$ , un électron de plus pourra entrer sur le plot, pour minimiser l'énergie.

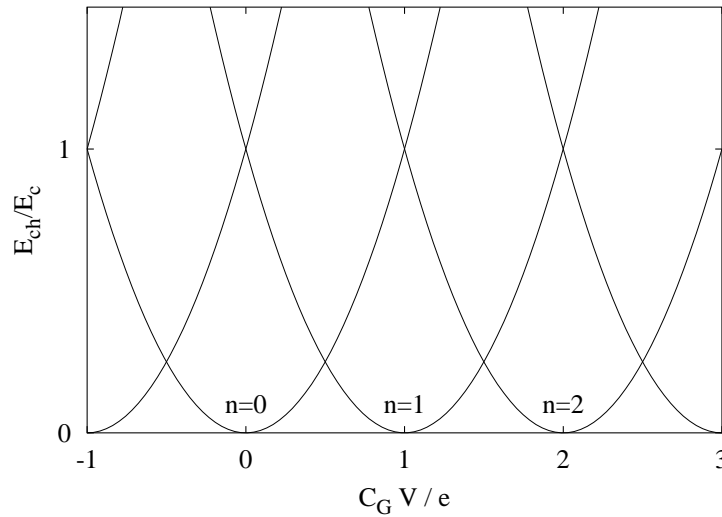


FIG. 2.2: Énergie de charge de la boîte à électrons. Les paraboles représentent l'énergie du système pour chaque valeur de  $n$ .

Le nombre d'électrons présents sur le plot est donc parfaitement déterminé par la tension appliquée au dispositif. Le nombre moyen d'électrons sur le plot peut être déterminé, à une température donnée, par la relation suivante :

$$\langle n \rangle (T) = \frac{\sum_n n e^{-\frac{E_{ch}(n, V)}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{E_{ch}(n, V)}{k_B T}}} . \quad (2.2)$$

Elle permet de déterminer l'évolution du remplissage du plot en fonction de la température, comme le montre la figure 2.3. En effet, l'énergie thermique modifie légèrement la tension pour laquelle l'électron supplémentaire est ajouté.

Un tel système a été très largement étudié théoriquement [1–4] et expérimentalement [5–8]. La compréhension de ce circuit a permis la mise au point du transistor à un électron.

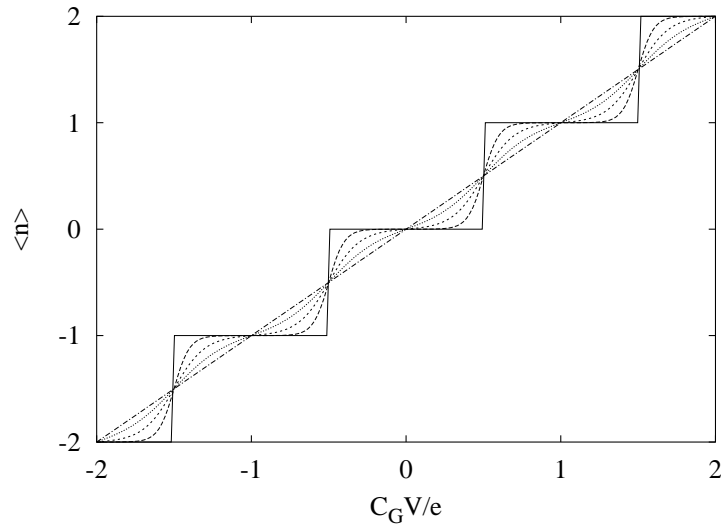


FIG. 2.3: Évolution du nombre moyen d'électrons dans la boîte avec la tension appliquée aux électrodes. L'effet de la température est d'arrondir les marches. Nous avons tracé les courbes pour des valeurs de  $k_B T/E_c$  de 0 (trait continu), 0.1, 0.2, 0.33 et 1.

### 2.1.2 Transistor à un électron

La juxtaposition de deux boîtes à électron permet la constitution d'un circuit comportant deux jonctions tunnel, comme illustré sur la figure 2.4. Ce dispositif permet de contrôler le courant au travers des jonctions tunnel en fonction du potentiel appliqué sur l'électrode de grille  $V_G$ , un peu comme pour un transistor [1–3].

A température nulle, le passage d'un électron à travers le dispositif est conditionné par la différence de potentiel entre source et drain ainsi que par l'énergie de charge ajoutée au plot central. En effet, un électron supplémentaire sur le plot met en oeuvre une énergie  $E_c = e^2/2C$  où  $C = C_D + C_S + C_G$ . Si cette énergie est supérieure à l'écart d'énergie entre la source et le plot, aucun électron ne peut passer par effet tunnel sur le plot : c'est le blocage de Coulomb (Fig. 2.5a).

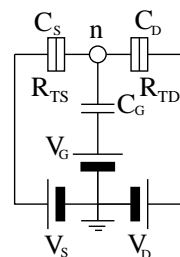


FIG. 2.4: Schéma d'un transistor à un électron.

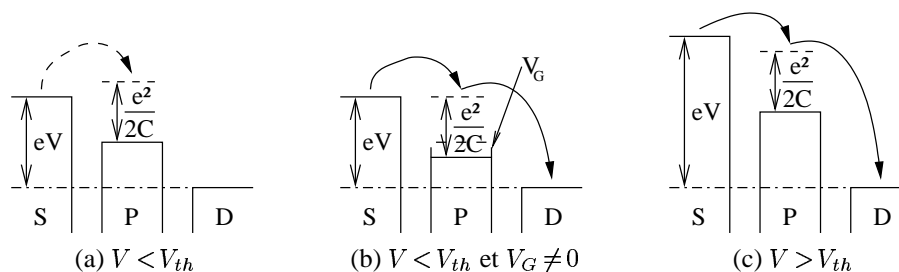


FIG. 2.5: Schéma de fonctionnement d'un transistor à un électron pour  $T = 0 K$ . Nous notons  $S$  l'électrode de source,  $D$  l'électrode de drain et  $P$  pour le plot. (a) Si la tension est inférieure à  $V_{th}$ , aucun électron ne peut transiter sur le plot, le système ne peut fournir  $E_c$ . (b) La tension de grille permet d'abaisser l'énergie du plot de façon à ce que l'énergie  $E_c$  puisse être ajoutée au plot. (c) La tension dépasse  $V_{th}$ , l'énergie  $E_c$  peut être ajoutée au plot sans l'aide de la grille.

Si par contre l'écart d'énergie est supérieur à  $E_c$ , l'électron peut passer par effet tunnel sur le plot, puis vers le drain : il y a conduction (Fig. 2.5c). Nous pouvons alors définir une tension de seuil  $V_{th}$ , tension pour laquelle l'écart d'énergie entre la source et le plot correspond exactement à  $E_c$ .

Lorsque l'on est dans la zone de blocage de Coulomb, il est possible de forcer la conduction dans le transistor en jouant sur la tension de grille  $V_G$ . Dans ce cas, l'énergie du plot est diminuée de façon à ce que l'on puisse ajouter  $E_c$  sans rompre la conservation de l'énergie (Fig. 2.5b).

La figure 2.6 illustre le fonctionnement du transistor, en représentant le courant dans le dispositif en fonction de la tension de grille et de la différence de potentiel entre drain et source. Pour une tension de grille  $V_G$  nulle, nous observons bien la zone de blocage de Coulomb, ainsi que la conduction à un électron. Pour une tension  $V$  fixée, le rôle de la grille apparaît clairement : en effet, les zones de blocage de Coulomb lorsque  $V_G = 0$  deviennent partiellement des zones de conduction si  $V_G \neq 0$ .

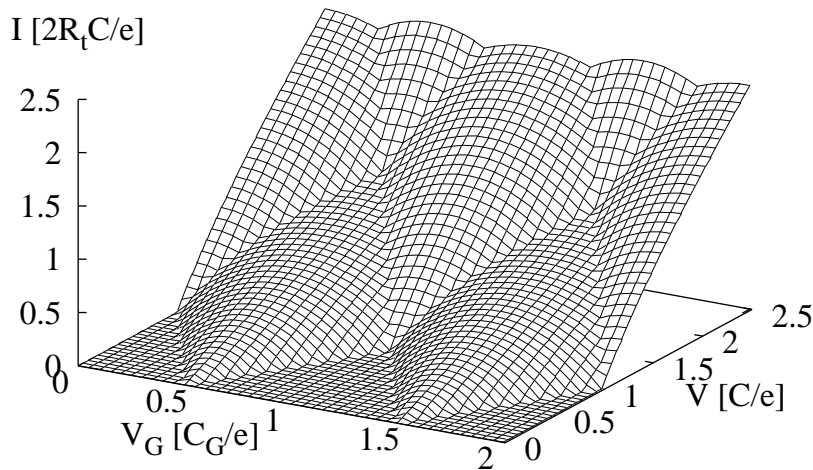


FIG. 2.6: Courbe du courant dans le transistor en fonction de la tension de grille et de la tension drain-source (en échelles réduites). Le courant est donné pour  $T = 0 K$  dans le cas d'un transistor symétrique ( $C_D = C_S$  et  $R_{TD} = R_{TS}$  – voir Fig. 2.4 –).

Lorsque la température  $T$  n'est plus nulle, l'agitation thermique peut permettre le passage d'un électron pour des tensions inférieures au seuil  $V_{th}(0 K)$ . Pour que le blocage de Coulomb persiste à des températures non nulles, il est donc nécessaire d'avoir une énergie de charge  $E_c$  suffisamment grande devant l'agitation thermique, soit  $E_c \gg k_B T$ . A température ambiante, cela nécessite une énergie de charge de l'ordre de  $0.3 eV$ , ce qui implique des capacités de l'ordre de  $3 \cdot 10^{-19} F$ . Pour avoir cette valeur de capacité, il faut travailler avec des plots de l'ordre du nanomètre.

De nombreux travaux expérimentaux portent sur des transistors à un électron, mais la plupart de ceux-ci fonctionnent à des températures très basses. Le contrôle des dimensions par lithographie ne permet pas en effet d'atteindre les dimensions requises pour créer deux jonctions tunnel avec un plot de faible capacité [9–12].

## 2.2 Dispositifs à réseaux de nano-plots

Les dispositifs précédents ne sont composés que d'un seul plot, ce qui entraîne des tensions de seuil  $V_{th}$  faibles. Un gain est attendu sur la valeur du seuil si l'on utilise des dispositifs multi-plots. En effet, la différence de tension entre deux plots successifs peut rester du même ordre de grandeur que pour les dispositifs précédents, mais avec une tension entre les électrodes plus grande.

Les dispositifs étudiés ici sont formés par des réseaux de nano-plots conducteurs au sein d'un isolant, placés entre des électrodes. Un schéma de ce type de dispositif est donné sur la figure 2.7.

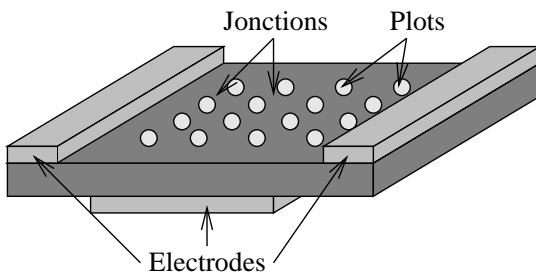


FIG. 2.7: Réseau plan de nano-plots. On retrouve les éléments de base des dispositifs étudiés : électrodes, plots, jonctions.

Tout comme pour les dispositifs décrits précédemment, nous cherchons à déterminer les caractéristiques électriques des réseaux de nano-plots, en particulier les courbes  $I(V)$ , permettant d'extraire la tension de seuil  $V_{th}$  du dispositif.

Afin d'être en mesure de décrire le transport électronique dans de telles structures, il est nécessaire d'établir un certain nombre d'hypothèses pour les éléments de base du système.

### 2.2.1 Source et drain

Les électrodes de source et de drain sont métalliques, et de par leurs dimensions constituent des réservoirs d'électrons à l'équilibre thermodynamique. Les tailles des électrodes sont à l'échelle du micromètre. Elles forment donc un métal au sens macroscopique, où les niveaux d'énergie sont continus jusqu'au niveau de Fermi. Les électrons de conduction existent en nombre suffisant pour le transport à travers le dispositif étudié et ont tous une masse effective  $m^*$  qui est approximativement égale à la masse  $m_0$  d'un électron libre. Le potentiel chimique des électrodes est fixé par une source de tension extérieure  $V$ , et a pour valeur  $\mu = -eV$ .

L'électrode de grille, qui n'a pour rôle que de contrôler le potentiel de la grille est elle aussi un réservoir à l'équilibre thermodynamique. Elle a les mêmes propriétés que les électrodes de source et de drain, mais étant isolée du réseau de plots par une couche isolante épaisse, aucun électron ne peut s'en échapper.

### 2.2.2 Plots

Les plots peuvent être assimilés à des sphères de petites dimensions (de l'ordre du nanomètre) formées de matériaux métalliques ou semiconducteurs.

Pour un plot d'or de rayon  $r \simeq 3 \text{ nm}$ , chaque atome occupant environ  $16.9 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3$ , près de 6700 atomes peuvent fournir au moins un électron de conduction. Les plots sont donc considérés comme des accumulateurs de charges.



Pour un métal idéal, l'énergie d'un électron particulier est donnée par  $E = \hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)/2m$ , où  $k_i$  représente le mode de l'électron dans la direction  $i = \{x, y, z\}$ ,  $k_i$  étant quantifié. Cette énergie est la même pour plusieurs électrons (différentes combinaisons de  $\{k_i\}$ ), et il ne reste plus que  $n_e = 1000$  à  $2000$  niveaux d'énergie distincts pour des énergies allant de  $0$  eV jusqu'au niveau de Fermi du conducteur,  $E_F$ . Il existe donc un écart entre niveaux successifs de l'ordre de  $\delta E = E_F/n_e$ . Dans le cas de l'or ( $E_F \sim 5$  eV),  $\delta E \simeq 2.5$  meV à  $5$  meV, ce qui équivaut à des températures  $T = \delta E/k_B$  de l'ordre de  $25$  K à  $50$  K.

Dans le cadre de la théorie orthodoxe<sup>1</sup>, les plots sont considérés comme un métal idéal sans discrétisation des niveaux. Cette hypothèse n'est donc validée qu'au-delà d'une trentaine de Kelvin, l'agitation thermique masquant alors l'écart entre niveaux.

Tout comme pour les électrodes, nous considérons que les électrons de conduction des plots ont une masse effective  $m^*$  approximativement égale à la masse  $m_0$  d'un électron libre. Dans la suite, nous utiliserons simplement la notation  $m$  pour la masse des électrons.

### 2.2.3 Jonctions

Les jonctions sont formées par un isolant entre deux conducteurs (deux plots, ou un plot et l'une des électrodes). De manière générale, le transport d'électrons entre deux conducteurs est rendu possible par la combinaison de trois phénomènes :

- la conductivité du matériau,
- l'émission thermoélectrique,
- l'effet tunnel.

La conductivité du matériau n'entre pas en jeu ici, puisque les deux conducteurs sont reliés par un isolant. L'hypothèse d'avoir un bon isolant nous permet de postuler que la conductivité est nulle.

L'émission thermoélectrique, comme son nom l'indique, correspond à l'émission d'électrons par agitation thermique [13,14]. L'énergie cinétique des électrons est telle que ceux-ci peuvent passer au-dessus de la barrière de potentiel du matériau reliant les deux conducteurs. Ce phénomène a lieu en principe à haute température. Ici, l'écart d'énergie entre les conducteurs et l'isolant sera supposé grand devant l'agitation thermique, et l'effet thermoélectrique pourra être négligé. En effet, à température ambiante ( $T = 300$  K), l'énergie thermique vaut autour de  $30$  meV, ce qui est très faible par rapport aux hauteurs de barrière considérées (quelques eV).

Seul l'effet tunnel intervient donc dans le cas qui nous intéresse. Il apparaît lorsque les dimensions mises en jeu sont suffisamment faibles pour ne pas pouvoir ignorer les effets quantiques des objets considérés.

Les plots sont supposés être des sphères conductrices, de rayon  $r_i$ , entourées d'un isolant, et séparées par une distance  $d$ . Lorsque celle-ci est faible, l'isolant ne peut empêcher un électron de passer d'une sphère à l'autre par effet tunnel. L'espace inter-plots constitue alors une jonction tunnel (Fig. 2.8).

Une jonction tunnel peut être représentée par une résistance tunnel  $R_T$ , qui quantifie la fuite d'électrons dans l'isolant, ainsi que par une capacité  $C$ , caractérisant l'influence électrostatique des conducteurs.

---

<sup>1</sup>voir le paragraphe 2.2.4.

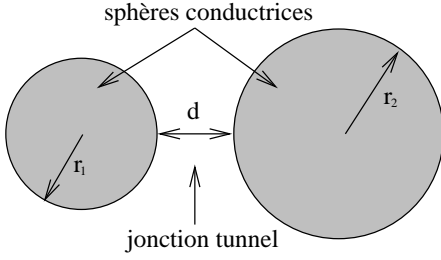


FIG. 2.8: *Jonction tunnel située entre deux plots. Les sphères séparées d'une distance  $d$  ont des rayons  $r_1$  et  $r_2$ .*

### 2.2.3.1 Résistance

La faible épaisseur d'isolant présente entre les plots empêche la conduction, mais en appliquant une différence de tension non nulle l'effet tunnel permet à des électrons de traverser cet isolant pour aller d'un plot à l'autre. Le courant résultant de ce mouvement d'électrons est relié à la différence de potentiel entre les plots par la relation  $V = R_T I$ . Nous en déduisons alors la valeur de la résistance tunnel  $R_T$  de la jonction. Pour pouvoir effectuer ce calcul, il faut caractériser l'effet tunnel en fonction de l'épaisseur d'isolant et des matériaux utilisés. Les détails du calcul de  $R_T$  sont donnés au paragraphe 2.3.3, dans la section réservée à l'effet tunnel.

Enfin, nous pouvons considérer les électrons comme étant localisés sur les plots, à condition que la résistance tunnel des jonctions soit grande devant le quantum de résistivité,  $R_T \gg R_K = h/e^2 = 25.8 \text{ k}\Omega$  [1,2]. De cette façon, les plots peuvent être assimilés à des conducteurs bien délimités.

### 2.2.3.2 Capacité de jonction

Nous cherchons ici à déterminer la capacité d'une jonction formée par deux conducteurs sphériques (Fig. 2.8), comme nous le ferions pour deux conducteurs plans en regard. Dans le problème qui nous intéresse, la capacité  $C$  recherchée correspond à la capacité d'influence du système de conducteurs formé par les deux sphères. En effet, un tel système de deux conducteurs est caractérisé, du point de vue électrostatique, par la matrice capacité suivante :

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_{1,1} & -C_{1,2} \\ -C_{2,1} & C_{2,2} \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad C_{1,2} = C_{2,1} = C, \quad (2.3)$$

où  $C_{i,i}$  représente la capacité propre du plot  $i$ .

Lorsque la distance  $d$  entre les plots devient très grande, on doit retrouver pour  $C_{i,i}$  la capacité d'une sphère isolée de rayon  $r_i$ , soit :

$$\lim_{d \rightarrow \infty} C_{i,i} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_i, \quad (2.4)$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide, et  $\epsilon_r$  la permittivité relative du milieu entourant les plots.

La détermination des coefficients de la matrice  $\mathbf{C}$  (2.3) est un problème bien connu de l'électrostatique. Il est résolu, dans le cas de deux sphères de tailles quelconques, intérieures ou extérieures, par la méthode des charges images [15]. Dans le cas de deux sphères extérieures, il

conduit à la solution suivante :

$$C_{1,1} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_1 r_2 \sinh(\alpha) \sum_{n=1}^{\infty} [r_2 \sinh(n\alpha) + r_1 \sinh((n-1)\alpha)]^{-1} \quad (2.5)$$

$$C_{1,2} = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_1 r_2}{r_1 + d + r_2} \sinh(\alpha) \sum_{n=1}^{\infty} [\sinh(n\alpha)]^{-1} \quad (2.6)$$

$$C_{2,2} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_1 r_2 \sinh(\alpha) \sum_{n=1}^{\infty} [r_1 \sinh(n\alpha) + r_2 \sinh((n-1)\alpha)]^{-1} \quad (2.7)$$

$$\text{avec} \quad \cosh(\alpha) = \frac{d(2(r_1 + r_2) + d)}{2r_1 r_2} + 1. \quad (2.8)$$

Nous en déduisons donc la capacité  $C$  de la jonction formée par deux sphères de rayons  $r_1$  et  $r_2$  distantes de  $d$  :

$$C = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_1 r_2}{r_1 + d + r_2} \sinh\left(\operatorname{acosh}\left(\frac{d(2(r_1 + r_2) + d)}{2r_1 r_2} + 1\right)\right) \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sinh\left(n \operatorname{acosh}\left(\frac{d(2(r_1 + r_2) + d)}{2r_1 r_2} + 1\right)\right) \right]^{-1}. \quad (2.9)$$

### *Cas particulier de sphères identiques*

Dans le cas où les sphères sont identiques, c'est à dire qu'elles ont même rayon  $r$ , le calcul conduit aux solutions suivantes (où  $C_{2,2} = C_{1,1}$ ) :

$$C_{1,1} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r \sinh\left(\operatorname{acosh}\left(1 + \frac{d}{2r}\right)\right) \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sinh\left((2n-1) \operatorname{acosh}\left(1 + \frac{d}{2r}\right)\right) \right]^{-1} \quad (2.10)$$

$$C_{1,2} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r \sinh\left(\operatorname{acosh}\left(1 + \frac{d}{2r}\right)\right) \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sinh\left(2n \operatorname{acosh}\left(1 + \frac{d}{2r}\right)\right) \right]^{-1}. \quad (2.11)$$

La formule de la capacité  $C$  de la jonction est alors donnée par :

$$C = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r \sinh\left(\operatorname{acosh}\left(1 + \frac{d}{2r}\right)\right) \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sinh\left(2n \operatorname{acosh}\left(1 + \frac{d}{2r}\right)\right) \right]^{-1}. \quad (2.12)$$

### *Cas particulier d'une sphère et d'une électrode*

Pour les plots du dispositif qui sont situés près des électrodes, la capacité de la jonction à considérer n'est plus la même. En effet la taille de l'électrode étant supérieure à celle du plot, cela revient à avoir l'un des rayons très grand devant l'autre, par exemple  $r_1 = r$  et  $r_2 \rightarrow \infty$ . Dans ce cas, le calcul conduit aux solutions :

$$C_{1,1} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r \sinh(\alpha) \sum_{n=1}^{\infty} [\sinh(n\alpha)]^{-1} \quad (2.13)$$

$$C_{1,2} = C_{1,1}, \quad (2.14)$$

où  $\alpha$  est déduit de l'équation (2.8), en prenant la limite  $r_2 \rightarrow \infty$  :

$$\cosh(\alpha) = 1 + \frac{d}{r}. \quad (2.15)$$

La capacité  $C$  est alors donnée par :

$$C = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r r \sinh\left(\operatorname{acosh}\left(\frac{d}{2r} + 1\right)\right) \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sinh\left(n \operatorname{acosh}\left(\frac{d}{r} + 1\right)\right) \right]^{-1}. \quad (2.16)$$

Le calcul mené ici donne uniquement une formulation de la capacité d'une jonction prise entre deux plots seuls. En toute rigueur, la capacité de cette jonction dépend de la présence d'autres plots dans son voisinage. Ce type de calcul n'est plus possible analytiquement, mais requiert des approches numériques.

Les dispositifs étudiés dans cette thèse nécessiteraient un calcul des capacités de toutes les jonctions par un solveur volumique de l'équation de Poisson. Ce calcul devrait être répété pour chaque configuration de plots, le désordre géométrique empêchant toute généralisation des résultats. Il serait donc très coûteux en temps de simulation de tenir compte des capacités réelles. De plus, les outils de ce type à notre disposition lors du démarrage de ce travail ne permettraient pas d'atteindre toutes les tailles des réseaux considérés ici. Il a donc été choisi de faire volontairement une approximation sur l'estimation des capacités pour avoir une plus grande souplesse de simulation. Néanmoins, l'erreur faite ne dépasse pas un facteur 2, de par la dépendance des capacités avec les distances mises en oeuvre [16]. Ce facteur est à mettre en correspondance avec l'effet des incertitudes sur les dimensions qui entrent en jeu ici sur les résistances tunnel, qui sont bien plus importantes.

### 2.2.4 Théorie orthodoxe

La théorie orthodoxe, permettant le calcul du taux de transition tunnel (section suivante), se base sur les hypothèses suivantes [1,2] :

- Les électrons des conducteurs (plots) doivent être localisés sur ces derniers, ce qui implique  $R_T \gg R_K$ .
- Les conducteurs doivent être des conducteurs idéaux à l'équilibre thermodynamique, c'est à dire que les électrons doivent avoir une énergie continue jusqu'au niveau de Fermi.
- Le temps de relaxation des charges doit être court devant le temps séparant deux événements tunnel, de manière à s'assurer que l'équilibre thermodynamique des conducteurs soit retrouvé.
- Les événements sont supposés décorrélés, ce qui revient à négliger le *cotunneling*, où deux électrons peuvent être en mouvement en même temps (en fait, le *cotunneling* décroît rapidement avec le nombre de plots considérés).

## 2.3 Effet tunnel

Vu les dimensions considérées dans nos dispositifs, la mécanique quantique est indispensable pour expliquer les phénomènes observés ici, en particulier la conduction discrète reposant sur l'effet tunnel [17,18].

Une modélisation quantique complète dans l'espace à trois dimensions mène à des calculs extrêmement lourds. Pour des systèmes aussi complexes que les nôtres, il faudra nécessairement faire, ici aussi, des approximations. Nous justifierons ces dernières au paragraphe 2.3.3.

### 2.3.1 Transmission tunnel

Lorsqu'un électron métallique rencontre un matériau isolant, ce dernier apparaît comme une marche de potentiel vis-à-vis de la particule. Lorsque deux conducteurs sont séparés par un isolant, une barrière de potentiel est créée (Fig 2.9a).

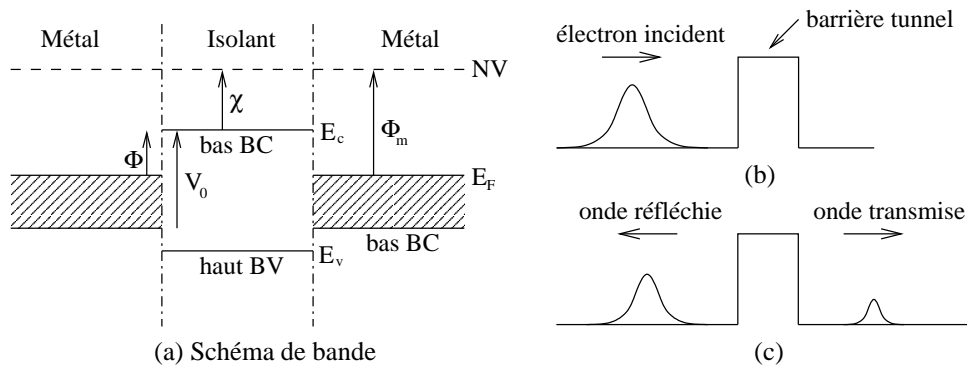


FIG. 2.9: Barrière de potentiel créée par une jonction Métal/Isolant/Métal. (a) Schéma idéal des bandes d'énergie dans une jonction Métal/Isolant/Métal. Nous avons précisé le niveau de la bande de valence (BV) de l'isolant, ainsi que les bandes de conduction (BC) du métal et de l'isolant et le niveau du vide (NV). (b) Un électron incident se dirige vers la barrière. (c) Après la rencontre entre l'électron et la barrière, une partie de l'onde est réfléchie alors que l'autre est transmise avec une faible probabilité.

Les énergies des bandes de conduction des métaux, ainsi que des bandes de valence et de conduction de l'isolant, sont définies par rapport à une référence commune, le niveau du vide (NV). Dans le métal, le haut de la bande de conduction correspond au niveau de Fermi ; il est caractérisé par le travail d'extraction  $\Phi_m$ . Le bas de la bande de conduction de l'isolant est repéré par l'affinité électronique  $\chi$  du semiconducteur. L'énergie cinétique des porteurs dans le métal est défini par rapport au bas de la bande de conduction du métal. Le niveau de Fermi est alors déterminé par l'énergie  $E_F$ , et la hauteur de la barrière  $V_0$  [17] s'écrit :

$$V_0 = E_F + (\Phi_m - \chi) = E_F + \Phi, \quad (2.17)$$

où  $\Phi$  est la hauteur de barrière effective pour les électrons d'énergie  $E_F$ . Pour simplifier le schéma, nous ne représentons plus que la barrière de hauteur  $V_0$ , comme sur les figures 2.9b et 2.9c. Même si la particule incidente a une énergie inférieure à la hauteur de cette barrière, la fonction d'onde de la particule aura une amplitude non nulle dans le second métal, après la traversée de la barrière (Fig 2.9c) [17,18].

A une dimension, le coefficient de transmission tunnel est donné par le module du rapport du courant de probabilité de l'onde transmise sur le courant de probabilité de l'onde incidente [17,19] :

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right|, \quad (2.18)$$

ce qui peut encore s'écrire avec les amplitudes des ondes incidente et transmise :

$$T = |t|^2 = \frac{k_t}{k_i} \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2, \quad (2.19)$$

où  $k_t$  et  $k_i$  sont respectivement les vecteurs d'onde de l'électron dans la zone transmises et incidente. Ce rapport définit la probabilité qu'a l'électron de traverser la barrière.

La détermination de la fonction d'onde  $\psi$  de l'électron soumis à une barrière de potentiel passe par la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire [17,18]

$$H\psi = E\psi, \quad (2.20)$$

et permet d'explicitier l'équation (2.19) à l'aide des paramètres du problème considéré. Le calcul dans le cas d'une barrière rectangulaire conduit au résultat suivant<sup>1</sup> :

$$T = \frac{4E\Phi}{4E\Phi + (E + \Phi)^2 \sinh(\kappa d)^2} \quad \text{où} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m\Phi}{\hbar^2}}, \quad (2.21)$$

$\Phi = V_0 - E$  est la différence entre la hauteur de la barrière de potentiel et l'énergie  $E$  de la particule, et  $d$  est la largeur de la barrière.

Dans le cas d'une barrière rectangulaire, le calcul peut se mener de façon analytique, mais pour d'autres formes de potentiel, ce n'est plus toujours possible. Il existe différentes méthodes permettant de calculer numériquement le coefficient de transmission de telles barrières [20]. Citons par exemple la méthode des matrices de transfert [21,22] et la méthode plus complexe WKB [23,24].

### 2.3.2 Taux de transition tunnel

Pour simplifier le calcul, nous allons considérer le cas du transistor à un électron déjà présenté dans la section 2.1, figure 2.4. L'Hamiltonien du système s'écrit [3] :

$$H = H_S + H_P + H_D + H_{ch} + H_T, \quad (2.22)$$

où  $H_S$ ,  $H_P$  et  $H_D$  décrivent l'état des électrons, respectivement de l'électrode source, du plot et du drain, sans aucune interaction, et ayant des vecteurs d'onde notés respectivement  $k$ ,  $q$  et  $k'$  :

$$H_S = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}, \quad H_P = \sum_{q,\sigma} \epsilon_q c_{q,\sigma}^\dagger c_{q,\sigma}, \quad H_D = \sum_{k',\sigma} \epsilon_{k'} c_{k',\sigma}^\dagger c_{k',\sigma}, \quad (2.23)$$

où  $\epsilon_i$  est l'énergie d'un électron de vecteur d'onde  $i$ , et  $c_{i,\sigma}^\dagger$  et  $c_{i,\sigma}$  sont les opérateurs de création, et d'annihilation d'un électron de vecteur d'onde  $i$  et de spin  $\sigma$ .

<sup>1</sup>voir l'annexe C pour les détails.

L'interaction coulombienne est prise en compte dans  $H_{ch}$  et ne dépend que de la charge totale sur le plot :

$$H_{ch} = \frac{(\hat{n} - Q_G)^2}{2C} \quad \text{avec} \quad \hat{n} = \sum_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} - N_+, \quad (2.24)$$

où  $N_+$  représente la charge totale des ions positifs de l'îlot, et  $Q_G = C_G V_G$  représente l'effet de la grille.

Le transfert de charge est décrit dans l'Hamiltonien tunnel standard, qui s'écrit, pour l'échange d'un électron à travers la jonction source-plot, entre les états  $k$  et  $q$  :

$$H_{T,S,P} = \sum_{k,q,\sigma} t_{k,q} c_{k,\sigma}^\dagger c_{q,\sigma} + \text{h.c.}, \quad (2.25)$$

où  $t_{k,q}$  est l'élément de la matrice de transfert tunnel d'un électron quittant la source dans l'état  $k$  et arrivant au plot dans l'état  $q$ .

Le taux de transition est défini par l'utilisation de la règle d'or de Fermi [25,26] en traitant  $H_T$  de manière perturbative. En considérant le passage d'un électron de l'état  $k$  sur la source à un état  $q$  sur le plot (faisant passer le nombre d'électrons sur le plot de  $n$  à  $n + 1$ ), on obtient :

$$\Gamma_{k \rightarrow q}^{S,P}(n) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\sigma} |t_{k,q}|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_q - \delta E_{ch}). \quad (2.26)$$

où  $\delta E_{ch}$  représente la variation d'énergie associée au changement de configuration des charges dans le système :

$$\delta E_{ch} = E_{ch}(n + 1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G) - eV_S. \quad (2.27)$$

Le taux de transition total faisant passer le nombre d'électrons sur le plot de  $n$  à  $n + 1$  peut alors être déduit, en tenant compte de la densité des états occupés de la source,  $D_S(\epsilon_k) f(\epsilon_k)$ , et de la densité des états inoccupés du plot,  $D_P(\epsilon_q) (1 - f(\epsilon_q))$  :

$$\Gamma_{S,P}(n) = \frac{4\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_k \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_q |t_{k,q}|^2 D_S(\epsilon_k) D_P(\epsilon_q) f(\epsilon_k) (1 - f(\epsilon_q)) \delta(\epsilon_k - \epsilon_q - \delta E_{ch}), \quad (2.28)$$

où  $f(\epsilon)$  est la distribution de Fermi-Dirac  $\left( f(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\epsilon - \epsilon_F)/k_B T}} \right)$ .

Nous supposons que l'élément  $t_{k,q}$  de la matrice tunnel est relativement indépendant de  $\epsilon_k$  et  $\epsilon_q$  et peut être remplacé par une valeur moyenne  $t$ , prise au niveau de Fermi. De même, les densités d'état peuvent être considérées comme constantes, égales à leur valeur au niveau de Fermi. Nous pouvons alors transférer ces termes à l'extérieur de l'intégrale :

$$\Gamma_{S,P}(n) = \frac{4\pi}{\hbar} |t|^2 D_S D_P \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon f(\epsilon) (1 - f(\epsilon - \delta E_{ch})). \quad (2.29)$$

En intégrant cette dernière équation, nous obtenons le taux de transition tunnel pour le transistor à un électron :

$$\Gamma_{S,P}(n) = \frac{1}{e^2 R_{T,S,P}} \frac{-\delta E_{ch}}{1 - \exp\left(\frac{\delta E_{ch}}{k_B T}\right)}, \quad (2.30)$$

où  $R_{TS,P}$  représente la résistance tunnel de la jonction source-plot, donnée par :

$$R_{TS,P} = \frac{\hbar}{4\pi e^2 |t|^2 D_S D_P} . \quad (2.31)$$

La généralisation de l'équation (2.30) au cas de plusieurs plots conduit au taux tunnel de la théorie orthodoxe.  $\delta E_{ch}$  est la variation d'énergie libre  $\Delta F$  qui inclut la variation énergétique du système engendrée par le mouvement tunnel :

$$\Gamma(\Delta F) = \frac{1}{e^2 R_T} \frac{-\Delta F}{1 - \exp\left(\frac{\Delta F}{k_B T}\right)} . \quad (2.32)$$

### 2.3.3 Résistance tunnel

Ainsi que nous l'avons annoncé au début de cette partie, il est pour l'instant impossible de résoudre ce problème sans approximation. Nous présentons ici plusieurs approximations avec leurs justifications détaillées. Puis nous donnerons une comparaison des évaluations dans un cas concret.

Le calcul des résistances tunnel est effectué à une température nulle. En effet, l'influence de la température est déjà prise en compte dans le calcul du taux de transition tunnel, comme nous pouvons le voir sur l'équation (2.29) avec l'utilisation de la distribution de Fermi-Dirac.

Dans tous les cas, nous admettrons qu'il y a un électron libre par atome. Cela correspond à une première bande électronique à moitié remplie, donc  $k_F \lesssim \pi/a$ , avec  $a$  le paramètre de maille du réseau.

#### 2.3.3.1 Calcul semi-classique

##### *Hypothèses*

Nous admettons que l'électron proche de  $E_F$  a une extension  $\lambda_F$  très faible par rapport aux dimensions des plots ( $\lambda_F \simeq 2\pi/k_F$ ). En prenant  $k_F \simeq \pi/a$ , on aura une extension de l'ordre de  $\lambda_F \simeq 2a$  ; il faut donc que nous ayons  $2r \gg a$ . Avec  $a/2r \simeq 0.1$ , nous pouvons considérer cette approximation. Il est à noter qu'elle requiert les mêmes hypothèses que la théorie orthodoxe.

##### *Principe*

Pour déterminer la résistance tunnel de la jonction, nous utilisons un calcul analogue à celui effectué dans [27,28]. Nous déterminons la résistance tunnel comme le rapport entre la tension appliquée aux deux plots de la jonction, et le courant tunnel qui traverse cette dernière,

$$R_T = \frac{V}{I_T} . \quad (2.33)$$

La densité de courant tunnel entre les deux plots est donnée par

$$J_T = e \rho_T v T , \quad (2.34)$$



où  $\rho_T$  est la densité d'électrons susceptibles de passer,  $v$  la vitesse des électrons,  $e$  la charge élémentaire, et  $T$  est le coefficient de transmission tunnel donné par l'équation (2.21).

Le courant tunnel est alors déterminé en intégrant la densité de courant sur la surface pouvant émettre des électrons,

$$I_T = \int_{surf} dS J_T . \quad (2.35)$$

### Modèle unidirectionnel

Nous considérons que les électrons passent d'un plot de rayon  $r_1$  à l'autre de rayon  $r_2$  en ayant une direction parallèle à l'axe  $z$ . Ils ont donc une barrière effective de longueur  $l(\theta)$  (Fig. 2.10) :

$$l(\theta) = d + r_1(1 - \cos(\theta)) + r_2(1 - \cos(\theta')) \quad \text{où} \quad r_1 \sin(\theta) = r_2 \sin(\theta') . \quad (2.36)$$

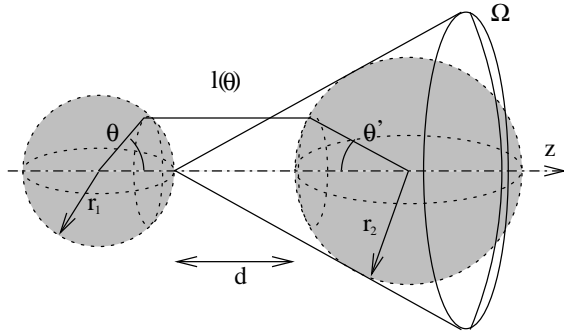


FIG. 2.10: Schéma de calcul du courant tunnel. Les électrons transitent parallèlement à  $z$ , voyant une distance  $l(\theta)$ .

La densité  $\rho_T$  est déterminée en partant de la densité tridimensionnelle des électrons  $\rho$  près du niveau de Fermi  $E_F$  :

$$\rho(E_F) = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{3/2} . \quad (2.37)$$

Lorsque l'on applique une différence de potentiel  $V$  entre les plots, la densité des électrons, proches du niveau de Fermi, susceptibles d'être transférés dans une direction comprise dans un angle solide  $\Omega$  (Fig. 2.10), est donnée par :

$$\rho_T = \frac{\Omega}{4\pi} \left( \left. \frac{\partial \rho}{\partial E} \right|_{E=E_f} \right) eV = \frac{\Omega}{4\pi} \frac{4m}{\hbar^2} k_F eV \quad \text{avec} \quad k_F = \sqrt{\frac{2mE_F}{\hbar^2}} . \quad (2.38)$$

La vitesse des électrons transférés est donnée par la vitesse de Fermi,

$$v = v_F = \frac{\hbar k_F}{m} . \quad (2.39)$$

L'angle solide  $\Omega$  est défini sur la figure 2.10. Il correspond à l'angle sous lequel est vue la sphère de rayon  $r_2$  depuis la sphère de rayon  $r_1$ . Nous faisons ici l'hypothèse que cet angle reste le même pour tous les points de la sphère de rayon  $r_1$ . Dans ce cas,  $\Omega$  a pour expression :

$$\Omega = 2\pi \int_0^\alpha d\theta \sin(\theta) = 2\pi [1 - \cos(\alpha)] = 2\pi \left[ 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{r_2}{r_2 + d} \right)^2} \right] . \quad (2.40)$$

Pour les configurations qui nous intéressent, le taux de transmission tunnel (2.21) doit être évalué pour une largeur de barrière  $l(\theta)$  et à une énergie  $E = E_F$ . De plus, il peut être simplifié. En effet, comme nous le verrons au sous-paragraphe 2.3.3.3, le produit  $\kappa l(\theta)$  est grand devant l'unité, et le taux de transmission tunnel s'écrit alors :

$$T = \frac{16E_F\Phi}{(E_F + \Phi)^2} \exp(-2\kappa l(\theta)) . \quad (2.41)$$

Nous pouvons maintenant réécrire la densité de courant tunnel (2.34) sous la forme :

$$J_T = 2\pi \left[ 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{r_2}{r_2 + d} \right)^2} \right] \frac{4m}{h^3} e^2 V E_F \frac{16E_F\Phi}{(E_F + \Phi)^2} \exp(-2\kappa l(\theta)) , \quad (2.42)$$

où  $l(\theta)$  est donné par l'équation (2.36).

Nous déduisons de cette expression le courant tunnel donné par l'équation (2.35), où l'intégration sur la surface émettrice se réduit à une intégration sur  $\theta$  ( $dS = 2\pi r_1^2 \sin(\theta) d\theta$ ) :

$$I_T = 128\pi \frac{me^2}{h^3} \left[ 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{r_2}{r_2 + d} \right)^2} \right] V \frac{E_F^2\Phi}{(E_F + \Phi)^2} 2\pi r_1^2 \int_0^{\pi/2} d\theta \exp(-2\kappa l(\theta)) \sin(\theta). \quad (2.43)$$

En insérant (2.36) dans (2.43), on obtient l'expression suivante pour le courant tunnel :

$$I_T = 256\pi^2 \frac{me^2}{h^3} \left[ 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{r_2}{r_2 + d} \right)^2} \right] V \frac{E_F^2\Phi}{(E_F + \Phi)^2} r_1^2 \exp[-2\kappa(r_1 + r_2)] \exp(-2\kappa d) \\ \times \int_0^{\pi/2} d\theta \exp[2\kappa(r_1 \cos(\theta) + r_2 \cos(\theta'))] \sin(\theta) . \quad (2.44)$$

Cette expression n'est pas calculable analytiquement pour  $r_1 \neq r_2$ , mais peut toujours être évaluée numériquement.

#### *Cas de deux sphères identiques*

Si on suppose que les deux sphères sont identiques ( $r_1 = r_2 = r$ ), alors les angles  $\theta$  et  $\theta'$  sont identiques, et l'intégrale dans l'équation (2.44) peut être effectuée. Après simplification, l'expression du courant tunnel est la suivante :

$$I_T = 64\pi^2 \frac{me^2}{h^3} \left[ 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{r}{r + d} \right)^2} \right] V \frac{E_F^2\Phi}{(E_F + \Phi)^2} \frac{r}{\kappa} \exp(-2\kappa d) [1 - \exp(-4\kappa r)] . \quad (2.45)$$

Ici aussi  $\kappa r \gg 1$ , nous pouvons donc négliger  $\exp(-4\kappa r)$  devant 1, ce qui permet d'obtenir comme formule approchée du courant tunnel :

$$I_T = 64\pi^2 \frac{me^2}{h^3} \frac{E_F^2\Phi}{(E_F + \Phi)^2} \frac{r}{\kappa} \left[ 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{r}{r + d} \right)^2} \right] \exp(-2\kappa d) V , \quad (2.46)$$

avec  $\kappa$  donné dans l'équation (2.21).

Nous pouvons maintenant déterminer la résistance tunnel, donnée par l'équation (2.33) :

$$R_T = \frac{1}{64\pi^2} \frac{h^3}{me^2} \left( \frac{E_F + \Phi}{E_F} \right)^2 \frac{\kappa}{\Phi r} \frac{\exp(2\kappa d)}{1 - \sqrt{1 - \left(\frac{r}{r+d}\right)^2}}. \quad (2.47)$$

### 2.3.3.2 Calcul quantique

#### *Le formalisme Landauer-Büttiker*

La détermination de la conductance dans des conducteurs de faibles dimensions, pour lesquels les effets de quantification transverse ne peuvent être négligés, a été introduite par R. LANDAUER en 1957 [29]. L'approche revient à considérer que la conduction entre deux réservoirs idéaux, à travers un canal ayant un taux de transmission  $T$ , a pour valeur  $G = 2e^2T/h$ . Cette formule a été généralisée par M. BÜTTIKER *et al.* [30] dans le cas de plusieurs canaux.

Nous adaptons cette approche au cas de jonctions tunnel ayant un taux de transmission  $T$ , et reliées à des conducteurs idéaux.

#### *Hypothèses*

Dans le modèle développé ici, il faut également considérer les plots comme des réservoirs contenant un nombre important d'électrons par rapport au nombre d'électrons qui peuvent coexister dans les canaux entre les plots. Comme nous l'avons vu au paragraphe 2.2.2, les plots contiennent quelques milliers d'électrons, ce qui représente un nombre suffisant d'électrons devant les quelques canaux existant dans la jonction. Dans la suite, les plots seront donc assimilés à des réservoirs d'électrons à l'équilibre thermodynamique.

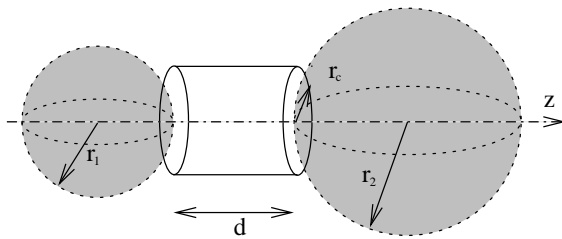


FIG. 2.11: Les plots sphériques, grisés sur la figure, constituent les réservoirs du système. La jonction représentée est limitée par un cylindre d'axe  $z$ , de rayon  $r_c$  et de longueur  $d$ .

Afin de pouvoir effectuer le calcul dans le formalisme de Landauer-Büttiker, il est nécessaire d'avoir des canaux unidimensionnels. Pour ce faire, on considère la jonction dans une géométrie cylindrique (Fig. 2.11). Ceci permet de conserver la symétrie de rotation commune aux deux sphères. La jonction est alors représentée par un cylindre de rayon  $r_c$  et de longueur  $d$ . Nous discuterons des valeurs pertinentes de  $r_c$  au paragraphe suivant.

#### *Conductance de la jonction*

Le confinement des électrons dans le tube de rayon  $r_c$  qui délimite maintenant la jonction fait apparaître une quantification des énergies du système. En effet, des modes propres apparaissent transversalement à la direction de déplacement des électrons (axe  $z$ ). La partie radiale de la

fonction d'onde des électrons est quantifiée par les nombres quantiques  $(p, n)$ . L'énergie totale  $E$  d'un électron dans un mode  $(p, n)$  est alors donnée par

$$E = E_{p,n} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad (2.48)$$

où  $E_{p,n}$  est l'énergie associée au mode  $(p, n)$ <sup>1</sup>, et  $k_z$  le vecteur d'onde associé à la propagation de l'électron dans la direction  $z$ .

Nous appliquons une différence d'énergie  $dE = eV$  entre les deux réservoirs, afin de créer un courant à travers la barrière de potentiel induite par la jonction (Fig. 2.12). Nous nous placerons dans le cas où  $dE \ll E_F$ .

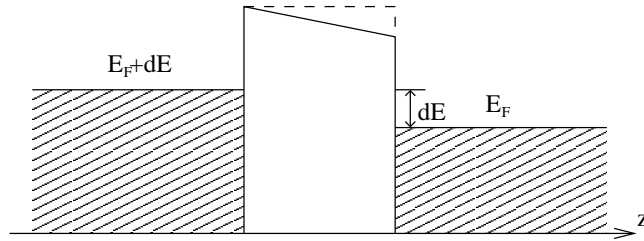


FIG. 2.12: Schéma énergétique de la jonction tunnel selon la direction longitudinale. Les deux conducteurs sont soumis à une différence de potentiel  $V$ , décalant les niveaux de Fermi de la grandeur  $dE = eV$ . Dans l'hypothèse où  $dE \ll E_F$ , la barrière réelle (trait continu) peut être approchée par la barrière rectangulaire (trait pointillé).

Pour qu'un électron puisse transiter à travers la barrière, il faut que son énergie longitudinale soit comprise entre  $E_F + dE$  et  $E_F$ , ce qui détermine le nombre de modes transverses autorisés (donc le nombre de canaux). L'énergie transverse permise doit satisfaire

$$E_{p,n} \leq dE \quad \text{avec} \quad p \in \mathbb{N} \text{ et } n \in \mathbb{N}^*. \quad (2.49)$$

Longitudinalement, l'électron transite à la vitesse  $v_z = \hbar k_z / m$  donnée par

$$v_z(E) = \sqrt{\frac{2(E - E_{p,n})}{m}}. \quad (2.50)$$

La densité d'états longitudinale correspondante (densité unidimensionnelle) est alors :

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{dk_z}{dE} = \frac{1}{2\pi \hbar v_z(E)}, \quad (2.51)$$

et le courant associé au mode  $(p, n)$ , issu de la barrière, s'écrit :

$$I_{p,n} = 2e T_{p,n} \rho(E) dE v_z(E), \quad (2.52)$$

<sup>1</sup>Les calculs sont détaillés dans l'annexe C.

où  $T_{p,n}$  est le taux de transmission tunnel d'un électron dans le mode  $(p, n)$ , obtenu grâce aux équations (2.21) et (2.48).

En combinant les équations (2.50), (2.51), et (2.52) on obtient alors :

$$I_{p,n} = \frac{2e^2}{h} T_{p,n} V . \quad (2.53)$$

Nous ne tenons compte ici que du taux de transmission car pour l'effet tunnel, seule la probabilité de trouver l'électron de l'autre côté de la barrière importe : l'électron est passé ou non.

Si nous sommions sur l'ensemble des modes permis, le courant résultant est

$$I = \sum_{p,n} I_{p,n} = \frac{2e^2}{h} V \sum_{p,n} T_{p,n} , \quad (2.54)$$

d'où la conductivité  $G = I/V$

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{p,n} T_{p,n} . \quad (2.55)$$

### Résistance

Dans la limite  $dE \ll E_F$ , nous considérons que  $T_{p,n} = T$  pour les valeurs de  $(p, n)$  satisfaisant (2.49).  $T$  est donné par l'équation (2.21) où l'on remplace  $E$  par  $E_F$ . Dans cette approximation, nous déduisons de l'équation (2.55) :

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,p} T = \frac{2e^2}{h} NT , \quad (2.56)$$

où  $N$  est le nombre de modes permis par la condition (2.49). La résistance de la jonction cylindrique qui nous intéresse s'écrit alors :

$$R_T = \frac{1}{G} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{NT} . \quad (2.57)$$

Tout comme pour le calcul semi-classique, nous pouvons approximer l'équation (2.21) par la relation (2.41), le produit  $\kappa d$  étant lui aussi grand devant l'unité. Nous obtenons alors pour la résistance tunnel :

$$R_T = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{N} \frac{(E_F + \Phi)^2}{16E_F\Phi} \exp(2\kappa d) . \quad (2.58)$$

### 2.3.3.3 Comparaison des deux approches

Afin d'avoir une idée des résistances obtenues pour les dimensions qui nous intéressent et de vérifier les hypothèses faites précédemment, nous évaluons les différentes grandeurs dans le cas particulier de plots d'or dans un substrat de  $\text{SiO}_2$ .

Nous prenons des valeurs de constantes physiques avec un chiffre significatif. Cela nous paraît justifié en l'absence de données plus précises sur ces constantes macroscopiques à l'échelle du nanomètre. Nous garderons les mêmes valeurs dans la suite.

### Taux de transmission approché

Avec ces matériaux, le niveau de Fermi de l'or a pour valeur  $E_F \simeq 5 \text{ eV}$ , la hauteur de la barrière de potentiel vaut  $V_0 \simeq 9 \text{ eV}$ . De ces deux valeurs on peut déterminer la barrière effective pour les électrons,  $\Phi \simeq 4 \text{ eV}$ . Dans ces conditions, le coefficient  $\kappa$  (2.21) a une valeur de  $10.3 \text{ nm}^{-1}$ . Nous vérifions donc aisément l'approximation permettant de passer de l'équation (2.21) à l'équation (2.41). En effet, les longueurs des jonctions mises en jeu ( $l(\theta), d$ ) sont inférieures ou de l'ordre du nanomètre, et  $\kappa d \gg 1$ .

La taille des plots étant également de l'ordre du nanomètre, nous vérifions aussi  $\exp(-4\kappa r) \ll 1$ , et l'approximation permettant de passer de l'équation (2.45) à l'équation (2.46) est justifiée.

### Nombre de canaux effectifs

L'équation (2.58) n'est pas utilisable directement. En effet, certaines informations sont cachées derrière le nombre de canaux  $N$ . La quantification ( $p, n$ ) des états dans le tube dépend de son rayon  $r_c$  (équation (C.35)) et de la différence d'énergie  $dE$  entre les deux réservoirs (équation (2.49)). Pour avoir une idée de ce nombre, il nous faut dans un premier temps déterminer une valeur pertinente pour  $r_c$ .

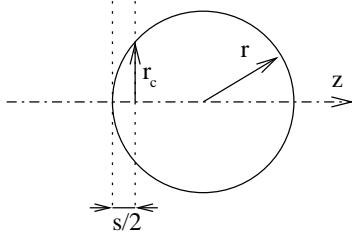


FIG. 2.13: Illustration du principe de calcul du rayon  $r_c$  du tube représentant la jonction tunnel. Le plot a un rayon  $r \gg s$ , donc  $r^2 = r_c^2 + (r - s/2)^2 \rightarrow r_c^2 \sim r s$ .

Le taux tunnel évolue comme  $\exp(2\kappa d)$ .  $T$  est donc divisé par 10 tous les  $s = 0.11 \text{ nm}$ . Si l'on estime que le tube représentant la jonction doit englober une zone pour laquelle  $T$  varie d'un ordre de grandeur, nous pouvons déterminer le rayon  $r_c$  comme le rayon du cercle distant de  $(r - s/2)$  du centre du plot (Fig. 2.13). Comme  $s \ll r$ , on arrive pour le rayon à  $r_c^2 \sim r s$ , soit  $r_c \sim 0.6 \text{ nm}$  si  $r = 3 \text{ nm}$ .

Avec le rayon  $r_c$  calculé ci-dessus, nous pouvons déterminer les modes autorisés par l'équation (2.49) avec une valeur de  $dE = 0.7 \text{ eV}$ . L'équation (C.35) et l'utilisation des tables de zéros des fonctions de Bessel [31], nous donnent  $N = 1$ .

### Choix de la formule

La figure 2.14 montre l'évolution de la résistance tunnel d'une jonction lorsque la longueur de celle-ci augmente. Nous constatons que les deux modèles décrits ici évoluent de la même façon, mais le modèle quantique présente une valeur environ trois fois plus grande que le modèle semi-classique. Avec les valeurs numériques définies ci-dessus, nous trouvons en effet, pour une distance  $d = 1 \text{ nm}$  :  $R_T^{class} = 8.07 \cdot 10^{11} \Omega$  et  $R_T^{quant} = 2.88 \cdot 10^{12} \Omega$ .

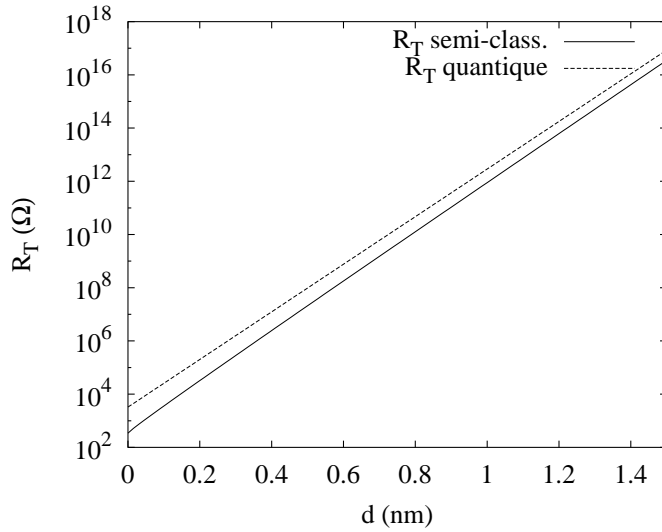


FIG. 2.14: Évolution de la résistance tunnel en fonction de la distance inter-plots, pour les deux modèles explicités ici. Les valeurs sont prises pour des plots d'or dans  $\text{SiO}_2$ .

Pour les besoins du simulateur, la formule la plus simple à utiliser est la résistance du modèle classique (2.47). En effet, le diamètre des plots  $y$  intervient de façon explicite et le modèle est plus intuitif que pour le cas quantique, où la limitation du tube peut être discutée. De plus, pour la résistance quantique, il faut recalculer le nombre de modes  $N$  pour chaque différence de tension entre les plots, puisque dans ce cas  $dE$  est modifiée. Pour le domaine des rayons  $r$  considérés, nous avons cependant toujours des valeurs de  $N$  de l'ordre de l'unité. La résistance issue du modèle quantique sera donc utile pour une étude théorique beaucoup plus fine des effets quantiques sur le blocage de Coulomb, pour un rayon  $r$  quelconque, mais elle ne se justifie pas dans le cadre du travail actuel.

Enfin, la figure 2.14 montre que l'incidence de toute imprécision sur  $d$  sera grande sur la valeur de  $R_T$ . Sur la figure 2.15, nous comparons les variations de  $R_T$  et  $C$  en fonction de  $d$  (pour  $r = 3 \text{ nm}$ ). Dans la plage qui sera utilisée par la suite, on voit que  $C$  varie peu, contrairement à  $R_T$ .

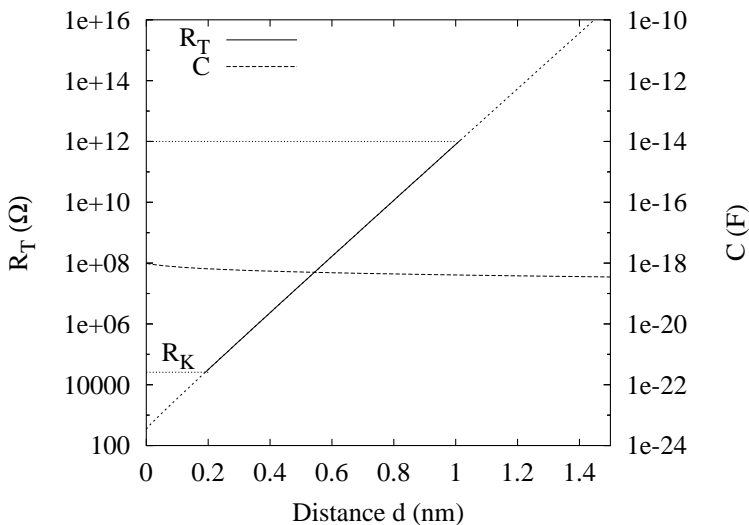


FIG. 2.15: Comparaison des variations de  $R_T$  et  $C$  dans la gamme de distances inter-plots utilisée dans la suite. Pour la résistance, les pointillés indiquent l'évolution pour des valeurs inférieures à  $R_K$  et supérieures à  $10^{12} \Omega$ .

## 2.4 État d'équilibre du système

Afin d'évaluer les variations d'énergie du système, nécessaires dans l'équation (2.32), il faut savoir dans quel cadre elles sont calculées. La théorie orthodoxe<sup>1</sup> impose d'avoir une redistribution des charges entre les événements tunnel. Les systèmes doivent être à l'équilibre thermodynamique. Par conséquent, l'ensemble des plots du système sera à l'équilibre pour le calcul de l'énergie.

### 2.4.1 Énergie libre

L'énergie qui détermine le transport électronique, dans les dispositifs à un électron, est l'énergie libre  $F$ . Elle est définie comme la différence entre l'énergie  $E$  stockée dans le système et le travail  $W$  dû aux sources de tension du système :

$$F = E - W \quad (2.59)$$

C'est la variation de l'énergie libre qui détermine la probabilité qu'un électron de bouger au sein du dispositif. En effet, les mouvements favorisés sont ceux qui, dans la mesure du possible, vont diminuer l'énergie libre.

Néanmoins, U. GEIGENMÜLLER et G. SCHÖN [32] ont mis en avant la difficulté de savoir si le taux tunnel était sensible à la variation d'énergie locale (spécifique à la jonction considérée) ou globale (par rapport au système en équilibre). En effet, le problème se pose de savoir comment les charges se redistribuent durant le processus tunnel, la discussion reposant essentiellement sur la durée à attribuer à ce dernier. Il faut déterminer si l'environnement a pu relaxer après le transfert de chaque charge [32–34].

Ceci dépend de plusieurs facteurs : dans le cas des isolants relativement ioniques, comme  $\text{SiO}_2$ , il faut surtout tenir compte des temps de relaxation de la polarisation après le transfert d'un électron. Nous avons choisi, dans une approche pragmatique, de prendre la valeur de  $\epsilon_r$  correspondant aux fréquences de transfert des électrons. Pour des courants de l'ordre de  $10^{-12}$  A à  $10^{-9}$  A, ces fréquences seront dans le domaine UHF ( $10^7 - 10^{10}$  Hz) [16].

Dans la suite, nous nous plaçons dans le cadre de la variation d'énergie globale, qui pour les dimensions considérées ici, semble la mieux adaptée.

### 2.4.2 Énergie électrostatique

L'énergie stockée dans le dispositif multi-plots n'est autre que l'énergie électrostatique du système. En effet, les plots métalliques forment un système de conducteurs qui accumulera les charges au cours du fonctionnement.

Les plots sont chargés avec des charges  $Q_i$ . Ces charges créent sur le plot  $j$  un potentiel  $\varphi_j$ . L'énergie du système s'écrit alors :

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \varphi_i Q_i. \quad (2.60)$$

---

<sup>1</sup>voir la paragraphe 2.2.4.



Les charges des plots sont reliées à leurs potentiels par l'intermédiaire des coefficients d'influence des conducteurs, soit par l'intermédiaire de la matrice capacité  $\mathbf{C}$  du système :

$$Q_i = \sum_j C_{i,j} \varphi_j. \quad (2.61)$$

En introduisant (2.61) dans (2.60) nous obtenons la relation :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \varphi_i C_{i,j} \varphi_j, \quad (2.62)$$

ou encore :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j. \quad (2.63)$$

Le calcul décrit ci-dessus tient compte de la présence de tous les conducteurs, et donc des différentes capacités d'influence. Dans notre cas, la matrice capacité  $\mathbf{C}$  ne tiendra compte que des premiers voisins de chaque plot, ce qui revient à dire que seule la capacité des jonctions est prise en compte.

Comme nous l'avons déjà souligné au sous-paragraphe 2.2.3.2, la complexité de la géométrie prise en compte (sphères désordonnées) ne permet pas d'utiliser un solveur volumique afin d'accéder à la matrice capacité complète pour chaque réseau considéré. Nous avons donc préféré modéliser au mieux les capacités des jonctions pour pallier à cet inconvénient.

La plupart des simulateurs utilisés pour la caractérisation de dispositifs multi-jonctions tunnel considère également les plus proches voisins. L'utilisation de la matrice capacité complète a été discutée de façon précise pour des réseaux unidimensionnels [35,36]. Il résulte de ces discussions que seul le comportement fin est modifié. En effet, la tension de seuil  $V_{th}$  ne paraît pas être sensible à l'influence au-delà des plus proches voisins.

Dans le cas de dispositifs à géométrie simple (plots cubiques, rectangulaires), la pratique est d'avoir recours à un programme d'extraction de la matrice de capacité du système. De cette façon, la simulation peut être plus rigoureuse. Le plus souvent, le logiciel FASTCAP est utilisé à cette fin [35,36].

### 2.4.3 Travail des électrons

Le système de conducteurs étant situé entre des électrodes, une différence de potentiel va donc s'établir entre les plots. Lors des mouvements d'électrons dans le dispositif, les sources de tension ont un travail à effectuer pour rester dans leur état. Le travail correspondant à une distribution  $\{Q_i\}$  de charges sur les plots est donné par l'énergie nécessaire pour amener les charges de l'infini (où le potentiel est nul) jusque sur les plots aux potentiels  $\{V_i\}$ . Il s'écrit alors :

$$W = \sum_i -Q_i V_i. \quad (2.64)$$

## Bibliographie

- [1] M. H. Devoret and H. Grabert. “Introduction to single charge tunneling”. Dans M. H. Devoret and H. Grabert, editors, *Single charge tunneling : Coulomb blockade phenomena in nanostructure*, volume 294 of *Nato ASI Series*, chapitre 1, pages 1–20. Plenum Press, New York, 1992.
- [2] G.-L. Ingold and Y. V. Nazarov. “Charge tunneling rates in ultrasmall junctions”. Dans M. H. Devoret and H. Grabert, editors, *Single charge tunneling : Coulomb blockade phenomena in nanostructure*, volume 294 of *Nato ASI Series*, chapitre 2, pages 21–108. Plenum Press, New York, 1992.
- [3] G. Schön. “Single-electron tunneling”. Dans *Quantum transport and dissipation*, chapitre 3, pages 149–212. Viley-VCH, 1998.
- [4] C. P. Herrero, G. Schön, and A. D. Zaikin. “Strong charge fluctuations in the single-electron box : a quantum Monte Carlo analysis”. *Phys. Rev. B*, 59(8), p 5728, 1999.
- [5] D. Esteve. “Transferring electrons one by one”. Dans M. H. Devoret and H. Grabert, editors, *Single charge tunneling : Coulomb blockade phenomena in nanostructure*, volume 294 of *Nato ASI Series*, chapitre 3, pages 109–138. Plenum Press, New York, 1992.
- [6] H. Grabert. “Charge fluctuations in the single-electron box : perturbation expansion in the tunneling conductance”. *Phys. Rev. B*, 50(23), p 17364, 1994.
- [7] M. Tinkham. “Coulomb blockade and an electron in a mesoscopic box”. *Am. J. Phys.*, 64(3), p 343, 1996.
- [8] D. S. Duncan, C. Livermore, R. M. Westervelt, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard. “Direct measurement of the destruction of charge quantization in a single-electron box”. *Appl. Phys. Lett.*, 74(7), p 1045, 1999.
- [9] S. Altmeyer, A. Hamidi, B. Spangenberg, and H. Kurz. “77 K single electron transistors fabricated with 0.1  $\mu\text{m}$  technology”. *J. Appl. Phys.*, 81(12), p 8118, 1997.
- [10] D. G. Austing, T. Honda, and S. Tarucha. “Vertical single electron transistors with separate gates”. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 36, p 4151, 1997.
- [11] B. H. Choi, S. W. Hwang, I. G. Kim, H. C. Shin, Y. Kim, and E. K. Kim. “Fabrication and room-temperature characterization of a silicon self-assembled quantum-dot transistor”. *Appl. Phys. Lett.*, 73(21), pp 3129–3131, 1998.
- [12] Y. A. Pashkin, Y. Nakamura, and J. S. Tsai. “Metallic resistively coupled single-electron transistor”. *Appl. Phys. Lett.*, 74(1), p 132, 1999.
- [13] H. Mathieu. “*Physique des semiconducteurs et des composants électriques*”, pages 102–108. Masson, 3rd edition, 1996.
- [14] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. “*Solid State Physics*”, pages 362–364. HRW International Editions, 1987.
- [15] E. Durand. “*Electrostatique : problèmes généraux des conducteurs*”, volume 2, pages 207–210. Masson, 1966.
- [16] A. S. Cordan, A. Goltzené, Y. Hervé, M. Mejias, C. Vieu, and H. Launois. “Electron transport in metallic dot arrays : Effect of a broad dispersion in the tunnel junction dimensions”. *J. Appl. Phys.*, 84(7), pp 3756–3763, 1998.

- [17] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. “*Mécanique quantique*”, volume I, pages 32–40,68–86. Hermann, Paris, 1996.
- [18] E. Merzbacher. “*Quantum Mechanics*”, pages 92–112. John Wiley & Sons, 3rd edition, 1998.
- [19] E. O. Kane. “Basic concepts of tunneling”. Dans E. Burstein and S. Lundqvist, editors, *Tunneling phenomena in solids*, chapitre 1, pages 1–12. Plenum Press, 1969.
- [20] C. B. Duke. *Tunneling in solids*. Solid state physics. Academic Press, New York, 1969.
- [21] A. K. Ghatak, K. Thyagarajan, and M. R. Shenoy. “A novel numerical technique for solving the one-dimensionnal Schroedinger equation using matrix approach – Application to quantum well-structures”. *IEEE J. Quant. Elect.*, 24(8), pp 1524–1531, 1988.
- [22] B. Jonsson and T. Sverre. “Solving the Schroedinger equation in arbitrary quantum-well profiles using the transfer matrix method”. *IEEE J. Quant. Elect.*, 26(11), pp 2025–2035, 1990.
- [23] E. Merzbacher. “*Quantum Mechanics*”, pages 113–134. John Wiley & Sons, 3rd edition, 1998.
- [24] A. Messiah. “*Mécanique quantique*”, volume I, pages 194–203. Dunod, 1965.
- [25] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique quantique*, volume II. Hermann, Paris, 1996.
- [26] E. Fermi. *Notes on quantum mechanics : a course given at the University of Chicago*. University of Chicago Press, Chicago, 1961. Facsimile reproduction of a manuscript.
- [27] J. Cazaux. “*Initiation à la physique du solide : exercices commentés*”, pages 257–262. Masson, 2nd edition, 1994.
- [28] J. G. Simmons. “Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film”. *J. Appl. Phys.*, 34(6), p 1793, 1963.
- [29] R. Landauer. “Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction”. *IBM J. Res. Develop.*, 1, pp 223–231, 1957.
- [30] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas. “Generalized many-channel conductance formula with application to small rings”. *Phys. Rev. B*, 31(10), p 6207, 1985.
- [31] G. N. Watson. *A treatise on the theory of Bessel functions*. Cambridge mathematical library. Cambridge University Press, 2nd edition, 1995.
- [32] U. Geigenmüller and G. Schön. “Single-electron effects in arrays of normal tunnel junctions”. *EuroPhys. Lett.*, 10(8), p 765, 1989.
- [33] M. Amman, E. Ben-Jacob, and K. Mullen. “Charge solitons in 1-D array of mesoscopic tunnel junctions”. *Phys. Lett. A*, 142(6), p 431, 1989.
- [34] L. J. Geerligs, V. F. Anderegg, and J. E. Mooij. “Tunneling time and offset charge in small tunnel junctions”. *Physica B*, 165, pp 973–974, 1990.
- [35] K. K. Likharev and K. A. Matsuoka. “Electron-electron interaction in linear arrays of small tunnel junctions”. *Appl. Phys. Lett.*, 67(20), p 3037, 1995.
- [36] C. B. Whan, J. White, and T. P. Orlando. “Full capacitance matrix of coupled quantum dot arrays : static and dynamical effects”. *Appl. Phys. Lett.*, 68(21), p 2996, 1996.

# Chapitre 3

## Outil de simulation

Ce chapitre explique comment sont prises en compte les différentes hypothèses introduites au chapitre précédent. Nous y présentons également l'implémentation informatique des grandeurs physiques calculées au chapitre 2.

### 3.1 Objets simulés

Dans cette section, nous donnons le modèle informatique retenu pour les différents objets qui interviennent dans les dispositifs à simuler.

#### 3.1.1 Dispositifs multi-jonction tunnel

##### 3.1.1.1 Dispositif expérimentaux

Ainsi que nous l'avons précisé précédemment à la section 1.2, les dispositifs expérimentaux qui ont initialement justifié nos simulations sont des réseaux de plots d'or sur un substrat de  $\text{SiO}_2$ , à une et deux dimensions. Les plots sont placés entre des électrodes d'or, et l'on étudie la conduction électrique de tels dispositifs en fonction de la température.

De par la méthode de fabrication, les réseaux de plots sont fortement désordonnés, ce qui se traduit par une répartition aléatoire des distances inter-plots  $d$ . Le rayon  $r$  des plots est quand à lui à peu près constant [1].

Les paramètres caractéristiques des réseaux sont donc la dimension des plots ainsi que les différentes distances inter-plots. Ils constituent les entrées dans les simulations à effectuer, tout comme la tension appliquée  $V$  entre les électrodes, ou la température de fonctionnement  $T$  du système à étudier.

##### 3.1.1.2 Modèle numérique

Les réseaux expérimentaux ont tous une structure dont la taille globale est bien définie. Nous nous limitons donc à simuler uniquement ce type de dispositifs, qui se déclinent en réseaux unidimensionnels et bidimensionnels, voire même tridimensionnels si l'on généralise l'approche expérimentale. Bien évidemment, de nombreux travaux portent sur des structures particulières qui ne rentrent pas dans cette catégorie [2,3]. Il nous serait possible de les simuler

également si l'on modifiait la procédure d'initialisation de la structure à étudier, de façon à ce qu'elle soit plus générale. Ce type d'approche a été pris en compte dans SIMON par C. WASSHUBER [4], mais nécessite une programmation fastidieuse. Elle n'a pas été jugée utile ici puisque les données expérimentales à notre disposition n'entraient pas dans cette dernière catégorie.

### Réseaux 1D

Nous considérons une ligne de plots située entre des électrodes. La ligne a une longueur de  $N_x$  plots, et chaque plot possède deux plus proches voisins. Nous définissons le nombre de plots,  $N_p = N_x$ , ainsi que le nombre de jonctions,  $N_j = N_x + 1$ . L'électrode source est repérée par l'indice 0, alors que l'électrode de drain l'est par l'indice  $N_p + 1$ . Les plots sont indexés par rapport à l'électrode source, de même que les jonctions. La figure 3.1 illustre ces définitions.

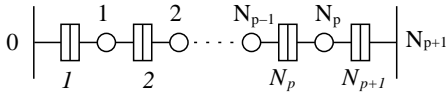


FIG. 3.1: Représentation d'un réseau 1D de jonctions tunnel. Nous avons indiqué les indices des plots (caractères droits) ainsi que ceux des jonctions (caractères italiques).

### Réseaux 2D

Dans ce type de réseaux, on augmente le nombre de lignes en les mettant en parallèle. Ceci augmente le nombre de jonctions mises en jeu. Le réseau est considéré comme un plan de  $N_x \times N_y$  plots, où  $N_y$  représente le nombre de lignes de longueur  $N_x$ . Dans ce cas, chaque plot possède quatre plus proches voisins. Le nombre de plots devient alors  $N_p = N_x N_y$ , et le nombre de jonctions  $N_j = 2N_x N_y + N_y - N_x$ . L'électrode source est toujours indexée par la valeur 0, et l'électrode drain par  $N_p + 1$ . Les plots sont indexés ligne par ligne en partant de l'électrode source. Les jonctions quant à elles, sont indexées de la même manière, mais en passant d'une ligne à une interligne (cf. Fig 3.2).

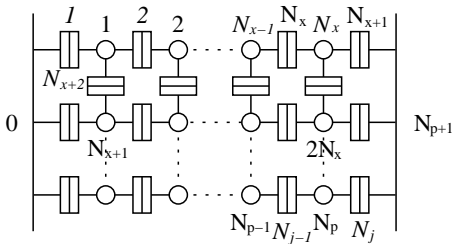


FIG. 3.2: Schéma d'un réseau 2D de jonctions. La numérotation des plots et des jonctions y est précisée, avec les mêmes conventions que pour la figure 3.1.

### Réseaux 3D

Ici on met en parallèle des plans 2D. Les réseaux ont une taille de  $N_x \times N_y \times N_z$  plots, où  $N_z$  représente le nombre de plans de taille  $N_x \times N_y$  mis en parallèle. Chaque plot possède six plus proches voisins. Le nombre de plots est  $N_p = N_x N_y N_z$ , et le nombre de jonctions  $N_j = 3N_x N_y N_z + N_y N_z - N_x N_z - N_x N_y$ . Nous procédons comme précédemment pour numérotter les plots et les jonctions.

### *Prise en compte du désordre*

Les jonctions sont associées à une distance  $d_j$ , prise dans une distribution expérimentale [1]. Toutes les longueurs de jonction sont déterminées aléatoirement parmi cette distribution, ce qui permet de rendre compte de façon réaliste du désordre géométrique expérimental. Les jonctions sont alors modélisées de manière à déterminer les grandeurs qui les caractérisent<sup>1</sup>.

Ici nous avons limité le désordre géométrique aux distances inter-plots, mais il est aussi possible de le faire intervenir par l'intermédiaire du rayon  $r$  des plots, si ce dernier venait à fluctuer davantage, ou par le nombre de plots voisins. Une autre source de désordre peut également être prise en compte : c'est l'effet de charges parasites. Ce type de désordre a déjà été étudié sur des réseaux homogènes [5], et consiste à introduire des charges fractionnaires  $\{Q_{0_m}\}$  sur les plots pour tenir compte de défauts dans les matériaux.

### **3.1.2 Électrodes et grille**

Dans le contexte du simulateur les électrodes sont considérées comme des réservoirs d'électrons dont le potentiel est fixé. Elles sont reliées aux plots du réseau par des jonctions tunnel. Les électrodes de source et de drain sont donc considérées comme des plots associés aux indices 0 et  $N_p + 1$ , dont l'énergie ne varie pas en fonction du nombre d'électrons. Leurs potentiels restent fixés et sont définis en début de simulation.

L'électrode de grille joue un rôle particulier dans ce type de dispositifs. Elle n'est pas reliée au réseau par des jonctions tunnel, mais uniquement par des capacités. L'utilisation de cette grille n'est pas systématique dans nos simulations puisque les travaux expérimentaux ne l'incluaient pas. Néanmoins, le simulateur peut tenir compte de cette grille en ajoutant aux plots des capacités  $\{C_{0_m}\}$  en parallèle aux capacités  $\{C_j\}$  des jonctions.

La mémorisation des informations concernant les électrodes est effectuée dans la même structure que pour les plots.

### **3.1.3 Modèle de plot**

Les plots sont situés aux noeuds des réseaux. Ils sont supposés être constitués d'un métal idéal pour répondre à la théorie orthodoxe. Par conséquent, les plots sont représentés par une structure permettant la mémorisation des informations telles que le nombre d'électrons  $\{n_m\}$  qu'ils contiennent, la perturbation de charge  $\{Q_{0_m}\}$  vue, le potentiel  $\{V_{p_m}\}$  du plot, l'index du plot, ainsi que les indices de ligne, colonne et plan associés.

Il est possible de considérer des plots semiconducteurs, où les niveaux seraient discrets. Cela nécessiterait de reprendre les formules de taux tunnels, puisque l'on n'est plus alors dans le cadre de la théorie orthodoxe. Néanmoins, si les plots semiconducteurs sont suffisamment dopés, on peut les considérer comme étant métalliques, et les formules restent inchangées, avec éventuellement des écarts  $\delta E$  plus élevés ; ceci limiterait le domaine de validité des hypothèses de la théorie orthodoxe<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>voir le paragraphe 2.2.3.

<sup>2</sup>voir la discussion du paragraphe 2.2.2.

Du point de vue informatique, les structures représentant les plots du réseau sont mémorisées dans un tableau unidimensionnel dont l'indice de repérage correspond à l'indice du noeud associé au plot au sein du réseau.

### 3.1.4 Modèle de jonction tunnel

Chaque jonction tunnel est associée à une distance  $d_j$  qui détermine ses valeurs caractéristiques : la capacité  $C_j$  grâce à l'équation (2.12), ainsi que la résistance tunnel  $R_{Tj}$  via l'équation (2.47). Dans le simulateur il est donc nécessaire de mémoriser ces valeurs pour chaque jonction, ce qui évite d'avoir à les recalculer.

Une jonction est représentée par une structure permettant de mémoriser ses caractéristiques ( $R_{Tj}, C_j$ ), ainsi qu'un certain nombre de grandeurs telles que les noeuds d'entrée et de sortie et le nombre d'électrons ayant traversé la jonction. Le sens de parcours d'une jonction est orienté positivement si l'indice des plots augmente.

La structure représentant une jonction est mémorisée dans un tableau unidimensionnel en respectant la numérotation décrite précédemment<sup>1</sup>. Ainsi, les  $N_j$  jonctions sont traitées sans avoir à tenir compte de leurs positions dans le réseau. Le traitement ultérieur étant le même pour toutes les jonctions, nous gagnons du temps par ce moyen.

### 3.1.5 Matrice capacité

Les jonctions forment un réseau capacitif de par l'existence des capacités tunnel. Par conséquent, lorsque les électrodes de source et de drain sont soumises à une différence de potentiel  $V$ , les plots se trouvent à des potentiels  $\{V_{p_j}\}$  correspondant au diviseur de tension formé par le réseau des capacités.

Afin de simplifier la détermination du potentiel  $V_p$  des plots, on définit une matrice capacité  $C$ . Cette matrice est obtenue en écrivant que lorsque le réseau est soumis à une différence de potentiel  $V$ , il n'y a pas de charge sur les plots. En écrivant les  $N_p$  équations spécifiant que chaque plot est neutre, on aboutit à un lien entre le potentiel des plots, la matrice capacité recherchée et le potentiel extérieur<sup>2</sup> :

$$CV_p = Q_{\text{ext}} \quad (3.1)$$

où  $Q_{\text{ext}}$  est la charge extérieure au système, qui tient compte du potentiel des électrodes (et de la grille) :

$$Q_{\text{ext}m} = \begin{cases} C_{0m}V_g & \text{si le plot } m \text{ n'est pas adjacent à une électrode,} \\ C_jV_e + C_{0m}V_g & \text{si le plot } m \text{ est adjacent à l'électrode de potentiel } V_e, \end{cases} \quad (3.2)$$

où  $C_{0m}$  est la capacité de grille du plot  $m$ ,  $V_g$  le potentiel de la grille, et  $C_j$  la capacité de la jonction entre le plot  $m$  et l'électrode.

<sup>1</sup>voir le sous-paragraphe 3.1.1.2.

<sup>2</sup>voir l'annexe A pour les détails.

Dès que  $\mathbf{C}$  est définie, il est possible de déterminer la tension sur chaque plot du réseau simplement en inversant l'équation (3.1) :

$$\mathbf{V}_p = (\mathbf{C}^{-1})\mathbf{Q}_{\text{ext}}. \quad (3.3)$$

La matrice  $\mathbf{C}$  ne sert pas uniquement à la détermination de  $\mathbf{V}_p$ , mais aussi au calcul de l'énergie électrostatique du système par l'intermédiaire de l'équation (2.63).

### 3.1.5.1 Forme de $\mathbf{C}$

La matrice capacité du dispositif est une matrice symétrique définie positive, dont la structure est caractérisée par des bandes de coefficients non nuls<sup>1</sup>.

La matrice  $\mathbf{C}$  peut être décrite de la façon suivante :

$$\mathbf{C}_{m,n} = \begin{cases} C_{0m} + \sum_{i=\langle m \rangle} C_i & \text{si } m = n, \\ -C_i & \text{si } n \text{ est l'indice d'un plot voisin de } m, \text{ et } i = \langle m \rangle \cap \langle n \rangle, \\ 0 & \text{ailleurs.} \end{cases} \quad (3.4)$$

La notation  $\langle m \rangle$  signifie que l'on considère les indices des jonctions voisines du plot d'indice  $m$ .

La matrice  $\mathbf{C}$  est mémorisée dans une matrice triangulaire inférieure afin d'utiliser au mieux ses propriétés. Il serait possible d'utiliser la forme spécifique des bandes pour la mémorisation de  $\mathbf{C}$ , mais cela ne permettrait l'utilisation éventuelle d'autres dispositions de jonctions tunnel.

---

<sup>1</sup>voir l'annexe A pour les détails.



## 3.2 Calcul du taux de transition tunnel

### 3.2.1 Taux de transition tunnel

Le transfert d'électrons au travers d'une jonction tunnel est conditionné par le taux de transition tunnel donné par l'équation (2.32) :

$$\Gamma(\Delta F) = \frac{1}{e^2 R_T} \frac{-\Delta F}{1 - \exp\left(\frac{\Delta F}{k_B T}\right)}. \quad (3.5)$$

Ce taux dépend de la variation d'énergie libre  $\Delta F$  qui a lieu au cours du transfert.

Pour une jonction  $j$  donnée, deux mouvements peuvent être possibles selon que l'électron transite dans le sens positif (symbole  $+$  dans notre convention), ou dans le sens négatif (symbole  $-$ ). Par conséquent, nous aurons à calculer deux variations d'énergie libre,  $\Delta F_j^+$  et  $\Delta F_j^-$ , puisque seules les configurations de charges d'arrivée diffèrent selon le sens du mouvement.

Ces variations d'énergie libre nous donnent alors deux taux de transition tunnel qui sont mémorisés dans des tableaux de dimension  $N_j$ , pour être utilisés dans la suite :

$$\Gamma_j^\pm = \Gamma(\Delta F_j^\pm). \quad (3.6)$$

### 3.2.2 Énergie libre

Au cours du transfert d'un électron, l'énergie libre du système formé par le réseau de plots, varie. Cette variation d'énergie est due à la modification de l'énergie électrostatique  $\Delta E$  stockée dans le système, ainsi qu'au travail  $W$  de l'électron pendant son transfert. La variation d'énergie libre s'écrit de la façon suivante :

$$\Delta F = \Delta E - W. \quad (3.7)$$

#### 3.2.2.1 Énergie électrostatique

Nous avons vu au paragraphe 2.4.2 que l'énergie électrostatique du système était donnée par l'équation (2.63) :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N_p} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j, \quad (3.8)$$

où  $Q_i$  est la charge électrique sur le plot  $i$ , et  $\mathbf{C}$  est la matrice capacité du système de conducteurs considéré<sup>1</sup>.

Lors du transit d'un électron du plot  $k$  au plot  $k'$ , l'énergie du système est modifiée. Elle passe de la valeur initiale  $E_i$  à la valeur  $E_f$  après le mouvement. Ces deux énergies peuvent être évaluées indépendamment en utilisant l'équation (3.8), mais cela nécessite un calcul en  $\mathcal{O}(N_p^2)$  opérations pour évaluer  $\Delta E = E_f - E_i$ . Ce calcul devant être effectué pour chaque jonction, et chaque sens de transition, il convient de trouver une approche plus rapide.

En fait, au cours du transfert décrit ci-dessus, seules les valeurs de  $Q_k$  et de  $Q_{k'}$  sont modifiées. Il est donc possible de tenir compte de cette remarque pour évaluer directement

<sup>1</sup>voir paragraphe 3.1.5.

la différence d'énergie  $\Delta E$ . Le détail du calcul est donné en annexe B ; il conduit à l'équation suivante :

$$\Delta E = \frac{e}{2} \left[ (e + 2Q_k)(\mathbf{C}^{-1})_{k,k} + (e - 2Q_{k'}) (\mathbf{C}^{-1})_{k',k'} + 2(Q_{k'} - Q_k - e)(\mathbf{C}^{-1})_{k,k'} + \sum_{(i \neq k, k')=1}^{N_p} 2Q_i ((\mathbf{C}^{-1})_{k,i} - (\mathbf{C}^{-1})_{k',i}) \right]. \quad (3.9)$$

$\Delta E$  correspond ici à l'échange d'un électron entre le plot  $k$  et le plot  $k'$ , *i.e.* pour  $Q_k \rightarrow Q_k + e$  et  $Q_{k'} \rightarrow Q_{k'} - e$ . Le nombre d'opérations requises pour le calcul est maintenant de l'ordre de  $\mathcal{O}(N_p)$ , ce qui est préférable lorsque  $N_p$  devient grand.

Nous pouvons remarquer que le calcul ne nécessite pas de modification des données de  $\mathbf{Q}$ , ce qui permet une parallélisation du calcul de  $\Delta E$  pour des jonctions différentes, si l'on dispose d'une machine parallèle pour les simulations [6].

Dans le cas où l'on veut tenir compte des charges parasites, il suffit de remplacer les charges non perturbées  $\{Q_j\}$  par les charges perturbées  $\{Q_j + Q_{0j}\}$  dans l'équation (3.9). Les perturbations de charge  $\{Q_{0j}\}$  sont prises dans l'intervalle  $] -e/2, e/2[$ .

### 3.2.2.2 Travail des électrons

Pour évaluer le travail mis en oeuvre par les électrons lors du passage du plot  $k$  au plot  $k'$ , on a recours au travail des forces électrostatiques sur une charge constante. Sous une différence de potentiel  $dV$ , une charge  $q$  entraîne le travail élémentaire suivant :

$$dW = -qdV. \quad (3.10)$$

En passant d'un plot au potentiel  $V_{pk}$  à un plot au potentiel  $V_{pk'}$ , le travail exercé par les forces électrostatiques devient :

$$W = -q \int_{V_{pk}}^{V_{pk'}} dV = -q(V_{pk'} - V_{pk}). \quad (3.11)$$

L'électron ayant une charge  $q = -e$ , le travail que nous avons à évaluer s'écrit :

$$W = e(V_{pk'} - V_{pk}). \quad (3.12)$$

Le calcul de cette grandeur ne pose pas de problème puisque le potentiel des plots est déterminé en début de simulation par l'équation (3.3), et mémorisé pour chaque plot.

### 3.3 Approches de la simulation : Équation Pilote et Monte Carlo

#### 3.3.1 L'effet tunnel : un processus stochastique

Dans le cadre de la théorie orthodoxe, les mouvements des électrons ont lieu de façon séquentielle et indépendante à travers les jonctions tunnel [7]. Nous supposons qu'un électron ne possède pas la mémoire des évènements passés, et que son futur mouvement n'est conditionné que par l'état du système à un moment donné. Ces hypothèses correspondent exactement à la définition d'un processus stochastique de Markov. C'est ce qui nous a permis de ne pas tenir compte des processus impliquant une cohérence entre les transitions tunnel<sup>1</sup>.

Si nous considérons de plus que les évènements tunnel ont lieu aléatoirement à la manière de sauts, le processus peut être décrit à l'aide d'une équation pilote déterminant l'évolution des différents états discrets du système considéré :

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_{j \neq i} [\Gamma_{ji}P_j(t) - \Gamma_{ij}P_i(t)] , \quad (3.13)$$

où  $P_i(t)$  représente la probabilité d'occupation de l'état  $i$  à un instant  $t$ , et  $\Gamma_{ij}$  indique le taux de transition de l'état  $i$  vers l'état  $j$ . La simulation de dispositifs multi-jonctions tunnel par l'utilisation de l'équation pilote (3.13) sera discutée au paragraphe 3.3.2.

La résolution de l'équation (3.13) dans le cas d'une jonction unique où le mouvement n'est autorisé que dans une seule direction conduit à la solution suivante :

$$P_i(t) = \frac{(\Gamma t)^i}{i!} e^{-\Gamma t} , \quad (3.14)$$

qui n'est autre que la distribution de Poisson. Nous déduisons de ce résultat la probabilité de stabilité d'une configuration donnée  $i$  pendant un intervalle de temps  $\Delta t = t_1 - t_0$ ,

$$P_i(\Delta t) = \frac{P_i(t_1)}{P_i(t_0)} = e^{-\Gamma \Delta t} , \quad (3.15)$$

qui sert de base à la simulation Monte Carlo des dispositifs multi-jonctions tunnel, développée au paragraphe 3.3.3.

#### 3.3.2 Méthode de l'équation pilote

L'approche de l'équation pilote pour la caractérisation de dispositifs à jonctions tunnel a été appliquée analytiquement à des petits réseaux [8,9], et numériquement à des structures plus complexes [10–12].

La méthode consiste à écrire l'équation (3.13) pour chaque configuration de charge, correspondant à un état du système. L'ensemble de ces équations forme un système d'équations

---

<sup>1</sup>voir le paragraphe 2.2.4

différentielles qui peut être mis sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} dP_1(t)/dt \\ dP_2(t)/dt \\ \vdots \\ dP_n(t)/dt \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -\sum_{i \neq 1} \Gamma_{1i} & \Gamma_{21} & \cdots & \Gamma_{n1} \\ \Gamma_{12} & -\sum_{i \neq 2} \Gamma_{2i} & \cdots & \Gamma_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Gamma_{1n} & \Gamma_{2n} & \cdots & -\sum_{i \neq n} \Gamma_{ni} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} P_1(t) \\ P_2(t) \\ \vdots \\ P_n(t) \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

dans le cas où l'on se limite à  $n$  états successifs du système.

On peut réduire la notation en écrivant :

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{\Gamma}\mathbf{P}, \quad (3.17)$$

où  $\mathbf{P}$  est le vecteur des probabilités d'occupation des états du système et  $\mathbf{\Gamma}$  la matrice des taux de transition tunnel.

La complexité de ce type d'approche vient du fait que le nombre d'états accessibles au système n'est pas limité. Dans la pratique, la probabilité d'occupation de certains états est très faible, et il devient alors possible d'approcher la solution exacte par un système limité. Néanmoins, il est difficile d'isoler les états les plus probables de façon à minimiser les erreurs.

La résolution mathématique de (3.17) ne pose pas de problème, mais la croissance du nombre d'états possibles devient problématique pour une implémentation informatique. Elle conduit à des algorithmes compliqués pour faire des analyses spécifiques de dispositifs à jonctions tunnel [10].

L'étude du cas stationnaire de l'équation (3.17),  $\mathbf{\Gamma}\mathbf{P} = \mathbf{0}$ , conduit à un algorithme simple, mais qui nécessite beaucoup de mémoire pour la résolution du système linéaire obtenu. Pour un réseau unidimensionnel comportant  $N$  plots, si on limite l'excursion du nombre d'électrons sur chaque plot à un intervalle de grandeur  $n$ , le nombre d'équations à considérer n'est plus infini, et il est donné par  $n^N$ . Pour que cette approximation ne soit pas trop importante, il faut que  $n$  soit au moins égal à trois [12]; ceci conduit à travailler sur des réseaux de taille très limitée.

Le nombre  $n$  est très sensible à la tension appliquée aux bornes du dispositif. Plus celle-ci est élevée, plus la gamme des charges électroniques sur un plot sera étendue. Par contre, l'influence de la température est faible, et par conséquent, le nombre d'équations à traiter varie très faiblement avec  $T$ . Les temps de calcul sont donc approximativement identiques quelle que soit la température considérée [12].

### 3.3.3 Méthode de Monte Carlo

L'utilisation d'un simulateur de type Monte Carlo pour la simulation de dispositifs à jonctions tunnel a été proposée par K. MULLEN *et al.* [13] et N. S. BAKHVALOV *et al.* [14], et a été reprise par la suite dans de nombreux travaux [4,15–19].

Comme expliqué précédemment au paragraphe 3.3.1, nous prenons comme hypothèse de départ que chaque jonction tunnel est indépendante des autres jonctions, et que le mouvement des électrons y suit un processus de Poisson, comme dans le cas d'une jonction unique.

Le processus de Poisson associé à une direction est déterminé par l'un des taux de transition tunnel de la jonction  $j$  (équation (3.6)). Pour une configuration de charge donnée, l'équation

(3.15) permet d'obtenir l'intervalle de stabilité  $\Delta t_j^\pm$  de la jonction  $j$  associé à chaque sens (+ ou -) de mouvement :

$$\Delta t_j^\pm = -\frac{\ln(p_i)}{\Gamma_j^\pm} \quad \text{où} \quad p_i \in ]0, 1[ . \quad (3.18)$$

La valeur de  $p_i$ , choisie aléatoirement, est associée à la probabilité d'occupation d'une configuration de charge  $i$  donnée.

La durée la plus courte pour l'ensemble des jonctions permet de définir la jonction à travers laquelle l'électron est susceptible de passer par effet tunnel avec la probabilité maximale. C'est grâce à cette étape qu'il est possible de réaliser une simulation de Monte Carlo des réseaux multi-jonctions.

Ce type de simulation consistant à réaliser le mouvement de chaque électron dans le dispositif, il est inévitablement sensible aux paramètres de simulation. Lorsque la tension augmente, les électrons sont plus attirés par l'électrode positive; cela se traduit par une augmentation faible du temps de simulation. Par contre, la température joue un rôle plus critique. L'agitation thermique va favoriser des mouvements, dont le nombre augmente rapidement, bien qu'ils ne contribuent pas systématiquement au courant total. Nous observons alors un accroissement significatif des temps de simulation, ce qui peut devenir critique lorsque l'on s'intéresse au comportement à haute température.

## 3.4 Structure du simulateur

Le simulateur décrit ici ne possède pas d'accélération typique telle que la réduction de variance ou l'utilisation d'une table de hachage, comme on peut le trouver dans d'autres approches [4]. Il est toujours possible d'incorporer ces accélérations par la suite. Le but du travail a tout d'abord été de valider l'approche physique du simulateur, et les premières applications à l'étude systématique de l'effet des paramètres des réseaux visaient plus une orientation dispositif que circuit. La seule accélération développée dans le simulateur est l'approche quasi-1D. Elle sera explicitée au paragraphe 3.4.4, et validée dans le chapitre 4.

### 3.4.1 Paramètres du simulateur

Nous pouvons distinguer deux types de paramètres d'entrée pour le fonctionnement du simulateur :

- le descriptif du dispositif à simuler,
- la description des conditions de simulation.

Le descriptif du dispositif à simuler est donné par plusieurs fichiers. Le fichier principal comporte les informations sur la géométrie de la structure. Nous y indiquons les dimensions du réseau, en nombre de plots, puis nous donnons les différentes distances inter-jonctions en respectant l'ordre des jonctions<sup>1</sup>. Ensuite, si l'on désire prendre en compte des perturbations de charge, on les inclut dans un fichier similaire au précédent, mais où elles sont indiquées dans l'ordre de succession des plots.

La description des conditions de simulation se fait par l'intermédiaire de la ligne de commande, et consiste à entrer la température  $T$  de simulation, la tension  $V$  appliquée aux bornes du dispositif et la durée de la simulation  $t_{sim}$ . Un certain nombre d'autres paramètres peut être utilisé pour spécifier les informations que l'on cherche à extraire<sup>2</sup>.

### 3.4.2 Organigramme

Le simulateur se structure en un certain nombre de blocs, qui peuvent interagir les uns avec les autres (Fig. 3.3). Le bloc le plus important consiste en la détermination des caractéristiques électriques. Il est composé de couches imbriquées autour du noyau de simulation, qui sera explicité plus précisément au paragraphe suivant. La logique de l'imbrication de couches sera présentée à la section 3.5, en utilisant un exemple de dispositif à caractériser.

Dans un premier temps, le simulateur lit les paramètres de la ligne de commande, ainsi que le fichier décrivant le dispositif à simuler. Ensuite, il crée les structures permettant de mémoriser le réseau complet et le chemin quasi-1D. C'est à ce moment là que sont calculées les caractéristiques des jonctions en fonction de  $r$  et des  $\{d_j\}$ .

La seconde étape de l'initialisation consiste à lire le fichier décrivant les perturbations à appliquer dans le cas où celles-ci sont nécessaires. Nous déterminons alors la matrice capacité du réseau, comme décrit au paragraphe 3.1.5, et nous calculons la matrice inverse associée par la méthode de Choleski.

---

<sup>1</sup>voir le sous-paragraphe 3.1.1.2.

<sup>2</sup>voir la section 3.5 pour l'énumération de ces informations.

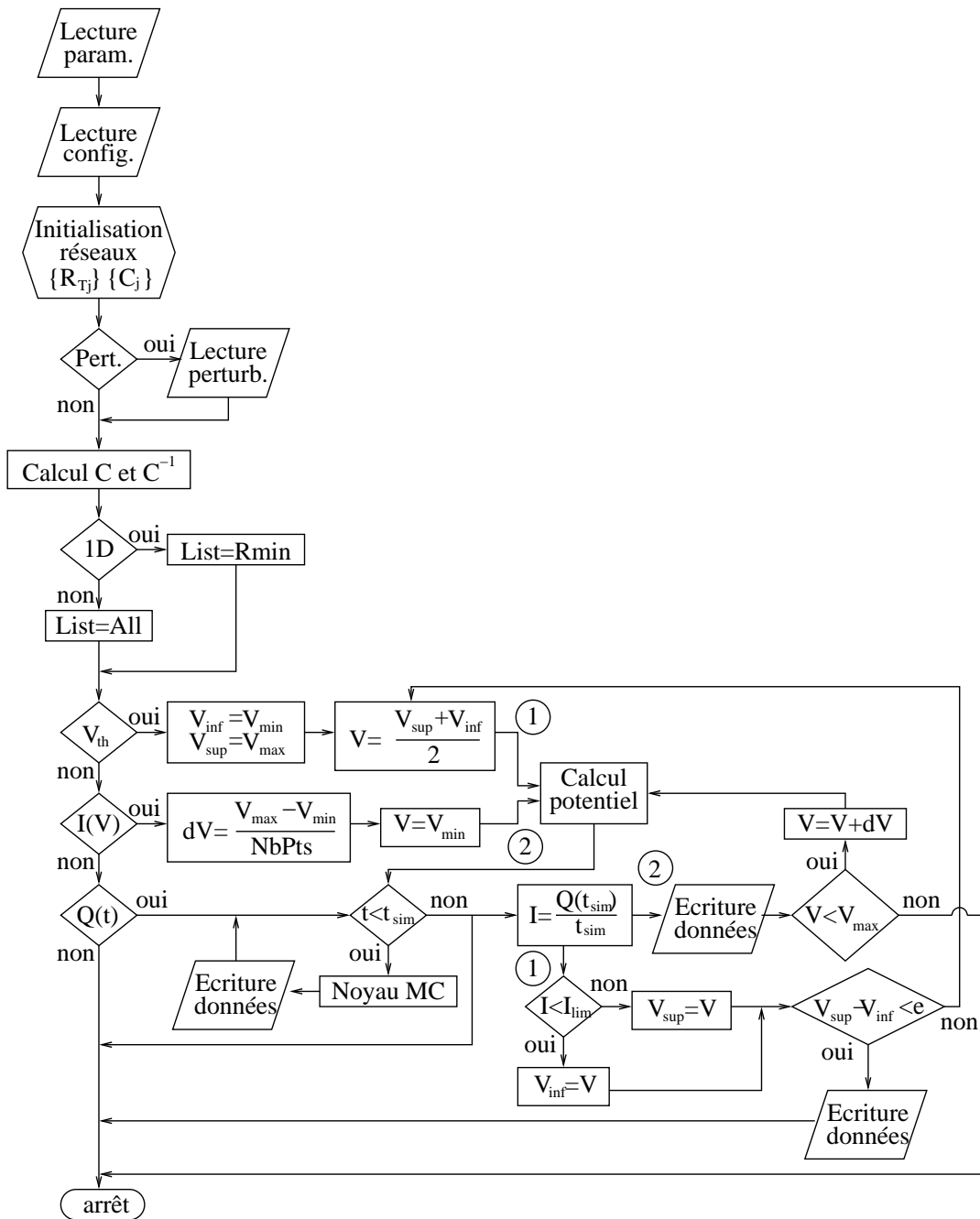


FIG. 3.3: Organigramme schématique du simulateur utilisé pour la simulation de dispositifs multi-jonctions tunnel.

Enfin, selon l'approche de simulation retenue (complète/quasi-1D), il faut choisir la liste des jonctions à simuler.

Une fois toutes les initialisations effectuées, la simulation proprement dite peut commencer. Trois caractéristiques du réseau peuvent être isolées : l'évolution temporelle du courant (paragraphe 3.5.1), l'évolution du courant en fonction de la tension  $V$  (paragraphe 3.5.2), et la détermination de la tension seuil  $V_{th}$  (paragraphe 3.5.3). L'ensemble de ces fonctionnalités repose sur la détermination de mouvement d'électrons pendant une durée  $t_{sim}$ . Selon la caractéristique recherchée, les données associées sont sauvegardées.

### 3.4.3 Noyau du simulateur

Pour la détermination des caractéristiques électriques des réseaux étudiés ici (bloc "Noyau MC" sur la figure 3.3), notre simulateur Monte Carlo repose sur l'algorithme qui suit :

**Étape 1** On calcule, pour une configuration de charge donnée, les taux de transition tunnel de chaque jonction (dans chaque sens possible).

**Étape 2** On détermine les intervalles de stabilité des jonctions à l'aide de l'équation (3.18), où les  $p_i$  sont pris aléatoirement dans l'intervalle uniforme  $]0, 1[$ .

**Étape 3** On isole la durée de stabilité minimale et l'on effectue le mouvement de l'électron associé.

**Étape 4** On met les différentes grandeurs à jour et l'on reprend à l'étape 1.

Cet algorithme permet d'effectuer le mouvement des électrons au sein du dispositif étudié. L'ensemble des mouvements peut être mémorisé en fonction des informations que l'on cherche à retirer.

### 3.4.4 Approche quasi-1D

La simulation de la réponse des réseaux bidimensionnels de grandes tailles nécessite un temps de calcul important, particulièrement lorsque la température est élevée. L'observation du comportement de conduction permet de déduire qu'il y a un chemin de conduction prédominant dans la majorité des cas, c'est le chemin de résistance minimale. L'approche quasi-1D consiste à rechercher ce chemin, et à simuler le réseau complet par l'intermédiaire du chemin dominant.

Par cette méthode, on interdit le mouvement d'électrons à travers les jonctions n'appartenant pas au chemin dominant : ceci revient à figer les charges sur les plots extérieurs au chemin dominant. Dans ces conditions, il faut que la variation d'énergie libre  $\Delta F$  soit la même que pour le réseau complet, ce qui impose deux conditions :

- il faut utiliser la matrice capacité du réseau complet, de façon à ce que l'énergie électrostatique soit la même,
- le calcul du potentiel des plots doit être effectué par rapport au réseau complet, pour avoir le même travail des électrons.

Du point de vue informatique, le noyau de simulation Monte Carlo n'est pas modifié, il suffit uniquement de lui donner la table avec les jonctions constituant le chemin de conduction dominant.



### 3.4.4.1 Recherche du chemin dominant

Dans cette approche, la première opération est la recherche du chemin de conduction dominant. Il faut envisager l'ensemble des chemins de conduction partant de la source et aboutissant au drain, et n'ayant pas de boucle (ne passant pas deux fois par le même plot). Le chemin dominant correspond à celui dont la résistance totale est minimale.

Pour ce faire nous utilisons un algorithme récursif qui va envisager toutes les directions possibles depuis un plot donné. La procédure est appelée en partant des plots proches de l'électrode source, qui constitue le niveau d'ordre 0 de la recherche. A un ordre  $n$ , dans la recherche, le cheminement est donné à la figure 3.4.

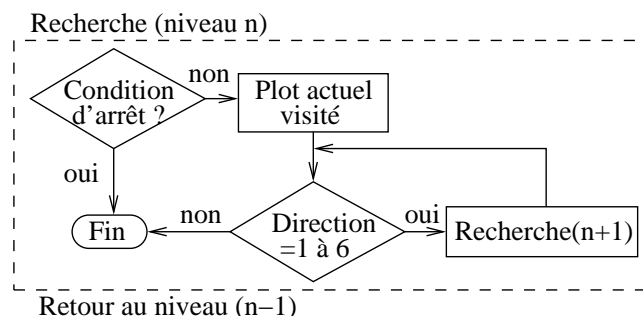


FIG. 3.4: Organigramme schématique de la recherche récursive du chemin de conduction dominant. La procédure est décrite à un ordre  $n$ .

On vérifie tout d'abord si l'on n'est pas dans une condition d'arrêt de la recherche : par exemple si le réseau a été traversé, si le plot courant a déjà été rencontré, si la résistance du chemin actuel est supérieure à la plus petite résistance d'un autre parcours, ou si le nombre de jonctions du chemin est supérieur au nombre total de jonctions du réseau, etc.

Si aucune de ces conditions n'est rencontrée, alors le plot actuel est marqué comme déjà visité, et l'on appelle la procédure au niveau suivant ( $n + 1$ ) après avoir choisi l'un des six plots voisins comme nouveau point de recherche. Lorsque la recherche aux ordres supérieurs est effectuée, on passe à la direction suivante jusqu'à ce que chaque direction ait été envisagée. Ensuite, la procédure se termine et redonne la main à la procédure d'ordre  $n - 1$ .

Si la condition d'arrêt est due au fait que le réseau ait été traversé, on mémorise l'indice des plots traversés qui forment le nouveau chemin dominant jusqu'à ce qu'un chemin plus favorable soit rencontré.

Une fois le chemin de conduction dominant isolé, les indices des jonctions formant ce chemin sont mémorisés dans un fichier associé au réseau complet, de façon à pouvoir être utilisés par le simulateur à tout moment.

La validation de l'approche quasi-1D sera discutée au chapitre 4, afin de déterminer les limitations éventuelles.

## 3.5 Détermination des caractéristiques électriques

La simulation des dispositifs multi-jonctions tunnel par une approche Monte Carlo permet d'évaluer un grand nombre de paramètres physiques, puisqu'il suffit de mémoriser les quantités associées, durant la simulation. Les principales grandeurs retenues pour la compréhension du transport électronique dans ces dispositifs sont explicitées ici, ainsi que leur détermination.

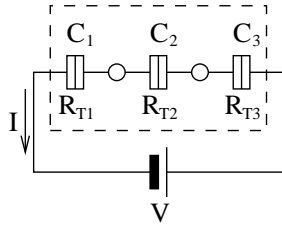


FIG. 3.5: Schéma du réseau servant d'exemple pour le calcul des différentes grandeurs accessibles au simulateur.

Pour illustrer les calculs, nous considérons un réseau unidimensionnel de deux plots (trois jonctions), dont le schéma électrique équivalent est donné à la figure 3.5. Le réseau est inhomogène, les trois jonctions étant de longueurs  $d_1$ ,  $d_2$  et  $d_3$  différentes (mais  $r = 3 \text{ nm}$  pour les deux plots) :  $d_1 = 0.41 \text{ nm}$ ,  $d_2 = 0.6 \text{ nm}$  et  $d_3 = 0.31 \text{ nm}$ .

### 3.5.1 Évolution temporelle

Le noyau du simulateur effectue le mouvement d'un électron associé à une durée élémentaire  $dt$ . Il est donc possible de cumuler ces durées élémentaires pour avoir l'évolution temporelle du système étudié.

$$t = \sum_i dt_i \quad (3.19)$$

#### 3.5.1.1 Évolution des charges

Les grandeurs accessibles après chaque mouvement sont la charge des plots, le nombre d'électrons ayant quitté la source et celui de ceux ayant atteint le drain, le nombre d'électrons ayant traversé chaque jonction. A partir de ces grandeurs, nous pouvons étudier leur évolution temporelle au cours de la simulation. Ainsi, nous obtenons la charge stockée dans le réseau au cours du temps, la densité de charges positives ou négatives ainsi que l'évolution des charges sur chaque plot (électrodes incluses). Ces grandeurs ne nécessitent pas de calcul compliqué, le nombre de charges  $\{n_m\}$  sur les plots étant la grandeur de base stockée par le simulateur.

#### 3.5.1.2 Évolution du courant

Le calcul du courant dans le dispositif est un peu plus complexe. En effet, les événements tunnel sont indépendants et ont lieu à des intervalles variables. Il y a donc transfert d'une charge à certains moments et aucun courant le reste du temps. Le courant instantané n'est donc pas exploitable sous cette forme.

Pour pouvoir accéder au courant, on revient à sa définition, la différenciation de la charge par rapport au temps,

$$I = \frac{\partial Q}{\partial t} \simeq \frac{\Delta Q}{\Delta t} \quad (3.20)$$

Dans le simulateur, nous utilisons deux approches pour calculer le courant.

### Courant expérimental

Pour pouvoir comparer un courant calculé avec celui obtenu expérimentalement, on se place dans les mêmes conditions pour le calcul. Nous intégrons donc les charges ayant traversé le dispositif pendant le temps  $t_c$  nécessaire à l'accumulation de  $N_c$  électrons. Le rapport de la charge accumulée au temps d'accumulation nous donne alors un point de la courbe d'évolution du courant. La relation définissant le courant au cours du temps est alors :

$$I(t_k) = \sum_i \frac{eN_c}{t_{ci}} \delta(t_k - \sum_{j \leq i} t_{cj}) \quad (3.21)$$

pour un instant  $t_k = \sum_{i \leq k} t_{ci}$ .

Comme les évènements tunnel sont aléatoires, non corrélés, on observera un bruit de grenaille. Dans ce cas, l'amplitude relative du bruit est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\Delta I}{\langle I \rangle} = \frac{1}{\sqrt{N_c}}. \quad (3.22)$$

Nous obtenons par cette approche des courbes du type de celle de la figure 3.6, pour le réseau décrit plus haut (Fig. 3.5).

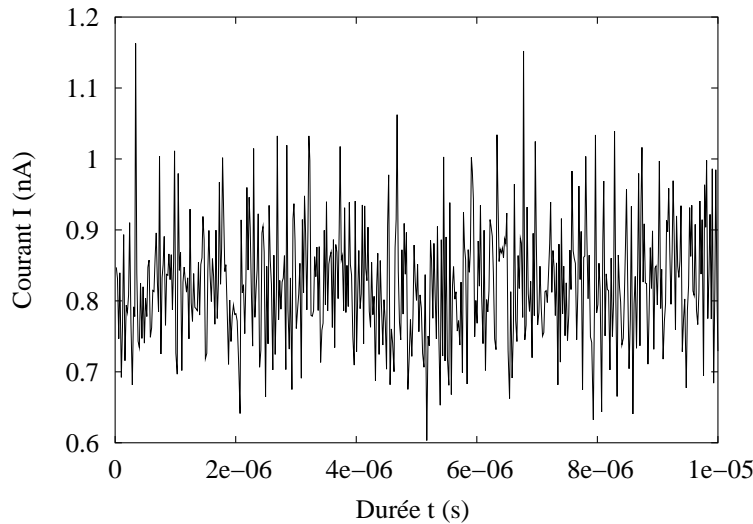


FIG. 3.6: Exemple de courbe d'évolution temporelle du courant réalisée en utilisant l'équation (3.21), où  $N_c = 100$ . On observe un bruit de l'ordre de 10 % du signal moyen, correspondant au bruit de grenaille.

Dans la pratique,  $N_c$  est de l'ordre de  $10^3$  électrons. On observera alors un bruit de grenaille d'environ  $1/\sqrt{10^3} = 3.2$  %. L'existence de ce bruit pose des problèmes pour la détermination d'un courant moyen en fonction de la tension. Nous sommes obligés de tenir compte d'un grand nombre de points pour avoir une valeur fiable du courant, ce qui allonge les durées de simulation.

### Courant intégral cumulé

Pour ne pas être gêné par le bruit de grenaille lors de la détermination des courbes courant-tension ou tension de seuil-température, nous définissons un courant pour lequel le temps d'intégration sera très supérieur à ce qui se pratique expérimentalement. Nous définissons alors un courant intégral cumulé qui correspond au rapport du nombre de charges ayant traversé le dispositif à un instant donné  $Q(t)$  divisé par le temps mis pour le traverser :

$$I(t) = \frac{Q_{trav}(t)}{t}. \quad (3.23)$$

Ce courant permet de déterminer la durée  $\tau$  d'intégration nécessaire pour atteindre un régime dans lequel le courant reste quasiment constant (Fig. 3.7). Il n'a pas de réelle signification physique, c'est un outil pour déterminer la durée optimale de la simulation pour chaque valeur de  $V$ . Dans la pratique, nous choisirons  $t_{sim} = \tau$ .

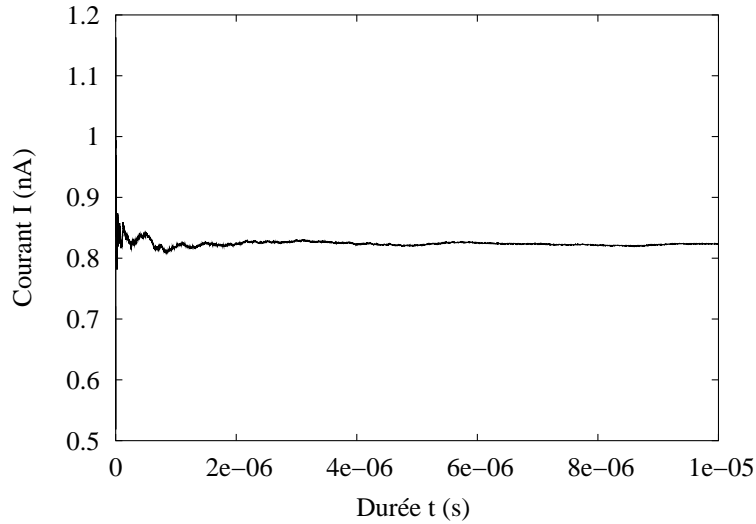


FIG. 3.7: Courant intégral cumulé en fonction du temps d'intégration, obtenu en utilisant l'équation (3.23). Ici, nous pouvons estimer le temps d'intégration nécessaire à  $\tau = 4 \cdot 10^{-6}$  s.

### 3.5.2 Courant moyen

L'évolution temporelle du courant peut être réalisée pour différentes valeurs  $V$  de la tension entre source et drain. Pour chaque valeur de cette tension, on détermine la valeur moyenne du courant qui lui sera associée. Pour ce faire, on effectue  $m$  calculs du courant à l'aide de l'équation (3.23) sur une durée  $t_{sim} = \tau$  et nous retenons la moyenne de ces  $m$  valeurs :

$$I(V) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{Q_{trav}(t_{sim})}{t_{sim}}. \quad (3.24)$$

L'avantage ici est de pouvoir plus facilement jouer sur  $m$  que sur la valeur de  $\tau$  afin de diminuer encore l'ampleur des fluctuations du courant.

En faisant varier  $V$ , nous sommes capables d'obtenir une courbe courant-tension (courbe  $I(V)$ ) caractéristique du dispositif multi-jonctions étudié. Pour chaque nouvelle valeur de  $V$ , l'état de départ du réseau correspond à l'état final de la tension précédente (Fig. 3.8).

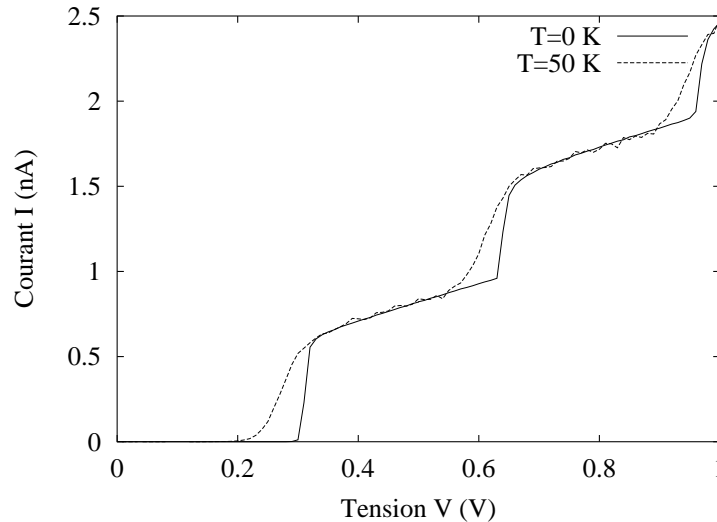


FIG. 3.8: Exemple de caractéristique courant-tension obtenue à partir du même réseau que précédemment. La structure en escalier résultant du phénomène de blocage de Coulomb est très visible.

Les courbes  $I(V)$  peuvent être déterminées pour différentes valeurs de la température  $T$ . Nous pouvons donc voir comment la température influe sur le fonctionnement des réseaux multi-jonctions (Fig. 3.8). Pour  $T = 0 K$ , des marches bien marquées sont visibles, avec une pente raide au moment où chaque marche débute. Pour une température plus élevée, les marches sont plus émoussées, et ont tendance à avancer, ce qui montre que la tension de seuil  $V_{th}$  va diminuer avec la température.

### 3.5.3 Tension de seuil

La tension de seuil  $V_{th}$ <sup>1</sup> est le paramètre pertinent pour caractériser un dispositif, puisqu'elle permet de savoir à partir de quelle tension ce dernier va conduire le courant.

Pour déterminer la valeur de  $V_{th}$ , nous ne pouvons prendre le critère théorique qui fixe cette valeur à la tension pour laquelle le courant passe subitement d'une valeur nulle à une valeur non nulle. Cette définition n'est strictement valable qu'à  $T = 0 K$ . Dès que  $T \neq 0 K$ , le courant ne sera plus exactement nul. Nous pouvons toutefois définir  $V_{th}$  en introduisant un courant minimal détecté  $I_{lim}$ , correspondant par exemple à la limite de résolution d'un appareil de mesure. La valeur de la tension de seuil  $V_{th}$  est alors la tension pour laquelle le courant atteint cette valeur limite.

$$I(V_{th}) = I_{lim}. \quad (3.25)$$

La détermination de  $V_{th}$  n'est pas possible directement, il faut en fait calculer des valeurs de  $I$  pour différentes tensions  $V$  et rechercher, par dichotomie par exemple, la valeur de la tension

<sup>1</sup>voir la section 2.1.

pour laquelle le courant s'approche le plus de  $I_{lim}$ . Le calcul se fait avec une précision donnée  $\delta V_{th}$  sur la valeur de  $V_{th}$ , de façon à ce que la recherche soit suspendue dès que l'écart entre deux valeurs de  $V$  est inférieur à  $\delta V_{th}$ . La valeur de  $\delta V_{th}$  doit évidemment être plus petite que celle de  $V_{th}$ .

La recherche de  $V_{th}$  est sensible au bruit qui peut exister dans les courbes  $I(V)$ . La valeur peut être faussée si le bruit est trop important, du fait de l'algorithme utilisé pour la recherche du seuil. C'est pour cela que l'équation (3.23) est essentielle pour la recherche de la durée  $\tau$  à partir de laquelle les fluctuations du courant deviennent suffisamment faibles.

En répétant le calcul de  $V_{th}$  pour différentes températures  $T$ , nous obtenons une courbe seuil-température (caractéristique  $V_{th}(T)$ ). Ce type de courbe est important pour pouvoir déterminer les dispositifs susceptibles de fonctionner à température élevée (Fig. 3.9), éventuellement jusqu'à la température ambiante.

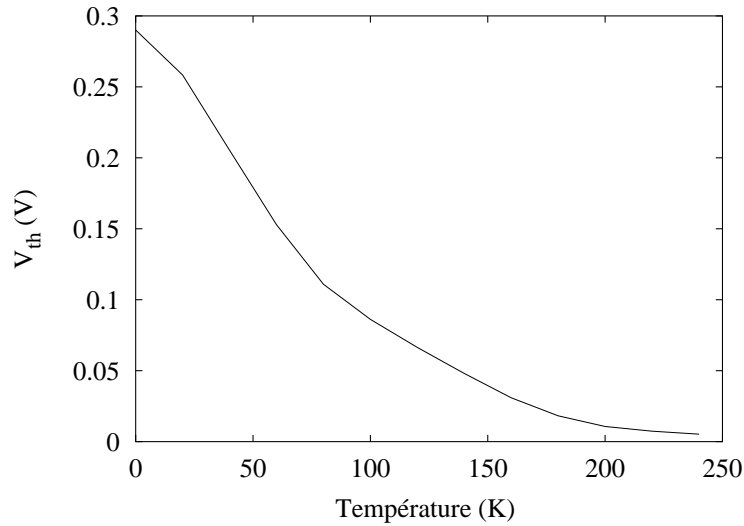


FIG. 3.9: Courbe d'évolution de la tension de seuil  $V_{th}$  avec la température, toujours pour le réseau de la figure 3.5.

## Bibliographie

- [1] A. S. Cordan, A. Goltzené, Y. Hervé, M. Mejias, C. Vieu, and H. Launois. “Electron transport in metallic dot arrays : Effect of a broad dispersion in the tunnel junction dimensions”. *J. Appl. Phys.*, 84(7), pp 3756–3763, 1998.
- [2] K. K. Likharev. “Single-electron devices and their applications”. *Proc. IEEE*, 87(4), pp 606–632, 1999.
- [3] H. Pothier, P. Lafarge, C. Urbina, D. Esteve, and M. H. Devoret. “Single-electron pump based on charging effects”. *EuroPhys. Lett.*, 17(3), p 249, 1992.
- [4] C. Wasshuber, H. Kosina, and S. Selberherr. “SIMON - A simulator for single-electron tunnel devices and circuits”. *IEEE Trans. Comp. Aided Design Integr. Circ. Sys.*, 16(9), p 937, 1997.
- [5] P. Lafarge, J. J. Meindersma, and J. E. Mooij. “Influence of charge disorder in networks of small tunnel junctions”. *Czech. J. Phys.*, 46, p 2361, 1996.
- [6] X. Wang, V. P. Roychowdhury, and Pratheep Balasingam. “Scalable massively parallel algorithms for computational nanoelectronics”. *Parallel Comp.*, 22, pp 1931–1963, 1997.
- [7] M. H. Devoret and H. Grabert. “Introduction to single charge tunneling”. Dans M. H. Devoret and H. Grabert, editors, *Single charge tunneling : Coulomb blockade phenomena in nanostructure*, volume 294 of *Nato ASI Series*, chapitre 1, pages 1–20. Plenum Press, New York, 1992.
- [8] E. Bar-Sadeh, Y. Goldstein, C. Zhang, H. Deng, B. Abeles, and O. Millo. “Single-electron tunneling effects in granular metal films”. *Phys. Rev. B*, 50(12), p 8661, 1994.
- [9] G.-L. Ingold and Y. V. Nazarov. “Charge tunneling rates in ultrasmall junctions”. Dans M. H. Devoret and H. Grabert, editors, *Single charge tunneling : Coulomb blockade phenomena in nanostructure*, volume 294 of *Nato ASI Series*, chapitre 2, pages 21–108. Plenum Press, New York, 1992.
- [10] L. R. C. Fonseca, A. N. Korotkov, K. K. Likharev, and A. A. Odintsov. “A numerical study of the dynamics and statistics of single electron systems”. *J. Appl. Phys.*, 78(5), p 3238, 1995.
- [11] L. R. C. Fonseca, A. N. Korotkov, and K. K. Likharev. “A numerical study of the accuracy of single-electron current standards”. *J. Appl. Phys.*, 79(12), p 9155, 1996.
- [12] A. S. Cordan and A. Goltzené. “Optimization of the master equation set for a multidot tunnel structure”. *Eur. Phys. J. AP*, 7, p 137, 1999.
- [13] K. Mullen, E. Ben-Jacob, R. C. Jaklevic, and Z. Schuss. “I-V characteristics of coupled ultrasmall-capacitance normal tunnel junctions”. *Phys. Rev. B*, 37(1), p 98, 1988.
- [14] N. S. Bakhvalov, G. S. Kazacha, K. K. Likharev, and S. I. Serdyukova. “Single-electron solitons in one-dimensional tunnel structures”. *Sov. Phys. JETP*, 68(3), p 581, 1989.
- [15] N. Kuwamura, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi. “Simulation of single-electron logic circuits”. *Elec. Comm. Japan*, 77(9), p 65, 1994.
- [16] K. P. Hirvi, M. A. Paalanen, and J. P. Pekola. “Numerical investigation of one-dimensional tunnel junction arrays at temperatures above the Coulomb blockade regime”. *J. Appl. Phys.*, 80(1), p 256, 1996.

- 
- [17] R. H. Chen, A. N. Korotkov, and K. K. Likharev. “Single-electron transistor logic”. *Appl. Phys. Lett.*, 68(14), p 1954, 1996.
- [18] M. Tabe, N. Asahi, Y. Amemiya, and Y. Terao. “Simulation of relaxation processes for non-equilibrium electron distributions in two-dimensional tunnel junction arrays”. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 36, p 4176, 1997.
- [19] H. O. Müller, K. Katayama, and H. Mizuta. “Effects of disorder on the blockade voltage of two-dimensional quantum dot arrays”. *J. Appl. Phys.*, 84(10), p 5603, 1998.





# Chapitre 4

## Simulation quasi-1D

Ce chapitre présente les éléments de validation de l’approche quasi-1D comme méthode d’accélération de la simulation de réseaux bidimensionnels et tridimensionnels [1,2]. Nous y discuterons les points importants pour la caractérisation d’ensembles statistiques de réseaux.

### 4.1 Objectif

Le temps de calcul des caractéristiques électriques augmente très vite avec la température  $T$  et le nombre de plots considérés ou plus exactement avec le nombre de jonctions d’un dispositif. Pour un réseau de  $N_x \times N_y \times N_z$  plots, le nombre de jonctions est donné par  $N_j = 3N_x N_y N_z + N_y N_z - N_x N_z - N_x N_y$ . Cette quantité augmente rapidement avec la taille des réseaux.

On cherche à caractériser des dispositifs désordonnés à la fois pour des réseaux de grande taille et des gammes de températures élevées. Il est donc nécessaire de trouver une méthode permettant d’obtenir la dispersion attendue des réponses électriques pour des ensembles statistiques importants de réseaux, avec des temps de calculs plus abordables que ceux du simulateur de Monte Carlo initial.

Afin de pouvoir évaluer le gain en temps de simulation dû au simulateur quasi-1D, l’estimation a été faite par le calcul de courbes d’évolution du courant en fonction de la tension entre les électrodes de drain et de source. Pour la caractérisation des réponses électriques, nous déterminons l’évolution de la tension de seuil  $V_{th}$  en fonction de la température, à la fois pour les réseaux quasi-1D et pour les réseaux complets. Ces calculs ont été effectués sur des ensembles statistiques de réseaux de différentes tailles.

### 4.2 Méthode

A. S. CORDAN *et al.* [3] ont déjà utilisé une approche 1D pour prédire le rendement de fabrication de réseaux multi-jonctions tunnel bidimensionnels. Ici nous reprenons le principe de base mais en le modifiant et, dans un premier temps, nous identifions le chemin de conduction dominant de chaque réseau<sup>1</sup>. Cette recherche, effectuée lors de la création du dispositif,

---

<sup>1</sup>voir la section 3.4.4 pour la description de l’algorithme utilisé.

représente un temps négligeable sur la durée de simulation totale. On a pu constater que la taille du chemin de conduction dominant évoluait comme  $2N_x + 1$ . Il y aura donc un gain en temps important si nous remplaçons la simulation du réseau complet (ayant  $N_j$  jonctions) par le chemin de conduction dominant (ayant  $2N_x + 1$  jonctions).

Cependant, pour que les réponses électriques calculées par l'approche quasi-1D soient les plus proches possible de celles données par un calcul complet, on utilise la matrice capacité du réseau complet pour calculer la variation d'énergie dans le dispositif. Cela revient à faire la simulation du réseau complet, mais avec des charges nulles sur les plots extérieurs au chemin dominant de conduction. Là aussi un gain en temps est attendu sur le calcul de l'énergie, puisque l'on considère  $2N_x$  plots au lieu de  $N_x N_y N_z$  plots.

## 4.3 Validation

### 4.3.1 Conditions de calcul

La comparaison entre la simulation complète des réseaux et la simulation *via* l'approche quasi-1D est faite sur des ensembles statistiques de réseaux de même taille. Ces ensembles sont formés d'une vingtaine de réseaux aléatoires. Les paramètres de simulation sont les mêmes selon l'approche choisie, à l'exception de la durée de simulation  $t_{sim}$ , qui peut différer entre la simulation complète et la simulation quasi-1D.

Pour les calculs qui suivent, le rayon  $r$  des plots est pris égal à  $3 \text{ nm}$ . Cette valeur, bien que supérieure à celles atteintes actuellement expérimentalement, permet une comparaison immédiate avec nos premiers résultats. Les distances inter-plots sont prises dans l'intervalle  $0.3 - 0.7 \text{ nm}$ .

### 4.3.2 Résultats

#### 4.3.2.1 Accélération

Le temps de simulation de courbes courant-tension a été déterminé pour des ensembles statistiques de réseaux de différentes tailles. Les simulations sont effectuées avec les mêmes paramètres pour chacun des simulateurs utilisés.

Le temps passé à isoler le chemin dominant de conduction est négligeable devant le temps de simulation des réponses électriques. Cette recherche prend deux minutes pour isoler le chemin dominant de dix réseaux  $17 \times 17$ . Cela reste encore réaliste, alors que la simulation de ce type de dispositifs n'est pas envisageable avec les machines à notre disposition pour cette étude, même avec l'approche quasi-1D. Pour les réseaux étudiés ici, la recherche du chemin dominant est quasi instantanée (non mesurable).

Le tableau 4.1 donne l'estimation du gain en temps de simulation que l'on peut attendre de l'utilisation de la simulation quasi-1D. On constate que pour les réseaux bidimensionnels, le gain est proportionnel à  $M^2$ . Pour les réseaux tridimensionnels, les premiers résultats ne permettent pas encore de dégager une loi (le gain va de 60 à 300).

Réseaux	$\tau$ (s)	$\tau_{q1D}$ (s)	$\tau/\tau_{q1D}$	$\langle \tau/\tau_{q1D} \rangle$
$3 \times 3$	145.3	14.7	9.8	10.6
$4 \times 4$	1924.7	87.4	22.0	14.1
$5 \times 5$	508.1	17.9	28.4	27.6
$6 \times 6$	3739.6	112.8	33.1	35.3
$1 \times 3 \times 3$	1668.7	31.9	52	58.8
$2 \times 3 \times 3$	4106.4	42.3	97	106.3
$3 \times 3 \times 3$	6157.4	50.9	121	142.1
$2 \times 4 \times 4$	1919.4	4.5	426.5	324.6

TAB. 4.1: Tableau donnant le gain estimé pour la simulation de réseaux par l'approche quasi-1D.  $\tau$  indique la durée de la simulation complète et  $\tau_{q1D}$  celle de la simulation quasi-1D. Les colonnes 2 à 4 présentent des valeurs typiques pour une dimension donnée, et la colonne 5 présente la valeur moyenne sur l'ensemble statistique.

#### 4.3.2.2 Réponses électriques

On simule par les deux approches les réponses des ensembles statistiques d'une vingtaine de réseaux de différentes tailles. Pour chaque réseau, la courbe d'évolution de la tension de seuil  $V_{th}$  avec la température est calculée entre 0 K et 240 K.

*Moyenne de la tension de seuil  $\langle V_{th} \rangle$*

Pour chacun des ensembles statistiques envisagés, nous déterminons la valeur moyenne de  $V_{th}$ , pour chaque température calculée. Les courbes obtenues par les deux approches de simulation sont alors comparées.

##### Réseaux bidimensionnels

On étudie des réseaux carrés de  $M \times M$  plots. Les valeurs de  $M$  varient entre 3 et 6. Pour chaque taille considérée, nous traçons la moyenne de la tension de seuil en fonction de la température, pour les deux simulations (Figs. 4.1a, 4.1c, 4.1e et 4.1g). Nous déterminons également l'écart relatif entre la valeur obtenue par l'approche quasi-1D et celle calculée par la simulation complète (Figs. 4.1b, 4.1d, 4.1f et 4.1h).

On constate, en étudiant la figure 4.1, que la simulation quasi-1D reproduit bien l'évolution avec la température, mais en surestimant la valeur moyenne du seuil. Les courbes d'évolution du seuil  $V_{th}$  avec la température sont tracées avec des barres d'erreur qui représentent l'écart type autour de la valeur moyenne. On s'aperçoit que la simulation quasi-1D englobe les résultats de la simulation complète.

Les valeurs de la tension de seuil diminuent avec la température. Nous pouvons considérer qu'au-delà de la température limite,  $T_l = 100$  K, la tension n'est plus suffisante pour pouvoir contrôler un dispositif. Pour des températures inférieures à  $T_l$ , l'écart relatif entre la valeur quasi-1D et la valeur attendue (simulation bidimensionnelle) reste autour de 10 %. Par contre, au

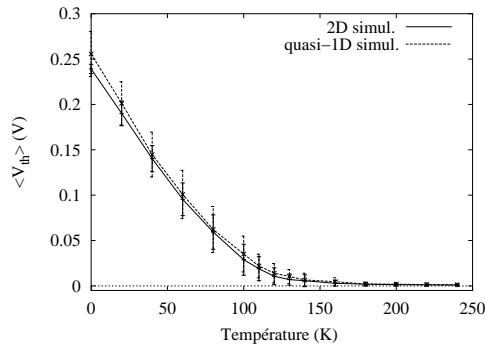
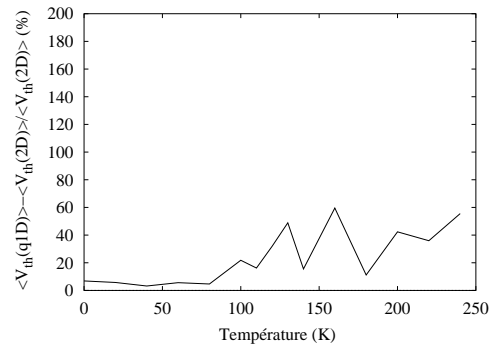
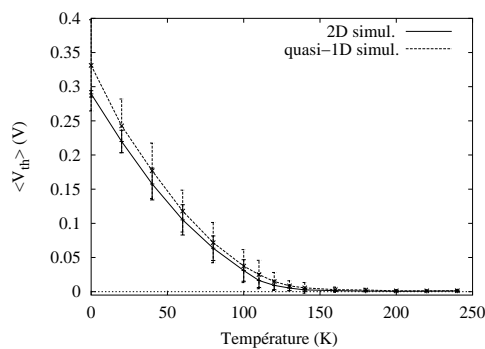
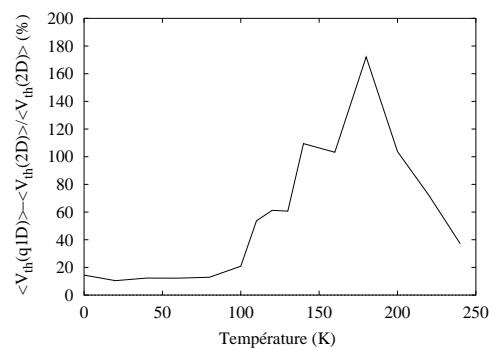
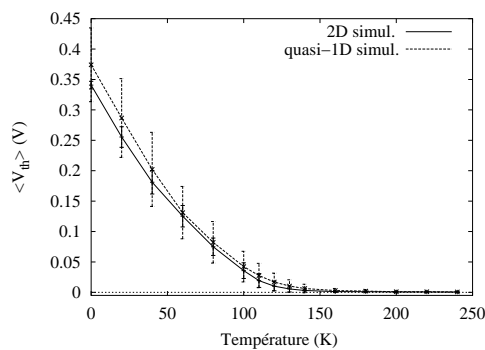
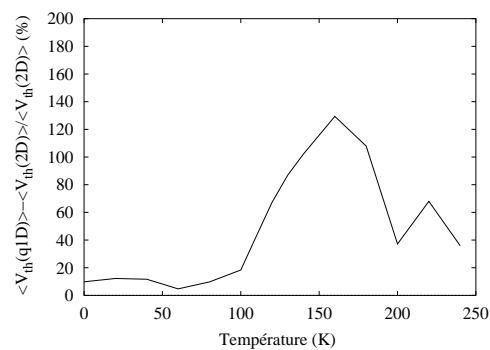
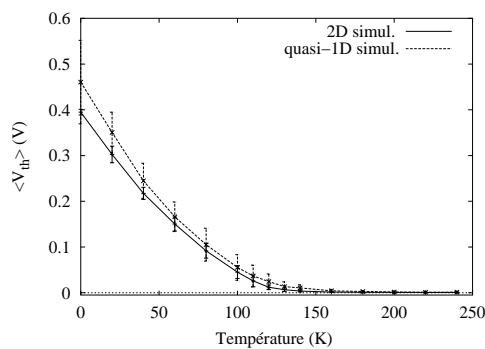
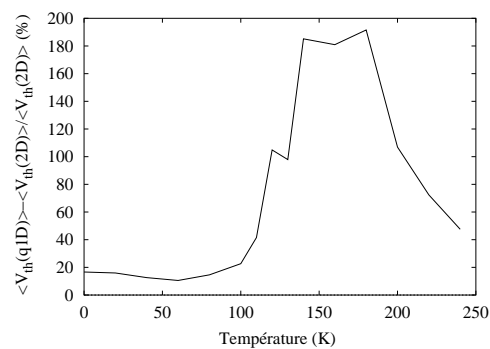
(a) Réseaux  $3 \times 3$ (b) Réseaux  $3 \times 3$ (c) Réseaux  $4 \times 4$ (d) Réseaux  $4 \times 4$ (e) Réseaux  $5 \times 5$ (f) Réseaux  $5 \times 5$ (g) Réseaux  $6 \times 6$ (h) Réseaux  $6 \times 6$ 

FIG. 4.1: Comparaison des moyennes de tension de seuil ( $\langle V_{th} \rangle$ ) obtenues par les 2 approches (a,c,e,g). Écart relatif entre la simulation quasi-1D et la simulation 2D (b,d,f,h).

delà de  $T_l$ , l'écart relatif augmente jusqu'à plus de 100 % selon les tailles de réseaux considérés.

Dans la gamme de température où  $V_{th}$  est utilisable ( $T < T_l$ ), la simulation quasi-1D de dispositifs bidimensionnels donne une très bonne idée de l'évolution de  $\langle V_{th} \rangle$  en fonction de la température.

### Réseaux tridimensionnels

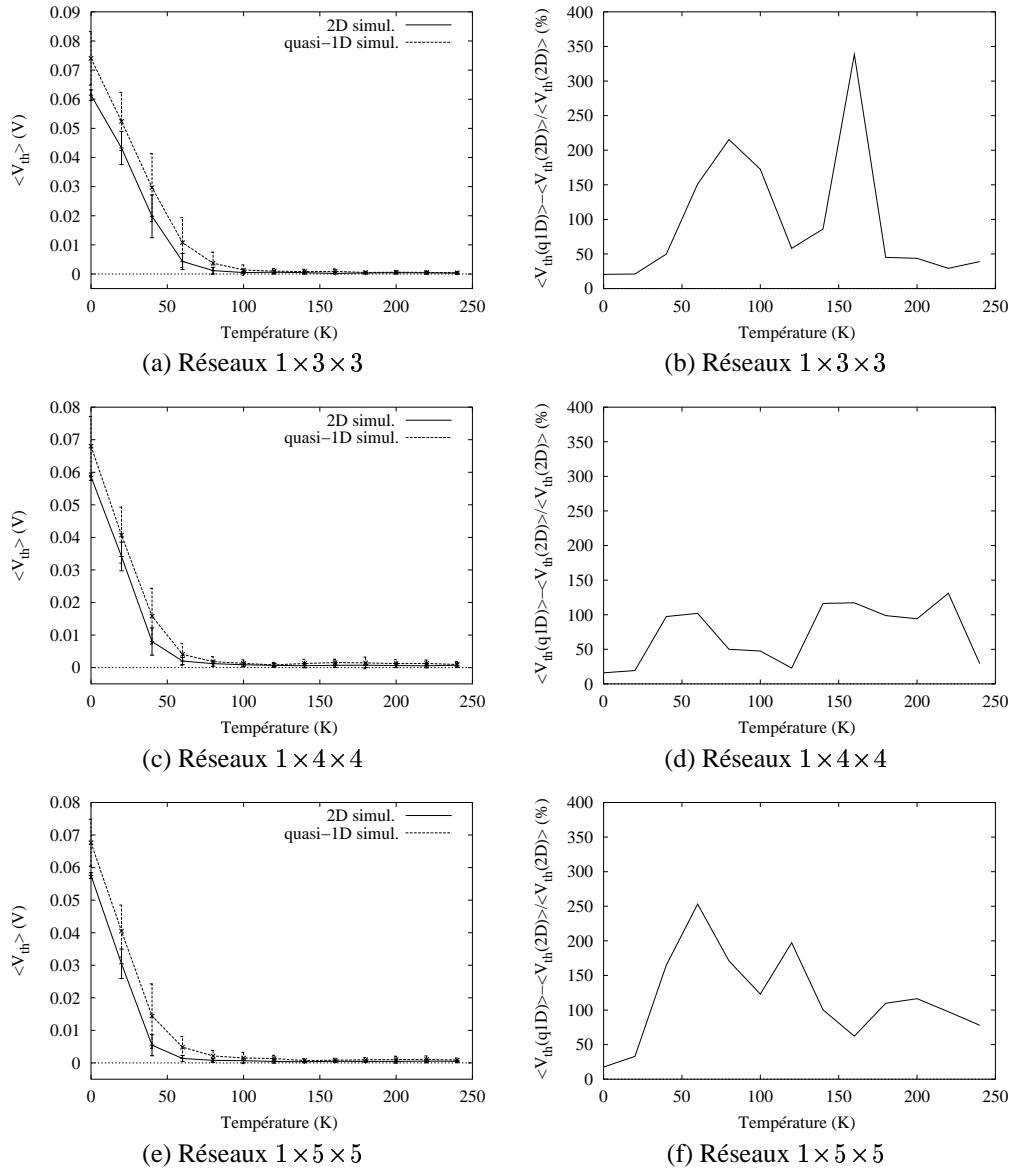


FIG. 4.2: Comparaison des moyennes de tension de seuil  $\langle V_{th} \rangle$  obtenues par les 2 approches (a,c,e). Écart relatif entre la simulation quasi-1D et la simulation 3D (b,d,f). Les dispositifs ont tous des lignes d'un seul plot.

On fait le même type d'étude que pour les réseaux bidimensionnels, mais avec des réseaux tridimensionnels de tailles  $P \times N \times N$ , où  $P$  varie entre 1 et 3 et  $N$  entre 3 et 5. Sur la figure 4.2

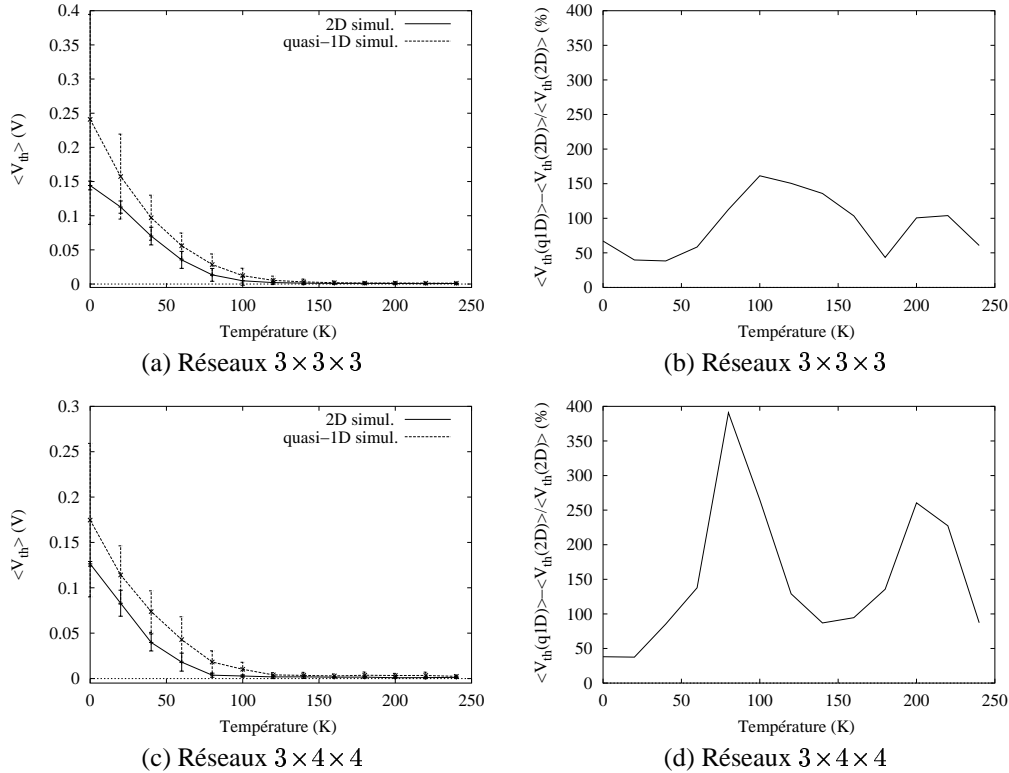


FIG. 4.3: Comparaison des moyennes de tension de seuil  $\langle V_{th} \rangle$  obtenues par les 2 approches (a,c). Écart relatif entre la simulation quasi-1D et la simulation 3D (b,d). Les dispositifs ont tous 3 plots par ligne.

nous avons regroupé les résultats pour les réseaux ayant des lignes d'un seul plot ( $P = 1$ ). Sur la figure 4.3, ce sont des réseaux ayant 3 plots sur une ligne.

L'évolution de la moyenne de la tension de seuil obtenue par les deux simulations est donnée sur les figures 4.2a, 4.2c, 4.2e, 4.3a et 4.3c. Nous avons également représenté l'écart relatif entre les valeurs estimées par l'approche quasi-1D et celles attendues (simulation tridimensionnelle).

L'étude des figures 4.2 et 4.3 montre également que l'approche quasi-1D surestime les valeurs moyennes du seuil, tout en donnant l'allure globale de l'évolution avec la température. Néanmoins, contrairement au cas bidimensionnel, l'écart relatif entre la valeur approchée et la valeur attendue varie énormément. Il n'y a plus de gamme de température pour laquelle l'écart reste faible. Celui-ci devient rapidement supérieur à 50 %.

La simulation quasi-1D permet par conséquent de déterminer l'évolution globale de  $\langle V_{th} \rangle$  avec la température, sans pour autant en donner de valeur précise.

### Dispersion du seuil $\sigma(V_{th})$

Afin de pouvoir caractériser complètement un ensemble de réseaux par l'utilisation du simulateur quasi-1D, il faut bien entendu donner une estimation correcte de  $\langle V_{th} \rangle$ , mais de plus donner une valeur correcte de la variance de la tension de seuil (afin d'estimer la dispersion des résultats).

## Réseaux bidimensionnels

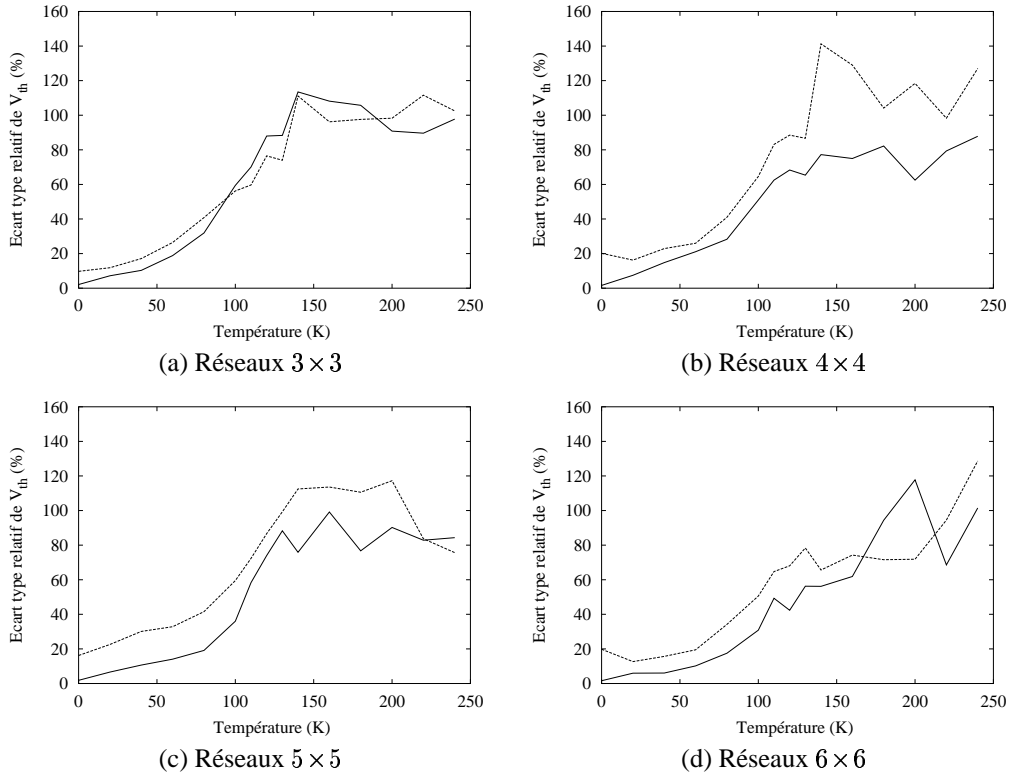


FIG. 4.4: Comparaison de la dispersion de la tension de seuil obtenue par les 2 approches pour des réseaux 2D.

La figure 4.4 donne l'écart type relatif de la tension de seuil pour différentes tailles de réseaux bidimensionnels. Nous avons représenté sur une même courbe l'écart type issu de la simulation quasi-1D comparé à celui de la simulation complète. Ces courbes sont associées aux mêmes ensembles que ceux de la figure 4.1.

L'évolution de la dispersion des valeurs de  $V_{th}$  obtenue avec l'approche quasi-1D suit très bien celle obtenue avec la simulation globale. L'accord est même bon au-delà de la température  $T_l$ , pour laquelle la valeur moyenne du seuil n'est plus correctement estimée par l'approche quasi-1D. L'écart type obtenu par la simulation quasi-1D exagère toujours un peu la tendance attendue : ici encore nous surestimons les valeurs.

## Réseaux tridimensionnels

La figure 4.5 présente la comparaison des écarts types relatifs obtenus par l'approche quasi-1D ou par le calcul complet pour des dispositifs tridimensionnels. Les dimensions de réseaux considérés correspondent aux mêmes ensembles que ceux des figures 4.2 et 4.3.

On observe que la tendance de l'évolution de l'écart type est reproduite, même si l'on n'a pas toujours un aussi bon accord que pour le cas bidimensionnel. La dispersion à haute température est relativement bien reproduite, alors que ce n'est pas toujours le cas à basse température.



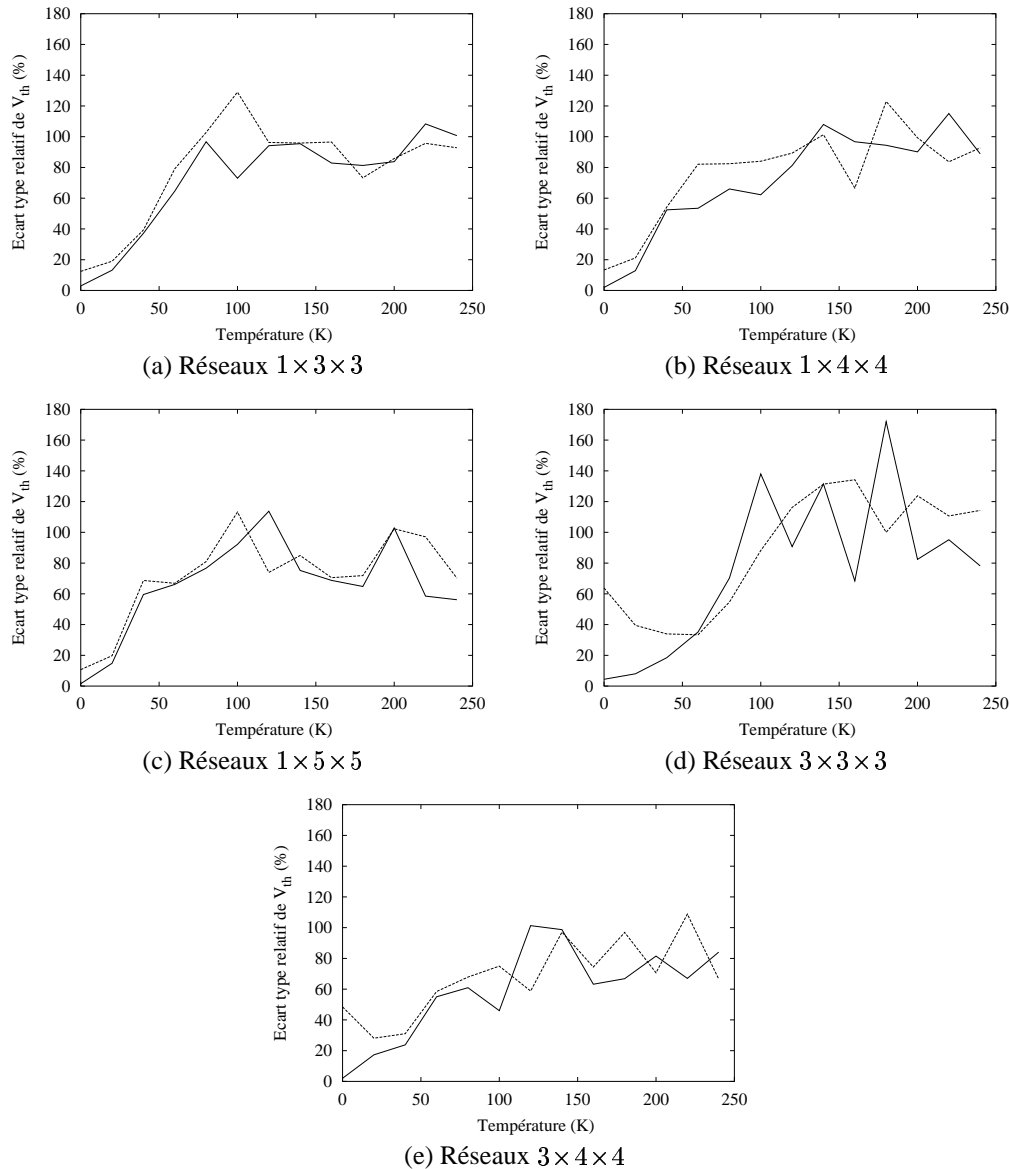


FIG. 4.5: Comparaison de la dispersion de la tension de seuil obtenue par les 2 approches pour des réseaux 3D.

## 4.4 Conclusion

La simulation quasi-1D permet, comme nous avons pu le constater avec le tableau 4.1, de gagner un ordre de grandeur sur la durée de simulation de réseaux bidimensionnels et deux ordres de grandeur pour les dispositifs tridimensionnels.

Néanmoins le gain seul ne permet pas de juger de l'intérêt de la méthode, il est en effet nécessaire que les résultats soient fiables. C'est le cas des dispositifs bidimensionnels pour lesquels l'approche quasi-1D est en très bon accord avec les résultats de la méthode classique. Par contre, il n'en est pas de même pour les dispositifs tridimensionnels. Dans ce cas, seule l'allure de l'évolution de la moyenne de la tension de seuil avec la température peut être estimée.

## Bibliographie

- [1] Y. Leroy, A.S. Cordan, and A. Goltzené. “Assessment of the minimal resistance path calculation technique for disordered 2D multitunnel devices”. *Comp. Mat. Sci.*, 21(2), pp 214–220, 2001.
- [2] Y. Leroy, A.S. Cordan, and A. Goltzené. “Reduction of the threshold voltage dispersion in nanometer-sized arrays showing Coulomb blockade”. *Mat. Sci. Eng. C*, 15(1-2), pp 49–51, 2001.
- [3] A. S. Cordan, A. Goltzené, Y. Hervé, M. Mejias, C. Vieu, and H. Launois. “Electron transport in metallic dot arrays : Effect of a broad dispersion in the tunnel junction dimensions”. *J. Appl. Phys.*, 84(7), pp 3756–3763, 1998.



# Chapitre 5

## Résultats

### 5.1 Objectifs

Le but essentiel de mon travail de thèse est d'aboutir à un simulateur de dispositifs basés sur des réseaux de jonctions tunnel, permettant de prévoir leurs caractéristiques électriques. Dans cette optique, il est nécessaire de prévoir aussi bien que possible le comportement qui serait observé expérimentalement. Nous devons donc être à même de reproduire l'évolution temporelle du courant à tension constante (caractéristiques  $I(t)$ ), l'évolution du courant moyen en fonction de la tension appliquée (caractéristiques  $I(V)$ ), et l'évolution de la tension de seuil des dispositifs en fonction de la température de fonctionnement (caractéristiques  $V_{th}(T)$ ).

En second lieu, puisque nous considérons des réseaux fortement désordonnés, nous devons être capables de caractériser l'influence de ce désordre sur la dispersion des caractéristiques précédentes.

Pour l'ensemble des simulations effectuées ici, nous avons fixé le rayon des plots à  $r = 3 \text{ nm}$ . Nous maintenons cette dimension de plot de façon à pouvoir comparer les différentes simulations entre elles. Les constantes des matériaux restent  $E_F \simeq 5 \text{ eV}$  pour le métal et  $\Phi \simeq 4 \text{ eV}$  pour la hauteur de barrière.

### 5.2 Caractéristiques électriques : validation du simulateur

Afin de valider le simulateur, la première étape est la comparaison des caractéristiques simulées et des courbes expérimentales, en tout cas au moins de leur allure générale. En effet, les distances inter-plots comme les dimensions des plots eux-mêmes sont connues avec une précision relativement faible. Cette incertitude vient essentiellement de la difficulté de la mesure, et de la définition même des limites, compte tenu du fait que les distances inter-atomiques sont de l'ordre de  $0.2$  à  $0.3 \text{ nm}$ , ce qui n'est pas négligeable pour  $r = 3 \text{ nm}$ , ou pour des distances inter-plots de l'ordre de  $1 \text{ nm}$ . Il faut donc travailler sur des réseaux similaires aux dispositifs expérimentaux, et voir si les tendances et les ordres de grandeur sont retrouvés.

## 5.2.1 Courant dans les dispositifs ( $I(t)$ , $I(V)$ )

Dans un premier temps, nous cherchons à voir si le comportement temporel est bien reproduit. Ensuite, le comportement en fonction de la tension entre les électrodes de drain et de source sera étudié.

### 5.2.1.1 Évolution temporelle

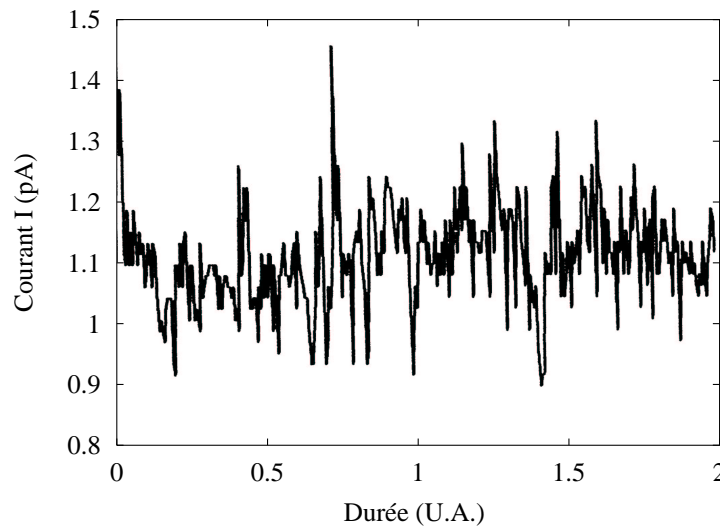


FIG. 5.1: Évolution temporelle du courant électrique (résultats expérimentaux de C. VIEU et A. PÉPIN (L2M); communication privée).

La figure 5.1 donne un exemple d'évolution temporelle du courant pour un dispositif multi-jonctions tunnel. Chaque point sur la courbe est le résultat du cumul d'environ  $10^3$  charges  $e$  aux bornes des électrodes de mesure. Comme le courant résulte d'évènements tunnel poissonniens, l'écart type du bruit est donné par  $\sigma(I) = \langle I \rangle / \sqrt{N_c}$  où  $N_c$  est le nombre d'évènements utilisés pour déterminer les différentes valeurs de  $I$ . Pour  $N_c = 10^3$ , le bruit attendu pour ce type d'évolution sera donné par un écart type de 3.2 %.

Dans nos simulations, les caractéristiques  $I(t)$  sont calculées grâce à la formule (3.21). Afin d'être le plus près possible des conditions expérimentales, nous prenons également  $N_c = 10^3$  dans le calcul. De cette façon, pour un réseau unidimensionnel et bidimensionnel, nous obtenons les courbes 5.2 et 5.3. Nous constatons qu'elles reproduisent bien le bruit de grenaille attendu, et que les allures sont similaires à la courbe expérimentale.

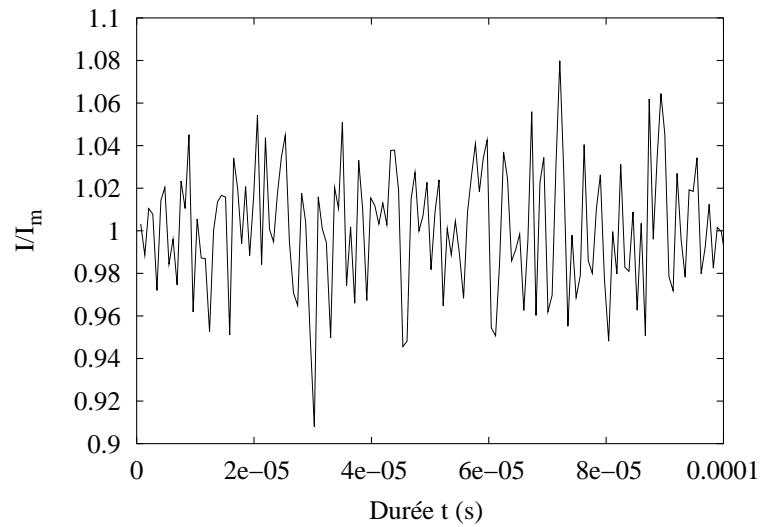


FIG. 5.2: Évolution temporelle du courant pour un réseau 1D de  $5 \times 1$  plots. La courbe est obtenue pour  $T = 50$  K, sous une tension  $V = 0.75$  V. Chaque point représente le passage de  $10^3$  électrons à travers le réseau. La courbe est normalisée par rapport au courant moyen  $I_m = 233$  pA, de façon à déterminer l'amplitude du bruit (écart type relatif de 2.9 %).

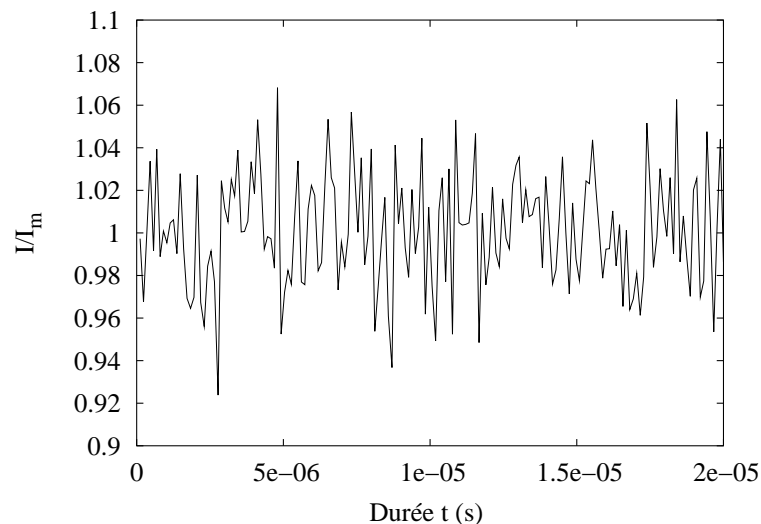


FIG. 5.3: Évolution en fonction du temps du courant à travers un réseau 2D de  $5 \times 5$  plots. La courbe est obtenue pour  $T = 50$  K, à une tension drain-source de 0.42 V. Pour chaque point de la courbe,  $10^3$  électrons ont transité à travers le dispositif. La courbe est normalisée par rapport au courant moyen  $I_m = 1.4$  nA, de façon à déterminer l'amplitude du bruit (écart type relatif de 2.6 %).

### 5.2.1.2 Courbes courant-tension ( $I(V)$ )

La figure 5.4 présente l'évolution du courant à travers un réseau de  $8 \times 5$  plots en fonction de la tension entre l'électrode de drain et de source. Les plots ont un diamètre de  $4 \text{ nm}$ , et sont obtenus par évaporation thermique [1,2]. La mesure est effectuée à différentes températures de façon à pouvoir déterminer l'évolution de la tension de seuil  $V_{th}$  (voir la figure 5.6).

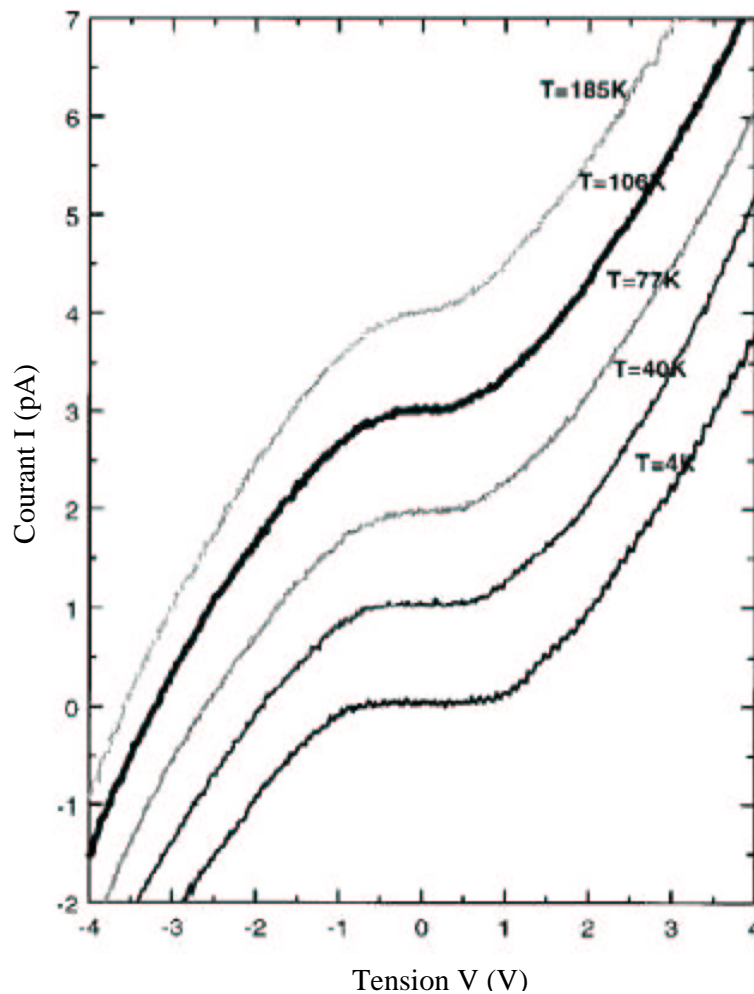


FIG. 5.4: Mesures de caractéristiques courant-tension à différentes températures pour un dispositif expérimental de  $8 \times 5$  plots. Pour plus de lisibilité, chaque courbe est décalée de  $1 \text{ pA}$  (résultats expérimentaux de C. VIEU et A. PÉPIN (L2M)).

La figure 5.5 montre la simulation des courbes d'évolution du courant en fonction de la tension entre les électrodes de drain et de source, pour un réseau de  $5 \times 5$  plots, à différentes températures. Nous constatons que le comportement général avec la tension est le même que pour la figure précédente. Les valeurs du courant diffèrent car nous avons considéré des plots ayant un diamètre de  $6 \text{ nm}$  et des distances inter-plots  $d$  dans l'ensemble  $0.3 - 0.7 \text{ nm}$ . Néanmoins, le comportement par rapport à la tension appliquée et à la température est analogue.

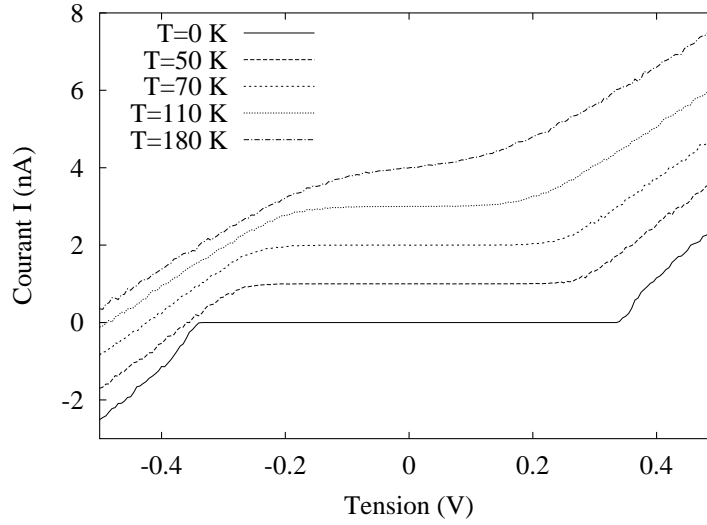


FIG. 5.5: Figure illustrant la variation du courant électrique avec la tension appliquée, pour différentes températures. Pour plus de lisibilité, nous avons décalé de 1 nA les courbes pour chaque température. La simulation a été effectuée sur un réseau de  $5 \times 5$  plots.

### 5.2.2 Tension de seuil ( $V_{th}$ )

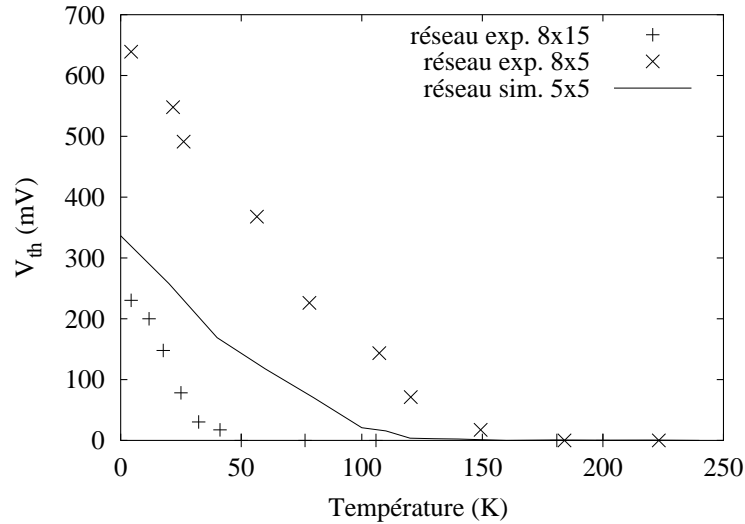


FIG. 5.6: Comparaison de l'évolution en température de la tension de seuil simulée d'un réseau 2D (courbe continue) avec des mesures expérimentales (croix).

La figure 5.6, montre la comparaison de courbes tension de seuil-température pour des réseaux expérimentaux et simulés [1,2]. Les valeurs de  $V_{th}$  en fonction de la température, ainsi que celles de  $T_c$  (température au-delà de laquelle la tension de seuil n'est plus significative, *i.e.*  $V_{th}(T_c) \simeq 0$ ), diffèrent car les réseaux considérés n'ont pas tous la même taille, ni les mêmes diamètres de plots. Les courbes expérimentales sont obtenues avec des plots de 4 nm de diamètre alors que la courbe simulée correspond à des plots de 6 nm de diamètre.



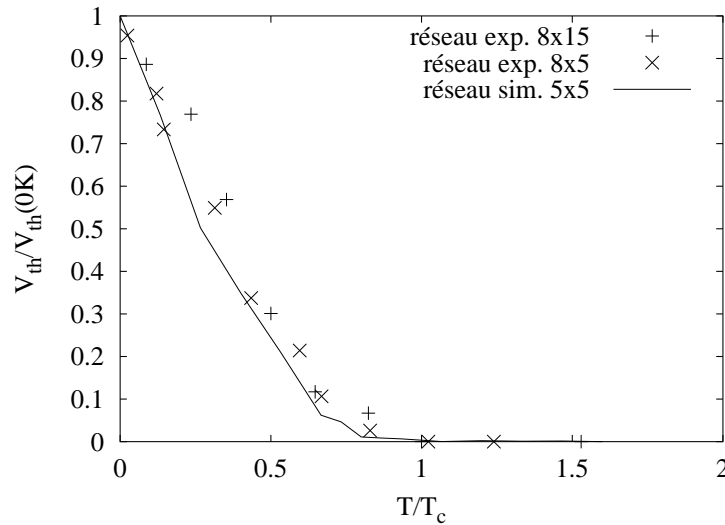


FIG. 5.7: Comparaison des courbes normalisées de tension de seuil simulée d'un réseau 2D avec des mesures expérimentales. Nous avons tracer les courbes en les normalisant par rapport à la tension de seuil à  $T = 0 K$  en fonction de la température rapportée à la température  $T_c$  des dispositifs ( $V_{th}(T_c) \simeq 0$ ).

Afin de vérifier que la tendance de l'évolution simulée en température est correcte, on normalise les courbes de la figure précédente. La figure 5.7 montre la comparaison dans ce cas. Les courbes sont normalisées par rapport à leur tension de seuil à température nulle,  $V_{th}(0 K)$ , et sont tracées en fonctions de  $T/T_c$ . On constate que le comportement en fonction de la température est le même pour les courbes mesurées et simulées. Nous reproduisons donc bien le comportement en température.

### 5.2.3 Validation

La conclusion des courbes 5.1 à 5.7 est que le simulateur est bien validé par les expériences. En effet, les courbes d'évolution temporelle du courant redonnent bien le bruit de grenaille caractéristique de mouvements tunnel. Lorsque la température croît, les caractéristiques courant-tension suivent bien le comportement expérimental. Et finalement, la décroissance expérimentale de la tension de seuil avec la température, et d'une manière générale, les ordres de grandeur sont bien décrits par notre simulation.

Le simulateur réalisé reproduit donc de façon satisfaisante les différentes caractéristiques électriques qui sont accessibles expérimentalement pour des dispositifs multi-jonctions tunnel. Il est donc maintenant possible de l'utiliser pour caractériser de manière plus systématique des dispositifs, en fonction des différents paramètres dimensionnels. En effet, nous pouvons créer autant de réseaux que nécessaire, avec un contrôle total sur le nombre de plots et leurs dimensions. Ceci correspondrait à des investissements expérimentaux très lourds, et sans doute irréalistes au stade actuel s'il fallait réaliser les mêmes composants.

## 5.3 Influence des paramètres des réseaux

Nous pouvons aisément concevoir l'influence de la taille d'un réseau sur ses caractéristiques électriques. C'est ce que nous allons examiner dans cette partie.

### 5.3.1 Caractéristiques temporelles

Le premier effet observé dépend de la dimensionnalité des réseaux. Comme nous l'avons précisé au paragraphe 5.2.1.1, pour  $N_c = 10^3$ , les courbes d'évolution temporelle prévue pour le courant sont caractérisées par un bruit de grenaille ayant une amplitude relative de 3.2 %. Cependant, expérimentalement, des fluctuations géantes ont été observées sur des réseaux bidimensionnels (Fig. 5.8). Nous allons montrer que ce type de fluctuations est propre aux réseaux à deux dimensions.

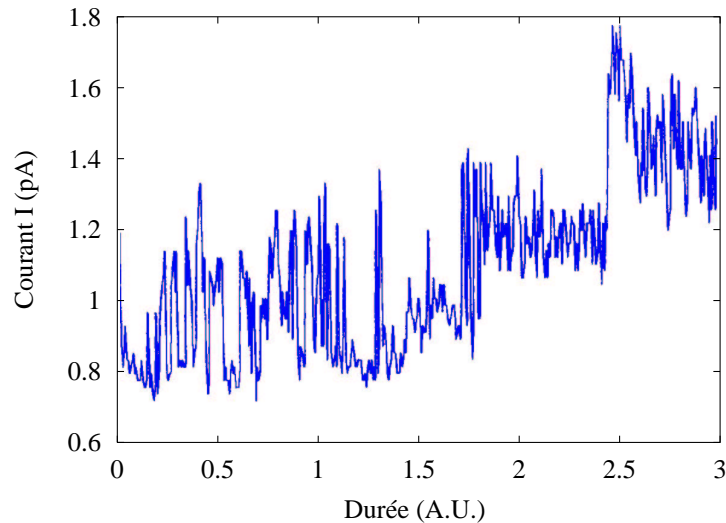


FIG. 5.8: *Fluctuations géantes du courant électrique (résultats expérimentaux de C. VIEU et A. PÉPIN (L2M); communication privée).*

Les investigations faites par simulation sur des réseaux unidimensionnels n'ont pas permis d'obtenir ce type de fluctuations. Quels que soient les réseaux à une dimension considérés, l'amplitude du bruit n'excède pas les 3.2 % attendus. Il semble donc que les fluctuations géantes n'apparaissent jamais dans les conditions équivalentes aux simulations.

La même étude a été menée pour les réseaux bidimensionnels. Nous pouvons regrouper ceux-ci en deux catégories, d'après leur réponse  $I(t)$ . La première catégorie regroupe des réseaux pour lesquels l'amplitude du bruit ne dépasse pas 3 % : ceci correspond en fait à la majorité des réseaux considérés. La seconde catégorie englobe des réseaux présentant des fluctuations géantes, comme l'illustre la figure 5.9.

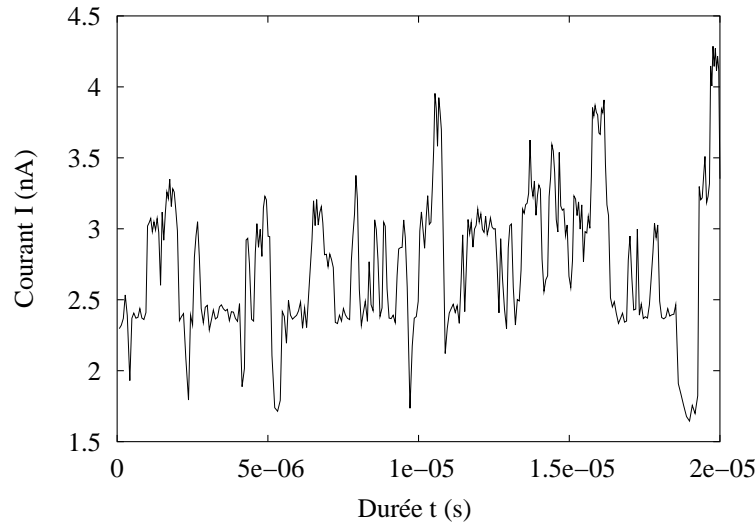


FIG. 5.9: Courbe d'évolution du courant électrique dans un dispositif typique. La simulation est effectuée à  $T = 50$  K sur un réseau  $5 \times 5$  présentant un chemin de conduction dominant. Nous retrouvons les fluctuations géantes observées expérimentalement (Fig. 5.8).

L'étude systématique des réseaux bidimensionnels a montré que les réseaux du deuxième groupe comportaient un chemin de conduction dominant, formé de jonctions beaucoup plus courtes que sur les autres chemins. Une analyse fine de ce phénomène a pu mettre en évidence le fait que l'apparition des fluctuations géantes est due à la présence de charges sur les plots extérieurs au chemin de conduction ; ces derniers jouent alors un rôle de perturbation pour le chemin principal [3]. En effet, s'ils peuvent stocker des électrons durant un temps relativement long par rapport au temps de transit des charges dans le chemin de conduction dominant, ces charges stockées vont perturber le potentiel des plots. Pendant toute cette période, le courant à travers le dispositif est augmenté ou diminué, par rapport à l'état sans charge stockée. Lorsque les charges sont libérées, le courant revient à son ancien niveau.

Bien évidemment, l'existence de défauts doit aussi être envisagée pour expliquer les fluctuations géantes dans des réseaux bidimensionnels [4], mais comme dans le cadre de nos simulations les défauts ne sont pas pris en compte, l'origine du bruit provient bien de la nature bidimensionnelle des réseaux.

Il est donc logique que ce type de bruit ne puisse être observé sur des réseaux unidimensionnels isolés, du fait de la topologie même de ces derniers. Ces dispositifs ne possèdent pas en effet de plots voisins pouvant perturber la conduction dans le réseau. Néanmoins, un bruit similaire peut aussi apparaître, si l'on considère l'existence de défauts au voisinage du réseau [5–7]. Ils jouent alors le rôle de plots perturbatifs pour le chemin de conduction. L'origine du bruit correspond bien à un caractère bidimensionnel du problème. On aura là encore l'équivalent d'un réseau avec un chemin de conduction dominant, et des "plots" latéraux à plusieurs états de charge, avec des processus piègeage-dépiégeage à très faible fréquence.

### 5.3.2 Tension de seuil $V_{th}$

La connaissance de la tension de seuil d'un dispositif est une information importante pour l'évaluation de l'applicabilité des dispositifs multi-jonctions tunnel. En effet, une tension de seuil non nulle est nécessaire pour inclure ces réseaux dans un transistor, en utilisant une grille. Afin de savoir si les réseaux étudiés peuvent être intéressants dans la suite, il faut connaître d'une part l'évolution de la moyenne de  $V_{th}$  et d'autre part l'évolution de la dispersion de cette tension en fonction des tailles de réseaux et de la température.

Les réseaux étudiés ici sont désordonnés. Nous calculons donc la tension de seuil pour un ensemble de vingt réseaux de même taille, et nous en déduisons la valeur moyenne  $\langle V_{th} \rangle$  en fonction de la température. Ensuite, nous évaluons la dispersion due au désordre, toujours à partir des résultats sur les ensembles de réseaux.

#### 5.3.2.1 Comportement moyen

Nous avons représenté sur la figure 5.10 l'évolution de la tension de seuil moyenne  $\langle V_{th} \rangle$  en fonction de la température pour des réseaux unidimensionnels  $M \times 1$  (Fig. 5.10a) et bidimensionnels carrés  $M \times M$  (Fig. 5.10b). La taille  $M$  des réseaux varie de 1 à 5 pour les dispositifs unidimensionnels et de 2 à 6 pour les dispositifs bidimensionnels.

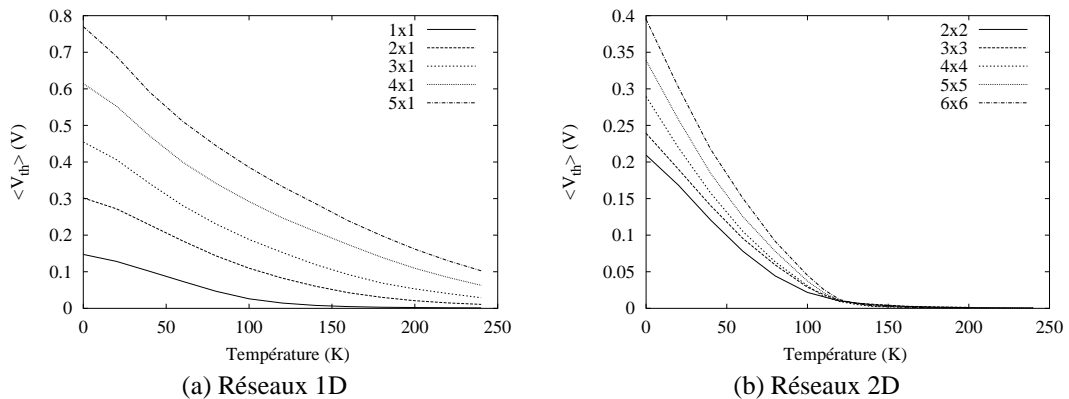


FIG. 5.10: Évolution de la tension de seuil moyenne  $\langle V_{th} \rangle$  en fonction de la température, pour différentes tailles de réseaux 1D et 2D.

La figure 5.10a nous indique que la tension de seuil augmente avec la taille  $M$  des réseaux, de même que la température  $T_c$ . Celle-ci devient rapidement supérieure à 240 K (dès  $M = 3$ ). De la même façon, la figure 5.10b montre que pour les réseaux bidimensionnels,  $V_{th}$  augmente aussi avec  $M$ . Néanmoins, dans ce dernier cas, la température  $T_c$  semble rester constante. On peut noter que pour des longueurs de lignes égales, les réseaux bidimensionnels ont des tensions de blocage plus faibles que pour les réseaux unidimensionnels.

Pour évaluer le comportement de  $V_{th}$  avec la taille des réseaux, nous avons représenté  $V_{th}(M)$  sur la figure 5.11 à une température de 40 K, pour les dispositifs unidimensionnels et bidimensionnels. Nous constatons sur la figure 5.11a, que la tension de seuil à basse température évolue de manière quasi-proportionnelle avec la taille des réseaux unidimensionnels. En effet,  $V_{th}$  suit la loi  $aM^\alpha + b$  avec  $\alpha \simeq 1$ ,  $a = 0.12$  et  $b \simeq -0.02$ . On remarque également que la tendance est conservée lorsque la température augmente (Fig. 5.10a). La figure 5.11b montre

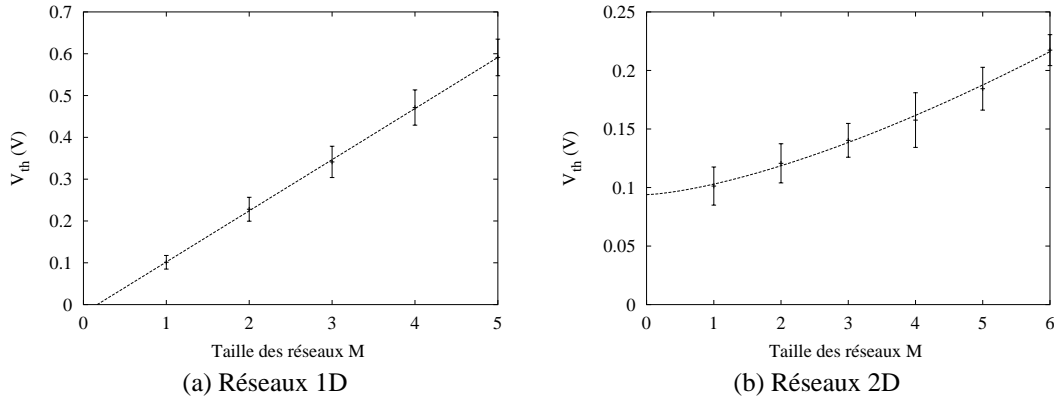


FIG. 5.11: Évolution de la tension de seuil moyenne  $\langle V_{th} \rangle$  en fonction de la taille  $M$  des réseaux 1D et 2D, à une température  $T = 40$  K. La courbe indiquée en pointillés donne la courbe  $\langle V_{th} \rangle = aM^\alpha + b$  ( $\alpha \simeq 1$  à 1D et  $\alpha \simeq 3/2$  à 2D).

que l'évolution de la tension de seuil est moins rapide que  $M$  pour les réseaux bidimensionnels. En effet, la loi d'évolution  $aM^\alpha + b$  est assez bien décrite par  $\alpha \simeq 3/2$  mais  $a \simeq 0.01$  et  $b \simeq 0.1$ . La tendance semble se poursuivre pour des températures plus élevées.

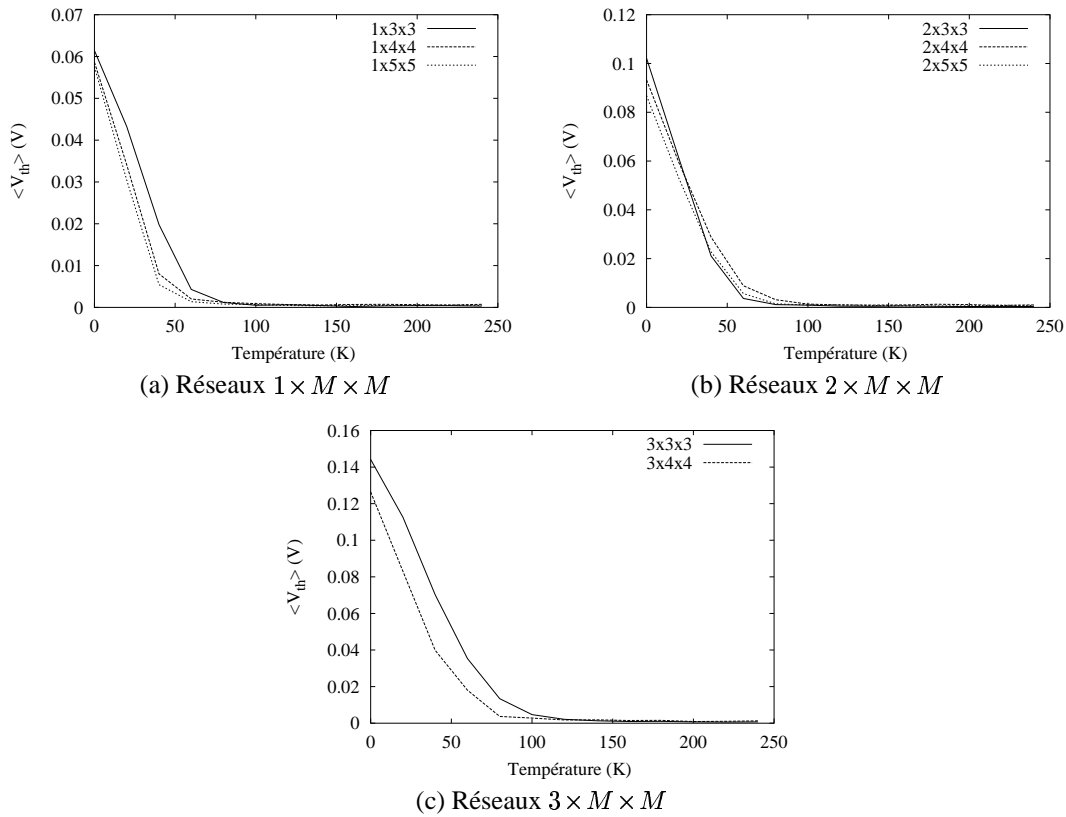


FIG. 5.12: Évolution de la tension de seuil moyenne  $\langle V_{th} \rangle$  en fonction de la température, pour différentes tailles de réseaux 3D. La longueur des lignes augmente en passant de (a) à (c).

La figure 5.12 présente l'évolution de la tension de seuil moyenne en fonction de la température pour des réseaux tridimensionnels. Nous avons regroupé sur une même courbe l'évolution de réseaux ayant des lignes de même longueur. Ainsi, les courbes 5.12a, 5.12b et 5.12c montrent respectivement l'influence de la taille  $M$  de réseaux  $1 \times M \times M$ ,  $2 \times M \times M$  et  $3 \times M \times M$ .

La figure 5.12 montre que pour des lignes de même longueur, la tension de seuil est plus faible que dans le cas bidimensionnel et unidimensionnel. Par contre, pour des réseaux ayant le même nombre de lignes et de plans, la tension de seuil augmente avec la longueur des lignes (passage de la figure 5.12a à la figure 5.12c). La température  $T_c$  semble donc bien varier selon la longueur des lignes.

### 5.3.2.2 Dispersion de $V_{th}$

Les résultats sur les ensembles de dispositifs ont permis d'étudier le comportement de la moyenne de la tension de seuil en fonction de la taille des réseaux. Ils nous donnent également la dispersion de  $V_{th}$  autour de sa valeur moyenne. Pour ce faire, nous déterminons pour chaque taille considérée l'écart type de la tension de seuil à partir des résultats de chaque ensemble statistique.

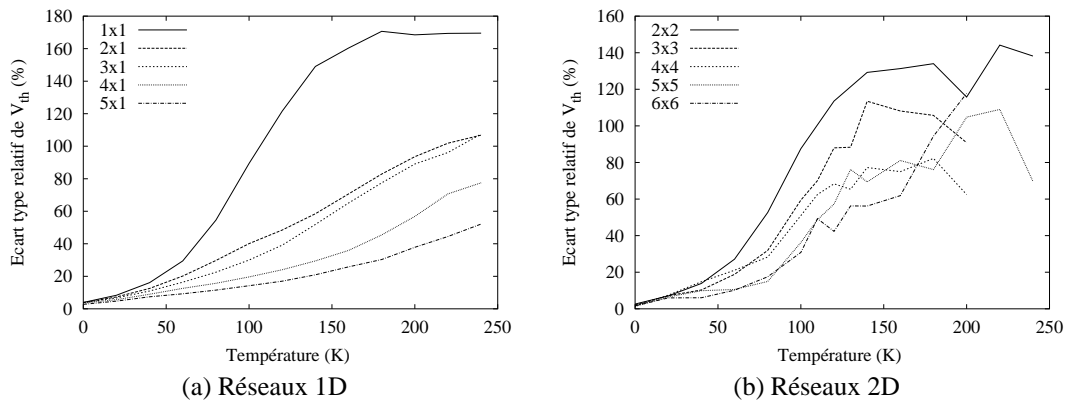


FIG. 5.13: Dispersion relative de la tension de seuil  $V_{th}$  en fonction de la température pour des réseaux 1D et 2D de différentes tailles.

La figure 5.13 présente la dispersion relative de la tension de seuil de dispositifs unidimensionnels et bidimensionnels. Nous avons tracé, en fonction de la température, le rapport de l'écart type de  $V_{th}$  sur la valeur moyenne correspondante,  $\sigma(V_{th})/\langle V_{th} \rangle$ .

Pour les réseaux unidimensionnels (Fig. 5.13a), la dispersion augmente avec la température, cependant d'autant moins vite que la longueur de la ligne augmente. Ainsi, les dispositifs monoplots dépassent les 100 % de dispersion dès 100 K, alors que pour la ligne de cinq plots la dispersion n'a pas encore atteint 60 % à 240 K. L'augmentation de la longueur des lignes permet donc de diminuer la dispersion de  $V_{th}$ .

Pour les réseaux bidimensionnels également (5.13b), la dispersion augmente avec la température, mais diminue avec l'augmentation de la taille des réseaux. Néanmoins dans ce cas précis, la diminution est beaucoup plus faible, puisque déjà au dessus de 100 K, la dispersion reste supérieure à 60 %.

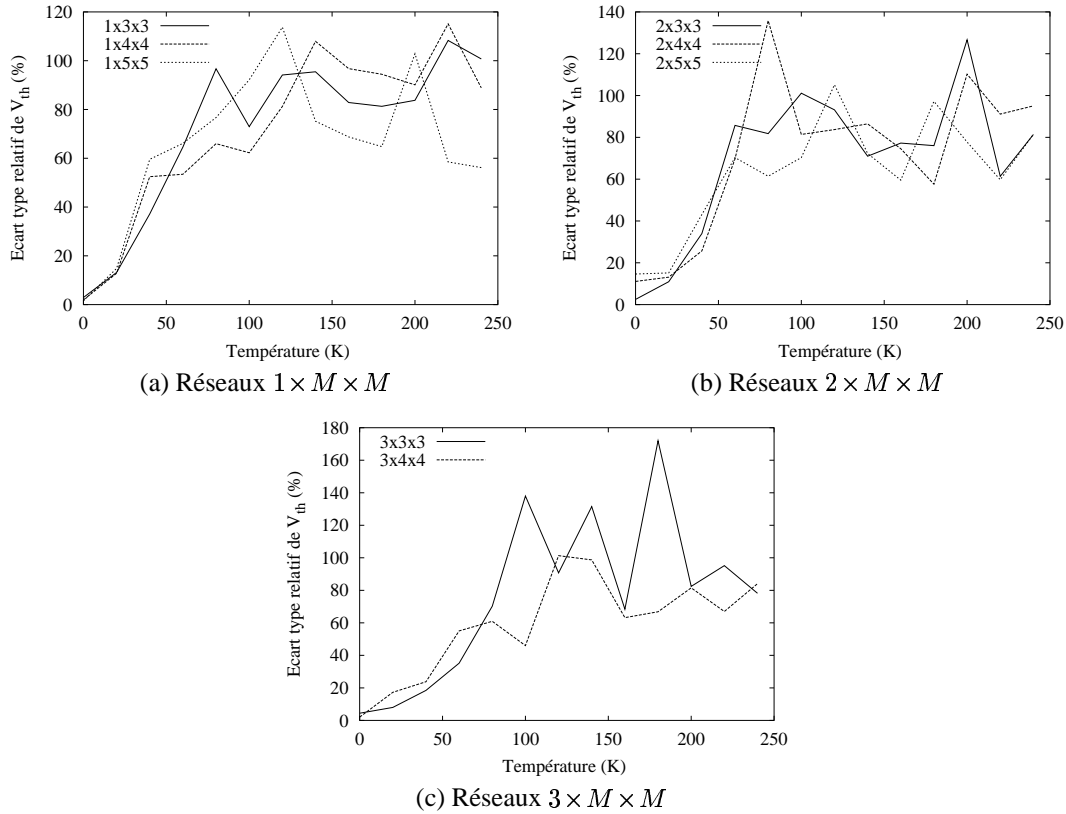


FIG. 5.14: Dispersion relative de  $V_{th}$  en fonction de la température pour des réseaux 3D de différentes tailles. Les réseaux ont des lignes de longueur 1 plot (a), 2 plots (b) et 3 plots (c).

La figure 5.14 présente les résultats des calculs de dispersion pour des réseaux tridimensionnels. Nous avons tracé la dispersion relative en fonction de la température pour trois familles de dispositifs ayant des longueurs de ligne différentes.

La tendance reste la même que pour les réseaux précédents, la dispersion augmente avec la température. Toutefois, nous ne retrouvons plus la décroissance systématique avec l'augmentation de la taille des réseaux. Le comportement est plus chaotique. Ici encore, comme pour le cas bidimensionnel, la dispersion devient très vite supérieure à 60 %.

### 5.3.2.3 Réduction de la dispersion

Au vu des courbes 5.10 à 5.14, il apparaît clairement que les dispositifs unidimensionnels sont les plus intéressants du point de vue de l'application. La tension de seuil augmente vite avec  $N_x$ , et la dispersion peut en effet être réduite à une valeur inférieure à 10 – 15 %, seuil fatidique au-delà duquel l'intégration dans des circuits ne peut plus être envisagée.

Malheureusement, il a été prouvé qu'avec les procédés de fabrication des dispositifs étudiés ici, le rendement de fabrication des réseaux à une dimension est très faible [8]. Dans ces conditions, il faut envisager un moyen pour réduire la dispersion de  $V_{th}$  dans les réseaux à deux dimensions.

Nous proposons une solution qui a été validée par nos simulations numériques et qui nous semblerait la plus réalisable expérimentalement [9,10].

Intuitivement, à haute température, l'évolution de la tension de seuil devrait être liée à la résistance des dispositifs. La dispersion provient alors d'une disparité dans les résistances équivalentes des réseaux. Pour pouvoir homogénéiser cette résistance équivalente, il suffit d'avoir une résistance plus grande que toutes les autres sur chaque ligne. Or il n'est pas possible de contrôler toutes les distances inter-plots. La seule solution réaliste du point de vue technique est de placer ces résistances en bout de chaque ligne, ce qui correspond à une distance plus grande des jonctions proches d'une électrode. Ceci pourrait être envisageable avec une technique d'auto-alignement sur les électrodes. La réalisation se ferait alors soit par la croissance contrôlée d'un isolant sur les électrodes, soit par une légère inclinaison lors de l'évaporation de la couche d'or. Dans ce dernier cas, la longueur des jonctions ne sera contrôlable que d'un seul côté : nous nous sommes donc placés dans cette optique, *a priori* moins favorable, pour la validation de cette solution.

Dans la pratique, pour les simulations, les distances inter-plots sont choisies dans l'ensemble  $0.3 - 0.7 \text{ nm}$ , sauf pour les jonctions proches de l'électrode source, où les jonctions ont des valeurs prises entre  $0.8 \text{ nm}$  et  $1 \text{ nm}$ . Les résultats obtenus dans ces conditions sont regroupés sur la figure 5.15.

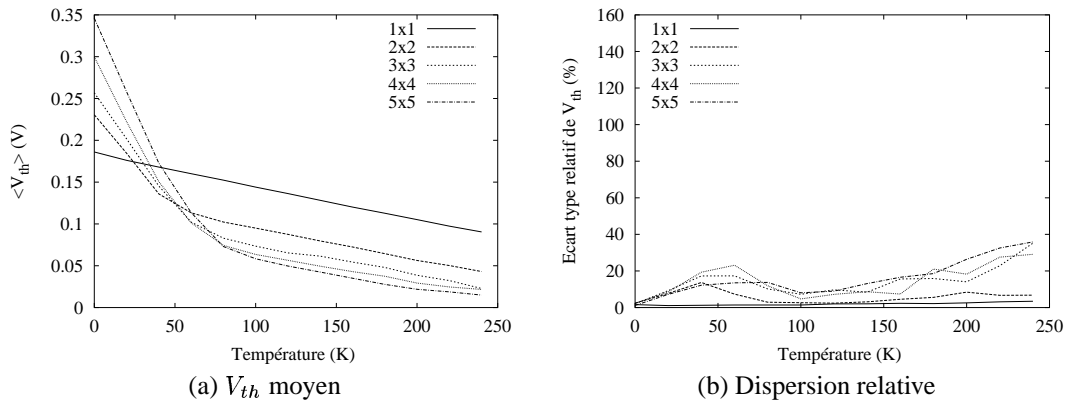


FIG. 5.15: Tension de seuil moyenne  $V_{th}$  (a) et dispersion relative (b) en fonction de la température pour des réseaux 2D corrigés de différentes tailles. Pour la dispersion, l'échelle est la même que sur la figure 5.13b.

La figure 5.15b montre bien la réduction apportée à la dispersion de  $V_{th}$ . En effet, elle reste inférieure à 40 % quelle que soit la température. Un effet secondaire de la modification des réseaux est une augmentation importante de la valeur de  $V_{th}$  à haute température (Fig. 5.15a), mais elle s'accompagne d'une diminution du courant à travers le dispositif.

On peut noter que la modification décrite ci-dessus permet également d'éliminer les fluctuations géantes décrites au paragraphe 5.3.1 [3].



## 5.4 Conclusion

Le premier résultat est la validation du simulateur, par la comparaison des caractéristiques  $I(t)$ ,  $I(V)$  et  $V_{th}(T)$  simulées et expérimentales, sur des réseaux aussi proches que possible.

C'est cette validation qui nous a permis de réaliser une étude systématique de l'effet des paramètres de ces réseaux sur les caractéristiques électriques. Nous avons évidemment retrouvé, au moins à basse température, les résultats obtenus par la plupart des auteurs à  $0\text{ K}$ , à savoir un accroissement de  $V_{th}$  avec le nombre  $N_x$  de plots sur une ligne.

Pour des réseaux à deux ou trois dimensions, les seuls dont le rendement de fabrication est élevé, le gain est moins intéressant. Cependant, le point le plus important, qui n'a pas été cité dans les prévisions concernant l'avenir de cette voie, est l'apparition rapide d'une dispersion catastrophique dès  $T_c/2$ .

On peut espérer conserver, comme le montre la figure 5.16,  $V_{th} \neq 0$  jusqu'à la température ambiante avec des valeurs du rayon  $r$  des plots plus petites. Toutefois, cette voie reste sans intérêt si la dispersion n'est pas réduite. Nous avons donc proposé une solution, validée par simulation. Il reste évidemment à la vérifier par l'expérience.

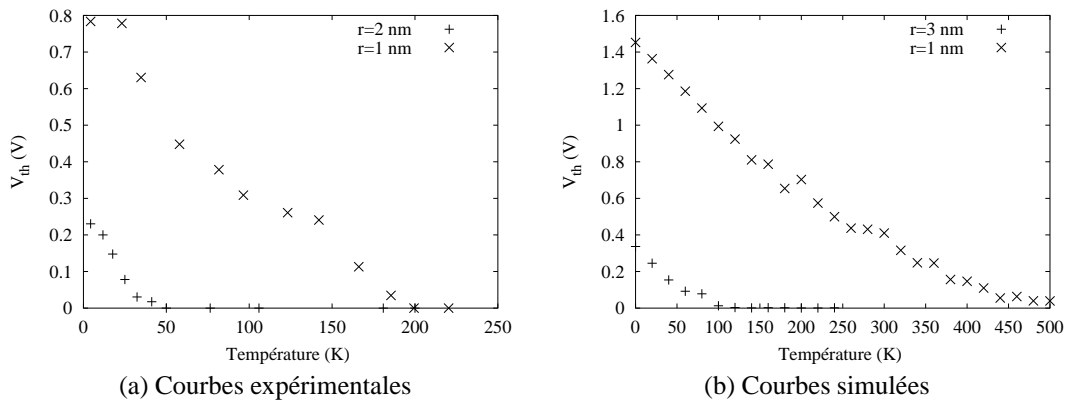


FIG. 5.16: Courbes expérimentales et simulées illustrant l'effet de la diminution du rayon  $r$  des plots sur les valeurs de  $V_{th}$ . (a) Courbes expérimentales obtenues pour des réseaux de  $8 \times 15$  plots ( $r = 2\text{ nm}$ ) et de  $5 \times 20$  plots ( $r = 1\text{ nm}$ ). (b) Courbes simulées obtenues pour le même réseau de  $5 \times 5$  plots.

## Bibliographie

- [1] A. Pépin, C. Vieu, M. Mejias, Y. Jin, F. Carcenac, J. Gierak, C. David, L. Couraud, H. Launois, A. S. Cordan, Y. Leroy, and A. Goltzené. “Temperature evolution of multiple tunnel junction devices made with disordered two-dimensional arrays of metallic islands”. *Appl. Phys. Lett.*, 74(20), pp 3047–3049, 1999.
- [2] A. S. Cordan, Y. Leroy, A. Goltzené, A. Pépin, C. Vieu, M. Mejias, and H. Launois. “Temperature behavior of multiple tunnel junction devices based on disordered dot arrays”. *J. Appl. Phys.*, 87(1), pp 345–352, 2000.
- [3] A.S. Cordan, Y. Leroy, and A. Goltzené. “Suppression of large current fluctuation in 2D nanometer-size multijunctions”. *Mat. Sci. Eng. C*, 15(1-2), pp 25–27, 2001.
- [4] A. B. Zorin, F.-J. Ahlers, J. Niemeyer, T. Weimann, H. Wolf, V. A. Krupenin, and S. V. Lotkhov. “Background charge noise in metallic single-electron tunneling devices”. *Phys. Rev. B*, 53(20), pp 13682–13687, 1996.
- [5] G. Zimmerli, T. M. Eiles, R. L. Kautz, and J. M. Martinis. “Noise in the Coulomb blockade electrometer”. *Appl. Phys. Lett.*, 61(2), pp 237–239, 1992.
- [6] R. A. Smith and H. Ahmed. “Gate controlled Coulomb blockade effects in the conduction of a silicon quantum wire”. *J. Appl. Phys.*, 81(6), pp 2699–2703, 1997.
- [7] M. R. Graham and H. Ahmed. “The effect of offset charge deposited directly onto single-electron devices”. *Appl. Phys. Lett.*, 72(25), pp 3350–3352, 1998.
- [8] A. S. Cordan, A. Goltzené, Y. Hervé, M. Mejias, C. Vieu, and H. Launois. “Electron transport in metallic dot arrays : Effect of a broad dispersion in the tunnel junction dimensions”. *J. Appl. Phys.*, 84(7), pp 3756–3763, 1998.
- [9] Y. Leroy, A.S. Cordan, and A. Goltzené. “Variance analysis of the Coulomb blockade parameters in nanometer-size disordered arrays”. *J. Appl. Phys.*, 90(2), pp 953–957, 2001.
- [10] Y. Leroy, A.S. Cordan, and A. Goltzené. “Reduction of the threshold voltage dispersion in nanometer-sized arrays showing Coulomb blockade”. *Mat. Sci. Eng. C*, 15(1-2), pp 49–51, 2001.



# Conclusion

Mon travail avait pour but d'étudier, par des simulations numériques, la validité d'une nouvelle approche pour réaliser des dispositifs électroniques ultimes, qui permettent de contrôler le transport des électrons un à un. Pour qu'une nouvelle filière soit exploitable, il faut pouvoir répondre à trois exigences : un rendement de réalisation de 100 %, une dispersion réduite des paramètres électriques, et un fonctionnement à température ambiante. Cette idée avait aussi été développée par un laboratoire expérimental, le Laboratoire de Microstructure et de Microélectronique de Bagnex (L2M), avec lequel nous avons pu collaborer, ce qui a permis de valider nos outils de simulations.

La motivation d'une telle approche est due aux difficultés rencontrées dans la réalisation de transistors à un électron (SET) construits autour d'un seul plot. En effet, afin d'observer un fonctionnement à température ambiante, il est nécessaire d'avoir un contrôle sur les structures du transistor (diamètres des plots, jonctions, etc.) dont la dimension est de l'ordre de 1 nm, ce qui n'est pas envisageable avec des techniques lithographiques. D'autre part, pour être utilisables, les procédés de fabrication doivent avoir des rendements proches de 100 %, et les dispersions des caractéristiques des dispositifs doivent être très faibles. Les rendements atteints étaient insuffisants, et aucune information sur la dispersion des caractéristiques n'était disponible.

Afin de pallier éventuellement à ces problèmes, l'idée a été de remplacer le plot unique par un petit réseau. L'espoir était d'améliorer la tension de seuil  $V_{th}$  des dispositifs, et/ou la température limite  $T_l$  au-delà de laquelle la tension de seuil est trop faible. Par cette approche, le contrôle des dimensions devient possible puisque l'on passe d'environ 1 nm à 10 nm. Malheureusement, avec les techniques actuelles, les réseaux considérés seront désordonnés.

Un certain nombre de questions se posait donc à nous : quel est le rendement de ce type de dispositifs, peut-on améliorer les valeurs de  $V_{th}$  et de  $T_l$ , et enfin, quel est l'effet du désordre ?

Pour répondre à ces questions, et surtout à la dernière, il nous fallait, en premier lieu, construire un simulateur qui n'existait pas. Celui-ci devait être souple, rapide, et réaliste, les paramètres des jonctions ( $R_T$ ,  $C$ ) ne devant pas être découplés. Nous avons donc calculé les résistances tunnel des jonctions et les capacités. Pour ces géométries complexes, nous avons comparé les valeurs obtenues par une théorie de transport balistique (semi-classique) avec celles calculées par une théorie incluant la quantification transverse (Landauer-Büttiker); ces deux approches, évidemment partiellement équivalentes, conduisent à des valeurs proches, mais la première offre beaucoup plus de souplesse. Nous avons également vérifié que dans le domaine pertinent pour les applications, c'est à dire le domaine des températures les plus élevées pour lesquelles  $V_{th} \neq 0$ , l'ensemble des hypothèses était cohérent.

En second lieu, il nous fallait valider le simulateur, ce qui a été rendu possible par la mise à disposition des résultats obtenus par le L2M. Ces données ont immédiatement montré que le simulateur était opérationnel. Il a même été possible de prévoir l'insertion de perturbations de charge et d'une grille. Nous avons également mis au point une méthode d'accélération, par l'intermédiaire d'une simulation quasi-1D, méthode elle-aussi validée.

Cette première partie de mon travail a permis d'établir les résultats suivants, répondant aux questions initiales.

Tout d'abord, nous confirmons les prévisions faites pour les basses températures sur des dispositifs simples. Néanmoins, il faut noter que les comportements en fonction des dimensions diffèrent suivant la dimensionnalité des réseaux considérés. Pour les dispositifs à une dimension, le gain sur  $V_{th}$  et  $T_l$  est proportionnel à la longueur du réseau, mais le rendement reste très faible (ce qui est cohérent avec les expériences du L2M). Pour les réseaux bidimensionnels, le rendement est élevé (ce qui permet d'espérer remplir la première exigence), mais les gains sur  $V_{th}$  et  $T_l$  sont moins importants que pour le cas unidimensionnel.

La dispersion à basse température reste faible pour les réseaux à une et deux dimensions, mais elle devient vite importante lorsque la température se rapproche de la température limite  $T_l$ . Ce dernier point devient catastrophique si l'on considère que les applications se feront dans la gamme de température proche de  $T_l$ . Ceci n'était pas prévu dans la littérature, et semble provenir du rôle important joué par les résistances tunnel dans les hautes températures. Les résistances étant très sensibles aux distances inter-plots  $d$  ( $R_T \propto \exp(2\kappa d)$ ), la dispersion de celles-ci sepercute alors sur la tension de seuil.

La solution évidente *a priori* est d'ajuster tous les  $d$ , solution toutefois impossible aujourd'hui du point de vue de la technologie, sauf éventuellement le long des électrodes. Nous avons donc étudié systématiquement les effets de jonctions plus longues et contrôlées le long d'une électrode. Nous avons montré que la dispersion était alors ramenée à des valeurs compatibles avec les contraintes de la micro-électronique, ce qui répond à la seconde exigence de ces dispositifs. Cette modification permet aussi d'éliminer les fluctuations géantes pouvant apparaître dans les dispositifs à réseaux bidimensionnels.

Pour garantir une exploitation rapide des études systématiques, nous avons toujours conservé les mêmes paramètres, qui correspondent en fait aux dimensions des plots que savaient réaliser les expérimentateurs il y a quatre ans. Ces dimensions limitent la température  $T_l$  aux environs de 100 K pour les réseaux à deux dimensions ; on est certes encore loin de la température ambiante. Depuis, des plots de rayons  $r \lesssim 1 \text{ nm}$  ont pu être réalisés. Nous avons donc introduit  $r = 1 \text{ nm}$  dans notre simulateur, et nous obtenons ainsi une tension de seuil  $V_{th}$  non nulle pour des températures supérieures à la température ambiante (ce qui a été observé au moins une fois expérimentalement par nos collègues du L2M). La troisième exigence est alors remplie.

Sans doute les approximations physiques ne permettent-elles pas d'avoir plus de précisions encore sur les caractéristiques électriques, mais d'ores et déjà, cette filière technologique présente les conditions minimales sur l'élément central, celui qui permet le stockage des électrons. En effet, le rendement de réalisation est élevé, et une tension de seuil importante jusqu'à la température ambiante est possible avec des réseaux de plots de rayon  $r \simeq 1 \text{ nm}$ . Enfin, une dispersion de caractéristiques compatible avec la condition d'intégration à large

---

échelle est possible, avec un bruit purement poissonnier, à condition de maîtriser l'une des technologies permettant de créer des jonctions un peu plus larges le long d'une électrode au moins.

Il reste évidemment à effectuer les tests expérimentaux, mais cette étude systématique a permis une validation de l'approche, indispensable avant toute validation expérimentale bien plus lourde.

L'étape suivante sera la simulation, puis les tests, de dispositifs complets avec une grille : notre outil est déjà prêt pour cette étape.

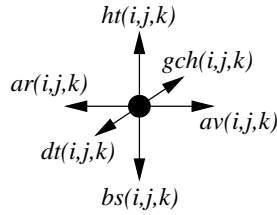


# Annexe A

## Matrice capacité C

### A.1 Lien entre plots et jonctions

Dans un réseau cubique comme celui qui sert de base aux dispositifs multi-jonctions étudiés ici, il est utile de savoir relier les indices de noeuds à ceux des connexions. Pour ce faire, nous utilisons les directions suivantes, repérées par rapport au plot courant, d'indices  $(i, j, k)$  :



Les abréviations du schéma sont données pour les directions d'orientation par rapport au noeud central. Le tableau ci-dessous indique la correspondance entre abréviation, direction et formule pour obtenir l'indice de la jonction correspondant à la direction :

abréviations	directions	indices
$av(i, j, k)$	avant	$(j - 1) 2 N_x + j + i + (k - 1)(3 N_x N_y + N_y - N_x)$
$ar(i, j, k)$	arrière	$(j - 1) 2 N_x + j + i + (k - 1)(3 N_x N_y + N_y - N_x) - 1$
$dt(i, j, k)$	droite	$j (2 N_x + 1) - N_x + i + (k - 1)(3 N_x N_y + N_y - N_x)$
$gch(i, j, k)$	gauche	$j (2 N_x + 1) - 3 N_x + i - 1 + (k - 1)(3 N_x N_y + N_y - N_x)$
$bs(i, j, k)$	bas	$(j - 1) N_x + i + k (3 N_x N_y + N_y - N_x) - N_x N_y$
$ht(i, j, k)$	haut	$(j - 1) N_x + i + (k - 1) (3 N_x N_y + N_y - N_x) - N_x N_y$

TAB. A.1: Correspondance entre les indices de jonction et la direction par rapport au plot d'indices  $(i, j, k)$ .  $N_x$ ,  $N_y$  et  $N_z$  indiquent les dimensions du réseau considéré.

On peut remarquer que l'on a les relations suivantes :  
 $ar(i, j, k) = av(i - 1, j, k)$ ,  $dt(i, j, k) = gch(i, j + 1, k)$  et  $ht(i, j, k) = bs(i, j, k - 1)$ .



## A.2 Systèmes d'équations linéaires

Afin de déterminer la matrice capacité du système considéré, il faut poser le système d'équations correspondant à la distribution des potentiels sur les plots en l'absence de charge sur ces derniers, mais avec des électrodes soumises à des potentiels non nuls. La charge sur le plot d'indices  $(i, j, k)$  s'écrit comme suit :

$$Q_{(i,j,k)} = C_{0(i,j,k)}(V_{p(i,j,k)} - V_g) + C_{ar(i,j,k)}(V_{p(i,j,k)} - V_{p(i-1,j,k)}) + C_{av(i,j,k)}(V_{p(i,j,k)} - V_{p(i+1,j,k)}) \\ + C_{dt(i,j,k)}(V_{p(i,j,k)} - V_{p(i,j+1,k)}) + C_{gch(i,j,k)}(V_{p(i,j,k)} - V_{p(i,j-1,k)}) \\ + C_{ht(i,j,k)}(V_{p(i,j,k)} - V_{p(i,j,k-1)}) + C_{bs(i,j,k)}(V_{p(i,j,k)} - V_{p(i,j+1,k+1)}), \quad (\text{A.1})$$

où  $V_g$  est le potentiel de la grille,  $V_{pm}$  le potentiel du plot d'indice  $m$ .

En écrivant que cette charge est nulle en l'absence de mouvement tunnel, on peut relier le potentiel des plots et les capacités des jonctions. L'équation (A.1) devient :

$$V_{p(i,j,k)}(C_{0(i,j,k)} + C_{ar(i,j,k)} + C_{av(i,j,k)} + C_{dt(i,j,k)} + C_{gch(i,j,k)} + C_{ht(i,j,k)} + C_{bs(i,j,k)}) \\ - C_{ar(i,j,k)}V_{p(i-1,j,k)} - C_{av(i,j,k)}V_{p(i+1,j,k)} - C_{dt(i,j,k)}V_{p(i,j+1,k)} - C_{gch(i,j,k)}V_{p(i,j-1,k)} \\ - C_{ht(i,j,k)}V_{p(i,j,k-1)} - C_{bs(i,j,k)}V_{p(i,j+1,k+1)} = C_{0(i,j,k)}V_g \quad (\text{A.2})$$

Lorsque l'indice du plot correspond à l'une des électrodes, le produit capacité-potential passe au second membre. L'équation (A.2) est écrite pour toutes les valeurs possibles de  $(i, j, k)$ , et l'on constitue le système d'équations déterminant le potentiel des plots, ainsi que la matrice capacité :

$$\mathbf{C}\mathbf{V}_p = \mathbf{Q}_{\text{ext}} \quad (\text{A.3})$$

où  $\mathbf{Q}_{\text{ext}}$  représente la charge extérieure au système engendrée par le potentiel des électrodes du système :

$$\mathbf{Q}_{\text{ext}m} = \begin{cases} C_{0m}V_g & \text{si le plot } m \text{ n'est pas adjacent à une électrode,} \\ C_jV_e + C_{0m}V_g & \text{si le plot } m \text{ est adjacent à l'électrode de potentiel } V_e. \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

La matrice  $\mathbf{C}$  peut être décrite de la façon suivante :

$$\mathbf{C}_{m,n} = \begin{cases} C_{0m} + \sum_{i \in \langle m \rangle} C_i & \text{si } m = n, \\ -C_i & \text{si } n \text{ est l'indice d'un plot voisin de } m, \text{ et } i \in \langle m \rangle \cap \langle n \rangle, \\ 0 & \text{ailleurs.} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

La notation  $\langle m \rangle$  signifie que l'on considère les indices des jonctions voisines du plot d'indice  $m$ , *i.e.* l'un des indices du tableau A.1

## A.3 Matrice C

Dans le calcul précédent, seules les capacités des jonctions sont prises en compte. Cela revient à dire que nous négligeons les capacités d'influence inter-plots au-delà des plus proches voisins. En toute rigueur, la matrice capacité d'un tel système de conducteur contient tous les liens entre les conducteurs du système<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>voir la section 2.4.2 pour la discussion concernant ce sujet

La matrice capacité est une matrice symétrique définie positive de taille  $N_p \times N_p$ , qui a la structure sous-matricielle suivante (cas général 3D) :

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_1 & \mathbf{P}_{1,2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \mathbf{P}_{2,1} & \mathbf{P}_2 & \mathbf{P}_{2,3} & 0 & & & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \mathbf{P}_{k,k-1} & \mathbf{P}_k & \mathbf{P}_{k,k+1} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \mathbf{P}_{N_z-1} & \mathbf{P}_{N_z-1,N_z} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \mathbf{P}_{N_z,N_z-1} & \mathbf{P}_{N_z} \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

où  $\mathbf{P}_{k,k-1} = \mathbf{P}_{k-1,k}$  et est une matrice diagonale de taille  $N_x N_y \times N_x N_y$  correspondant au couplage du plan  $k$  avec le plan  $k - 1$ .

$\mathbf{P}_k$  est la matrice capacité du plan  $k$  du réseau, de taille  $N_x N_y \times N_x N_y$ . Elle a la même structure sous-matricielle que celle de  $\mathbf{C}$ , mais pour les lignes du plan  $k$ .

$$\mathbf{P}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_1^k & \mathbf{L}_{1,2}^k & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \mathbf{L}_{2,1}^k & \mathbf{L}_2^k & \mathbf{L}_{2,3}^k & 0 & & & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \mathbf{L}_{l,l-1}^k & \mathbf{L}_l^k & \mathbf{L}_{l,l+1}^k & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \mathbf{L}_{N_y-1}^k & \mathbf{L}_{N_y-1,N_y}^k \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \mathbf{L}_{N_y,N_y-1}^k & \mathbf{L}_{N_y}^k \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Ici  $\mathbf{L}_{l,l-1}^k$  est une matrice diagonale de taille  $N_x \times N_x$  qui contient le couplage entre la ligne  $l$  et la ligne  $l - 1$ .

La matrice  $\mathbf{P}_{k,k+1}$  contient l'opposé des capacités des jonctions reliant les plots du plant  $k$  aux plots du plan  $k + 1$ . Ces jonctions sont représentées par les indices allant de  $m = (3k - 1)N_x N_y + k(N_y - N_x) + 1$  à  $m + N_x N_y$ .

$$\mathbf{P}_{k,k+1} = \begin{bmatrix} -C_m & & & & & & & & & \\ & -C_{m+1} & & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & & \\ & & & & \ddots & & & & & \\ & & & & & \ddots & & & & \\ & & & & & & -C_{m+N_x N_y-1} & & & \\ & & & & & & & -C_{m+N_x N_y} & & \end{bmatrix} \quad (\text{A.8})$$

La matrice  $\mathbf{L}_{l,l+1}^k$  quant à elle contient l'opposé des capacités des jonctions reliant les plots des lignes  $l$  et  $l + 1$  du plan  $k$ . Les jonctions ont des indices variant de



## Annexe B

### Variation d'énergie électrostatique

L'énergie électrostatique du système est obtenue par l'équation suivante :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N_p} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j \quad (\text{B.1})$$

où  $Q_i$  est la charge électrique sur le plot  $i$ , et  $\mathbf{C}$  la matrice capacité du système de conducteur considéré en se limitant à l'interaction avec les plus proches voisins (cf. annexe A).

Lors du mouvement d'un électron du plot  $k$  au plot  $k'$ , la modification d'énergie électrostatique peut être évaluée directement. Nous considérerons dans le calcul qui suit le cas  $k < k'$ , mais l'approche est la même dans l'autre cas. Le calcul tient compte de la mémorisation de  $\mathbf{C}$  dans une matrice triangulaire inférieure.

Dans un premier temps on isole les termes où  $k$  et  $k'$  apparaissent :

$$E = \frac{1}{2} \left[ \sum_i Q_i^2 (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + 2 \sum_{\substack{i \\ j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j \right] \quad (\text{B.2})$$

$$E = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i \neq k, k'} Q_i^2 (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + \sum_{i=k, k'} Q_i^2 (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + 2 \sum_{\substack{i \neq k, k' \\ j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j + 2 \sum_{\substack{i=k, k' \\ j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j \right] \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned}
E = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i \neq k, k'} Q_i^2 (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + \sum_{i=k, k'} Q_i^2 (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + 2 \sum_{\substack{i < k \\ j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j \right. \\
+ 2 \sum_{\substack{k < i < k' \\ j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j + 2 \sum_{\substack{k' < i \\ j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j + 2 \sum_{j < k} Q_k (\mathbf{C}^{-1})_{k,j} Q_j \\
\left. + 2 \sum_{j < k'} Q_{k'} (\mathbf{C}^{-1})_{k',j} Q_j \right] \quad (\text{B.4})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i \neq k, k'} Q_i^2 (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + \sum_{i=k, k'} Q_i^2 (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + 2 \sum_{\substack{i < k \\ j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j \right. \\
+ 2 \sum_{\substack{k < i < k' \\ j < k}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j + 2 \sum_{k < i < k'} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,k} Q_k + 2 \sum_{\substack{k < i < k' \\ k < j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j \\
+ 2 \sum_{\substack{k' < i \\ j < k}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j + 2 \sum_{k' < i} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,k} Q_k + 2 \sum_{\substack{k' < i \\ k < j < k'}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j \\
+ 2 \sum_{k' < i} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,k'} Q_{k'} + 2 \sum_{\substack{k' < i \\ k' < j < i}} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,j} Q_j + 2 \sum_{j < k} Q_k (\mathbf{C}^{-1})_{k,j} Q_j \\
\left. + 2 \sum_{j < k} Q_{k'} (\mathbf{C}^{-1})_{k',j} Q_j + 2 \sum_{k < j < k'} Q_{k'} (\mathbf{C}^{-1})_{k',j} Q_j + 2 Q_{k'} (\mathbf{C}^{-1})_{k',k} Q_k \right] \quad (\text{B.5})
\end{aligned}$$

Lors de la variation d'énergie issue d'un mouvement entre les plots  $k$  et  $k'$ , seule la charge sur ces plots varie. La différence d'énergie ne conservera donc que les termes de l'équation (B.5) qui font intervenir explicitement  $k$  et  $k'$  :

$$\begin{aligned}
\Delta E = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=k, k'} (Q_i'^2 - Q_i^2) (\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + 2 \sum_{k < i < k'} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,k} (Q_k' - Q_k) \right. \\
+ 2 \sum_{k' < i} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,k} (Q_k' - Q_k) + 2 \sum_{k' < i} Q_i (\mathbf{C}^{-1})_{i,k'} (Q_{k'}' - Q_{k'}') \\
+ 2 \sum_{j < k} (Q_k' - Q_k) (\mathbf{C}^{-1})_{k,j} Q_j + 2 \sum_{j < k} (Q_{k'}' - Q_{k'}') (\mathbf{C}^{-1})_{k',j} Q_j \\
\left. + 2 (Q_{k'}' Q_k' - Q_{k'} Q_k) (\mathbf{C}^{-1})_{k',k} + 2 \sum_{k < j < k'} (Q_{k'}' - Q_{k'}') (\mathbf{C}^{-1})_{k',j} Q_j \right] \quad (\text{B.6})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta E = \frac{1}{2} & \left[ \sum_{i=k,k'} (Q_i'^2 - Q_i^2)(\mathbf{C}^{-1})_{i,i} + 2(Q_{k'}'Q_k' - Q_{k'}Q_k)(\mathbf{C}^{-1})_{k',k} \right. \\
& + 2 \sum_{i < k} [(Q_k' - Q_k)(\mathbf{C}^{-1})_{k,i} + (Q_{k'}' - Q_{k'})(\mathbf{C}^{-1})_{k',i}] Q_i \\
& + 2 \sum_{k < i < k'} Q_i [(\mathbf{C}^{-1})_{i,k}(Q_k' - Q_k) + (Q_{k'}' - Q_{k'})(\mathbf{C}^{-1})_{k',i}] \\
& \left. + 2 \sum_{k' < i} Q_i [(\mathbf{C}^{-1})_{i,k}(Q_k' - Q_k) + (\mathbf{C}^{-1})_{i,k'}(Q_{k'}' - Q_{k'})] \right] \quad (\text{B.7})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta E = \frac{1}{2} & \left[ (Q_k'^2 - Q_k^2)(\mathbf{C}^{-1})_{k,k} + (Q_{k'}'^2 - Q_{k'}^2)(\mathbf{C}^{-1})_{k',k'} + 2(Q_{k'}'Q_k' - Q_{k'}Q_k)(\mathbf{C}^{-1})_{k',k} \right. \\
& \left. + 2 \sum_{i \neq k,k'} Q_i [(\mathbf{C}^{-1})_{k,i}(Q_k' - Q_k) + (\mathbf{C}^{-1})_{k',i}(Q_{k'}' - Q_{k'})] \right] \quad (\text{B.8})
\end{aligned}$$

Les notations  $Q'$  indiquent que l'on parle des charges après transfert, alors que les charges  $Q$  sont celles avant transfert.



# Annexe C

## Équation de Schrödinger

Dans cette annexe, nous exposons la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire,

$$H\psi = E\psi, \quad \text{où} \quad H = \Delta + V(\vec{r}) \quad (\text{C.1})$$

dans les différents cas envisagés pour les besoins du travail exposé dans ce mémoire.

### C.1 Barrière de potentiel rectangulaire

Nous cherchons à résoudre l'équation (C.1) pour un électron soumis au potentiel représenté sur la figure C.1. Le potentiel est donné par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \text{ et } x > d \\ V_0 & \text{pour } 0 \leq x \leq d. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

et ne dépend que de la variable  $x$ .

L'équation (C.1) est alors équivalente à :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{C.3})$$

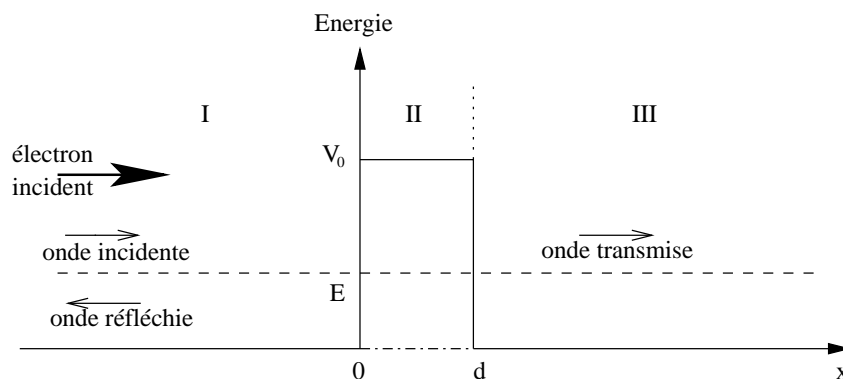


FIG. C.1: Schéma de la forme du potentiel auquel est soumis l'électron. L'énergie  $E$  de l'électron est inférieure à la hauteur de la barrière  $V_0$  et l'on choisit une onde incidente venant de la gauche. Le problème peut se décomposer en trois zones pour lesquelles les solutions sont triviales.



La solution de l'équation (C.3) avec le potentiel donné par (C.2) se trouve dans de nombreux ouvrages [1,2]. Nous ne redonnerons ici que les grandes lignes.

Dans chacune des trois zones définies sur la figure C.1, les solutions sont de la forme :

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{dans la zone I} \\ \psi_2(x) = A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x} & \text{dans la zone II} \\ \psi_3(x) = A_3 e^{ikx} & \text{dans la zone III} \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

avec  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  et  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ .

La fonction d'onde de l'électron doit être continue et de dérivée continue, ce qui impose les conditions suivantes :

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \left. \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=0}, \quad \psi_2(d) = \psi_3(d) \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=d} = \left. \frac{\partial \psi_3}{\partial x} \right|_{x=d} \quad (\text{C.5})$$

La résolution du système d'équations C.5 conduit à :

$$A_1 = \frac{1}{2} \left[ A_2 \frac{k - i\kappa}{k} + B_2 \frac{k + i\kappa}{k} \right] \quad (\text{C.6})$$

$$B_1 = \frac{1}{2} \left[ A_2 \frac{k + i\kappa}{k} + B_2 \frac{k - i\kappa}{k} \right] \quad (\text{C.7})$$

$$A_2 = \frac{A_3}{2} \frac{\kappa + ik}{\kappa} e^{(ik - \kappa)d} \quad (\text{C.8})$$

$$B_2 = \frac{A_3}{2} \frac{\kappa - ik}{\kappa} e^{(ik + \kappa)d} \quad (\text{C.9})$$

ce qui peut encore s'écrire :

$$B_1 = \frac{(\kappa + ik)(\kappa - ik)e^{\kappa d} - (\kappa - ik)(\kappa + ik)e^{-\kappa d}}{(\kappa + ik)(\kappa + ik)e^{-\kappa d} - (\kappa - ik)(\kappa - ik)e^{\kappa d}} A_1 \quad (\text{C.10})$$

$$A_2 = \frac{2ik(\kappa + ik)e^{-\kappa d}}{(\kappa + ik)(\kappa + ik)e^{-\kappa d} - (\kappa - ik)(\kappa - ik)e^{\kappa d}} A_1 \quad (\text{C.11})$$

$$B_2 = \frac{2ik(\kappa + ik)}{(\kappa + ik)(\kappa + ik)e^{-\kappa d} - (\kappa - ik)(\kappa - ik)e^{\kappa d}} A_1 \quad (\text{C.12})$$

$$A_3 = \frac{4ik\kappa e^{-ikd}}{(\kappa + ik)(\kappa + ik)e^{-\kappa d} - (\kappa - ik)(\kappa - ik)e^{\kappa d}} A_1 \quad (\text{C.13})$$

On peut alors en déduire le coefficient de transmission tunnel :

$$T = |t|^2 = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4E\Phi}{(E - \Phi)^2 \sinh(\kappa d)^2 + 4E\Phi \cosh(\kappa d)^2} \quad \text{où} \quad \Phi = V_0 - E \quad (\text{C.14})$$

qui peut s'écrire encore :

$$T = \frac{4E\Phi}{4E\Phi + (E + \Phi)^2 \sinh(\kappa d)^2} \quad (\text{C.15})$$

## C.2 Électron dans un cylindre infini

Nous désirons connaître le comportement d'un électron dans un cylindre infini de rayon  $R$  et d'axe de symétrie selon  $z$ . Nous considérons que le cylindre est délimité par un potentiel infini en  $r \geq R$  (cf. Fig. C.2).

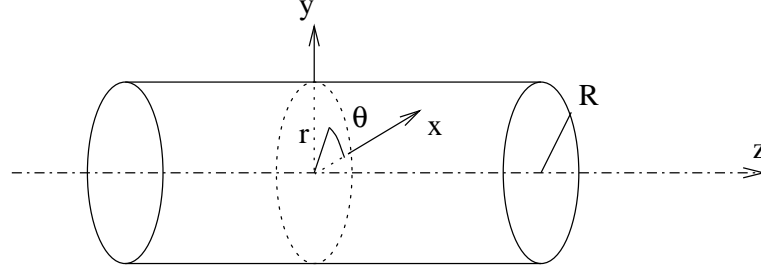


FIG. C.2: Repère cylindrique au sein d'un potentiel de confinement limité par  $r = R$ . Le potentiel au-delà de  $r = R$  est infini. Il n'y a pas de limitation selon l'axe  $z$ .

### C.2.1 Forme de l'équation de Schrödinger

Nous cherchons la fonction d'onde d'un électron dans un puits de potentiel cylindrique infini. Celle-ci vérifie l'équation de Schrödinger (C.1) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (\text{C.16})$$

où  $V(\vec{r})$  est le potentiel auquel est soumis l'électron.

A l'extérieur du puits de potentiel infini, la fonction d'onde est nulle. Par continuité, nous devons donc chercher les solutions pour  $|\vec{r}| < R$  (où  $V(\vec{r}) = 0$ ), en obligeant la fonction d'onde à s'annuler aux limites du cylindre, soit pour  $|\vec{r}| = R$ . L'équation (C.16) devient alors

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (\text{C.17})$$

où  $\Delta$  est le Laplacien en coordonnées cylindriques  $\vec{r} \equiv (r, \theta, z)$

$$\Delta U = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2}.$$

D'après la forme du Laplacien, nous cherchons la solution de (C.17) sous la forme

$$\psi(\vec{r}) = \phi(r, \theta) \chi(z). \quad (\text{C.18})$$

La partie longitudinale  $\chi(z)$  vérifie alors l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_z \chi(z) = E_z \chi(z), \quad (\text{C.19})$$

et la partie transverse  $\phi(r, \theta)$  satisfait l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r,\theta} \phi(r, \theta) = (E - E_z) \phi(r, \theta), \quad (\text{C.20})$$

où l'on a posé

$$\Delta_z = \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{et} \quad \Delta_{r,\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}.$$

En développant (C.20) on obtient

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \phi(r, \theta) = (E - E_z) \phi(r, \theta). \quad (\text{C.21})$$

En coordonnées cylindriques, le moment cinétique selon  $z$  s'écrivant

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad (\text{C.22})$$

on peut alors remplacer  $\partial^2/\partial\theta^2$  par  $-L_z^2/\hbar^2$  puisque  $L_z$  commute avec  $H$  et  $z$ .  $\phi(r, \theta)$  doit alors vérifier

$$L_z \phi(r, \theta) = \hbar p \phi(r, \theta). \quad (\text{C.23})$$

La solution transverse peut être cherchée sous la forme

$$\phi(r, \theta) = \Gamma_p(r) \Omega_p(\theta), \quad (\text{C.24})$$

où la partie angulaire  $\Omega_p(\theta)$  doit vérifier

$$L_z \Omega_p(\theta) = \hbar p \Omega_p(\theta), \quad (\text{C.25})$$

et la partie radiale  $\Gamma_p(r)$  satisfait l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{p^2}{r^2} \right] \Gamma_p(r) = (E - E_z) \Gamma_p(r). \quad (\text{C.26})$$

## C.2.2 Résolution des équations

L'équation (C.19) conduit à une solution stationnaire sous forme d'ondes planes,

$$\chi(z) = \chi_1 e^{-ik_z z} + \chi_2 e^{ik_z z}, \quad (\text{C.27})$$

où  $k_z$  est donné par

$$k_z = \sqrt{\frac{2mE_z}{\hbar^2}}. \quad (\text{C.28})$$

De (C.22) et (C.25) on déduit la forme des solutions de la fonction angulaire,

$$\Omega_p(\theta) = \omega e^{ip\theta}, \quad (\text{C.29})$$

où la fonction  $\Omega_p(\theta)$  doit être continue. On doit donc avoir

$$\Omega_p(0) = \Omega_p(2\pi) \Rightarrow e^{i2\pi p} = 1 \Rightarrow p \in \mathbb{Z}. \quad (\text{C.30})$$

Pour la partie radiale, l'équation (C.26) est de la forme

$$\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left( k^2 - \frac{p^2}{\rho^2} \right), \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2m(E - E_z)}{\hbar^2}}. \quad (\text{C.31})$$

Elle admet comme solutions les fonctions de Bessel du premier type,  $J_p(k\rho)$  [3]. Les fonctions radiales sont donc de la forme

$$\Gamma_p(r) = \gamma_p J_p \left( \sqrt{\frac{2m(E - E_z)}{\hbar^2}} r \right). \quad (\text{C.32})$$

Les conditions aux limites de  $\Gamma_p(r)$  permettent de déterminer la quantification de l'énergie. En effet nous devons avoir  $\Gamma_p(R) = 0$ , ce qui n'est possible que pour les zéros réels,  $j_{p,n}$ , des fonctions de Bessel du premier type. Cela impose d'avoir  $p$  positif ou nul. Donc pour le zéro d'ordre  $n$  :

$$R \sqrt{\frac{2m(E - E_z)}{\hbar^2}} = j_{p,n} \quad \text{avec} \quad p \in \mathbb{N} \quad \text{et} \quad n \in \mathbb{N}^*, \quad (\text{C.33})$$

ce qui nous donne comme solution de la partie radiale

$$\Gamma_{p,n}(r) = \gamma_{p,n} J_p \left( \frac{j_{p,n}}{R} r \right) \quad \text{avec} \quad p \in \mathbb{N} \quad \text{et} \quad n \in \mathbb{N}^*. \quad (\text{C.34})$$

L'énergie  $E_{p,n} = E - E_z$ , associée à la partie radiale est donc quantifiée par  $p$  et  $n$  dont les valeurs sont limitées par l'énergie de l'électron<sup>1</sup>

$$E_{p,n} = \frac{\hbar^2 j_{p,n}^2}{2mR^2} \quad \text{avec} \quad p \in \mathbb{N}, \quad n \in \mathbb{N}^* \quad \text{et tel que} \quad E_{p,n} \leq E. \quad (\text{C.35})$$

### C.2.3 Fonction d'onde de l'électron

La fonction d'onde d'un électron, dans l'état quantique  $(p, n)$ , s'écrit d'après ce qui précède

$$\psi_{p,n}(\mathbf{r}) = \chi(z) \Omega_p(\theta) \Gamma_{p,n}(r). \quad (\text{C.36})$$

On normalise cette fonction d'onde, l'électron se trouvant nécessairement dans le cylindre.

$$\int_{esp} |\psi_{p,n}(\vec{\mathbf{r}}) \psi_{p,n}^*(\vec{\mathbf{r}})| d\vec{\mathbf{r}} = 1, \quad (\text{C.37})$$

<sup>1</sup> Il n'existe pas de formule explicite pour déterminer la valeur de  $j_{p,n}$  en fonction de  $p$  et  $n$ , il faut se référer aux valeurs tabulées de  $p$  et  $n$  [3].

soit puisque la fonction d'onde est un produit de fonctions ayant des variables indépendantes,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\chi(z)\chi^*(z)| dz = 1, \quad (\text{C.38})$$

$$\int_0^{2\pi} |\Omega_p(\theta)\Omega_p^*(\theta)| d\theta = 1, \quad (\text{C.39})$$

$$\int_0^R |\Gamma_{p,n}(r)\Gamma_{p,n}^*(r)| r dr = 1, \quad \text{pour } p \in \mathbb{N} \text{ et } n \in \mathbb{N}^* \quad (\text{C.40})$$

L'équation (C.38) n'est normalisable que lorsque l'on considère un paquet d'onde, mais cela n'a pas d'incidence sur les parties radiale et angulaire, qui ne dépendent pas du vecteur d'onde  $k$  de l'électron. Dans la suite nous considérerons que  $\chi(z)$  est normé.

L'équation angulaire (C.39) conduit à

$$\int_0^{2\pi} \omega \omega^* e^{ip\theta} e^{-ip\theta} d\theta = 2\pi \omega^2, \quad (\text{C.41})$$

soit

$$\omega = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{C.42})$$

L'équation radiale (C.40) devient

$$\int_0^R \gamma_{p,n} \gamma_{p,n}^* J_p^2\left(\frac{j_{p,n}}{R} r\right) r dr = 1, \quad (\text{C.43})$$

soit

$$\gamma_{p,n} = \frac{1}{R \sqrt{\int_0^1 J_p^2(j_{p,n} x) x dx}}. \quad (\text{C.44})$$

Après normalisation des parties radiale et angulaire, la fonction d'onde (C.36) d'un électron du mode  $(p, n)$  dans un cylindre infini est

$$\psi_{p,n}(\vec{\mathbf{r}}) = \chi(z) \frac{e^{ip\theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{J_p\left(\frac{j_{p,n}}{R} r\right)}{R \sqrt{\int_0^1 J_p^2(j_{p,n} x) x dx}}. \quad (\text{C.45})$$

Pour avoir une idée de la répartition spatiale des fonctions d'onde dans le cylindre, nous avons tracé sur les figures C.3 et C.4, la probabilité de présence radiale des premiers modes ( $p = 0, 1$  et  $n = 1, 2, 3$ ).

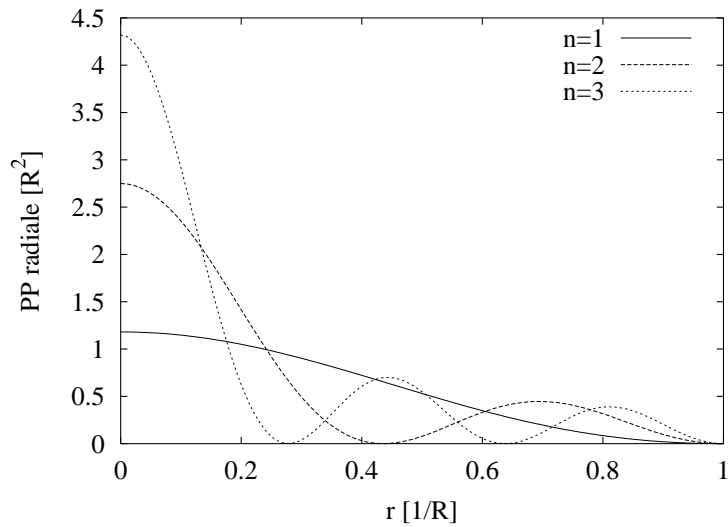


FIG. C.3: Probabilité de présence radiale des fonctions d'onde dans un tube de rayon  $R$ , pour les premiers modes  $n$  du mode  $p = 0$ .

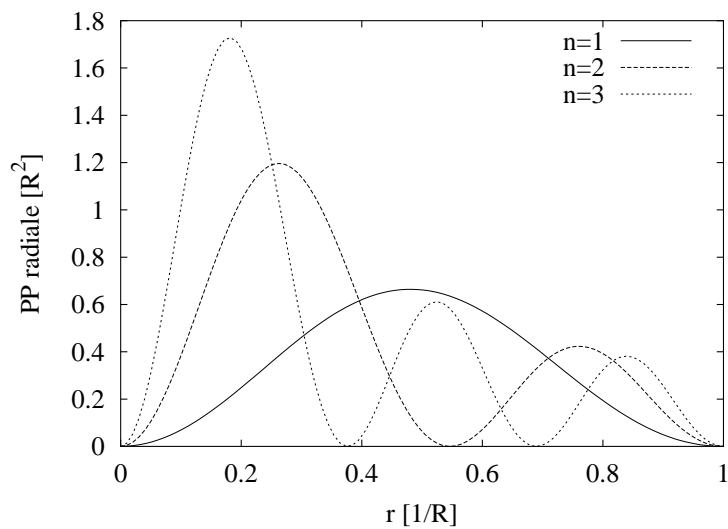


FIG. C.4: Probabilité de présence radiale des fonctions d'onde dans un tube de rayon  $R$ , pour les premiers modes  $n$  du mode  $p = 1$ .

## Bibliographie

- [1] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, 3rd edition, 1998.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique quantique*, volume I. Hermann, Paris, 1996.
- [3] G. N. Watson. *A treatise on the theory of Bessel functions*. Cambridge mathematical library. Cambridge University Press, 2nd edition, 1995.







# Transport électronique dans les nanostructures fortement désordonnées

Ce travail de thèse avait pour but d'étudier, par des simulations numériques, la validité d'une nouvelle approche pour réaliser des dispositifs électroniques ultimes. Ceux-ci doivent permettre de contrôler le transport des électrons un à un ; il faut alors une tension de seuil reste élevée même à température ambiante.

La fabrication de transistors à un électron (SET) construits autour d'un seul plot et répondant à cette contrainte, pose de nombreux problèmes. C'est pourquoi nous avons choisi d'étudier des petits réseaux de plots métalliques nanométriques déposés sur un isolant, et placés entre des électrodes, en collaboration étroite avec un laboratoire expérimental qui avait fait le même choix. Dans ces conditions, les réseaux de plots obtenus présentent un important désordre géométrique pris en compte à travers les distances inter-plots.

Dans un premier temps, nous avons réalisé un simulateur de type Monte Carlo, validé grâce aux données expérimentales, capable de reproduire le transport dans les dispositifs étudiés. Cela a nécessité la modélisation réaliste des résistances tunnel et des capacités des jonctions inter-plots, de façon à inclure explicitement le désordre.

Dans un second temps, nous avons étudié l'effet de ce dernier sur les caractéristiques électriques des dispositifs considérés. Le résultat majeur concerne la dispersion de la tension de seuil qui reste faible à basse température, mais devient rapidement catastrophique dans la zone de température intéressante pour les applications.

Dans le but de réduire la dispersion à haute température, nous avons proposé et testé numériquement une solution réaliste permettant de la ramener à des valeurs de seuils tolérables en VLSI.

**Mots clefs :** Monte Carlo, simulateur, effet tunnel à un seul électron, réseaux désordonnés, dispositifs, haute température, blocage de Coulomb

## Electronic transport in highly disordered nanometer-sized devices

The aim of this thesis was to study the validity of a new approach to develop ultimate electronics devices, by means of numerical simulations. Such devices should be able to control single electron motion; therefore, a large threshold voltage is required even at room temperature.

Nevertheless, this constraint raises a lot of difficulties in the elaboration of single electron transistors (SET) with a single dot. So, we decided to work on nanometer-sized metallic dot arrays, placed between leads on an insulator, in collaboration with an experimental team. Those devices present a high geometrical disorder taken into account in the inter-dot distances.

First, we built up a Monte Carlo simulator which reproduces electron motion through our devices. It has been validated by comparison with the experiments. To be able to explicitly include the disorder, we modeled tunnel resistances and junction capacitances between dots in a realistic way.

Secondly, we estimated the effect of disorder on electrical characteristics. The main result was the magnitude of the threshold voltage dispersion. It is small at low temperature, but it increases dramatically in the temperature range relevant for applications.

In order to reduce this dispersion in the higher temperature range, we have proposed and tested numerically a realistic solution which is able to keep the threshold value in an acceptable range for VLSI use.

**Key words:** Monte Carlo, simulator, single-electron tunneling, disordered arrays, devices, high temperature, Coulomb blockade.