



**HAL**  
open science

# Etude du Transport dans les Transistors MOSFETs Contraints: Modélisation Multi-échelle

Maxime Feraille

► **To cite this version:**

Maxime Feraille. Etude du Transport dans les Transistors MOSFETs Contraints: Modélisation Multi-échelle. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. INSA de Lyon, 2009. Français. NNT : . tel-00436049

**HAL Id: tel-00436049**

**<https://theses.hal.science/tel-00436049>**

Submitted on 25 Nov 2009

**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.

**THÈSE**

---

**Etude du Transport dans les  
Transistors MOSFETs Contraints:  
Modélisation Multi-échelle**

---

présentée devant

**L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon**

POUR OBTENIR

**Le grade de docteur**

École doctorale: ELECTRONIQUE,  
ELECTROTECHNIQUE, AUTOMATIQUE

Spécialité: Dispositifs de l'Electronique Intégrée

par

**Maxime FERAÏLLE**

Soutenue le 17 juin 2009 devant la Commission d'examen

**Jury**

MM.	GHIBAUDO Gérard	Directeur de recherche	Président
	PONCET Alain	Professeur	Directeur
	RIDEAU Denis	Ingénieur	Encadrant
	PALESTRI Pierpaolo	Associate Professor	Rapporteur
	BOURNEL Arnaud	Professeur	Rapporteur
	NIQUET Yann-Michel	Ingénieur-Chercheur	Examineur



## RÉSUMÉ

La réduction des transistors MOSFETs, briques de base des circuits intégrés, ne permet plus d'améliorer efficacement leurs performances. Des leviers technologiques ont été mis en place dans les procédés de fabrication de ces transistors pour y remédier. L'introduction intentionnelle de contraintes constitue l'une de ces solutions. De fait, l'orientation des contraintes en fonction de la direction du canal influence fortement les propriétés de transport des transistors MOSFETs.

Les méthodes de calculs de structures de bandes semi-empiriques EPM et  $*/k.p/*$  dans l'approximation de la fonction enveloppe, ont été développées afin d'étudier les perturbations occasionnées sur la structure électronique des matériaux par l'action conjuguée des contraintes mécaniques et du confinement. L'influence de ces dernières perturbations sur les propriétés de transport a, par la suite, été analysée à l'aide de simulations avancées Monte Carlo "fullband" et Kubo-Greenwood. Les résultats théoriques obtenus ont été confrontés aux données expérimentales de flexion à quatre pointes (Wafer Bending), mesurées au cours de cette thèse. Il apparaît clairement que la prise en compte du couplage complexe des effets de confinement et de contrainte joue un rôle essentiel dans les propriétés de transport des dispositifs MOSFETs actuels. Enfin, chaque étape de modélisation a donné lieu à une discussion des domaines de validité des outils de simulation Dérive-Diffusion et Hydrodynamique, classiquement utilisés dans l'industrie pour la modélisation des dispositifs MOSFETs.

## ABSTRACT

The dimension shrinking of the MOSFETs transistors, integrated circuit ground devices, do not allow their performance enhancement further more. Technology boosters have been inserted in MOSFETs transistors process fabrication to fix it. Intentional introduction of strain is one of these technological solutions. Indeed, the strain orientation as a function of the channel direction strongly influences the transport properties of the MOSFETs transistors.

The semi-empirical calculation methods, such as EPM and  $*/k.p/*$  in the envelop function approximation, have been developed in order to study the bandstructure perturbation associated to the combined action of strain and confinement. The influence of these latter perturbations has subsequently been analyzed using the advanced transport simulations "fullband" Monte Carlo and Kubo-Greenwood. The theoretical results obtained have been compared to the experimental data obtained from Wafer Bending technique and measured throughout this thesis. It clearly underlines the crucial importance of the complex coupling between strain and confinement on the transport properties in current MOSFETs devices. Finally, at each modelisation step, validity domain of the basic transport solvers used in industrial organization, such as Drift-Diffusion and Hydrodynamic models, has been pointed out.





## **REMERCIEMENTS**

Le travail en équipe est une notion essentielle des travaux scientifiques, assurant généralement un gage de qualité sur les résultats publiés. En effet, l'obtention rapide des résultats et leurs objectivités résultent bien souvent d'une bonne cohérence de groupe dans une équipe de recherche. Cette thèse n'a pas échappé à la règle bien que seul mon nom apparaisse sur la couverture. Ce manuscrit est le fruit de mes interactions avec mes collègues des différentes équipes de recherche, participant aux projets associés à cette thèse. Par ailleurs, les relations amicales que j'ai pu partager avec mon entourage a bien entendu teinté le déroulement de cette thèse. A travers ce paragraphe, je souhaite remercier l'ensemble des personnes qui a contribué à ces travaux à leurs différents niveaux et de fait à l'aboutissement de cette thèse. Aussi, je dois avouer que l'exercice des remerciements ne m'est pas des plus simples. Comment résumer en quelques lignes l'ensemble des échanges professionnels et personnels ayant eu lieu au cours de cette thèse? En aucun cas, ces remerciements se veulent exhaustifs. Ils ne peuvent d'ailleurs résumer les pensées que je porte envers chaque personne qui a participé à cette thèse et à mon développement personnel.

Ma thèse a débuté en 2005 dans le cadre d'une Convention CIFRE entre le laboratoire INL (anciennement LPM) de l'INSA Lyon et l'équipe TCAD de ST Microelectronics. Ma thèse s'est principalement déroulée dans les locaux du site de Crolles de ST Microelectronics. Je voudrais remercier Hervé Jaouen, directeur du département de modélisation, de m'avoir accueilli et d'avoir mis à ma disposition tous les outils nécessaires à la réalisation de ces travaux.

Je suis reconnaissant envers Gérard Ghibaudo, directeur de Laboratoire IMEP d'avoir accepté le rôle de Président de jury lors de la soutenance de thèse. Je souhaite vivement remercier mes rapporteurs Pierpaolo Palestri, du laboratoire DIEGM de l'université d'Udine, et Arnaud Bournel de l'institut IEF localisé à Orsay. Je remercie également Yann-Michel Niquet, de l'équipe INAC du CEA, d'avoir participé à l'évaluation de ces travaux en acceptant d'être examinateur. Les améliorations suggérées sur mon manuscrit ainsi que l'ensemble des questions posées lors de la soutenance m'ont prouvé tout l'intérêt que les membres du jury ont apporté à ces résultats (et ce, malgré le volume de pages à lire!).

Je remercie sincèrement mon directeur de thèse Alain Poncet d'avoir participé à la gestion de ma thèse. Malgré l'éloignement géographique de mon laboratoire d'attachement INL et le site de Crolles, Alain s'est toujours montré présent dans le suivi de cette thèse. Par ailleurs, sa grande expérience des thèses m'a été profitable durant les moments les plus laborieux du déroulement de ces travaux.

Je remercie vivement Denis Rideau de m'avoir encadré quotidiennement et d'avoir su me transférer une majeure partie de son savoir théorique sur le fonctionnement des transistors MOSFETs. Son discernement et sa rigueur de raisonnement m'ont évité les écueils d'un enlisement de mes recherches et ont ainsi donné de l'ampleur à cette thèse par le bon nombre de résultats accumulés. Par ailleurs, j'ai également appris à ses côtés que la confrontation des idées n'est pas chose facile, mais permet de garantir un cheminement "pedestrian" des recherches.

Tout au long de ces années de thèse, j'ai bénéficié du soutien chaleureux de l'équipe TCAD. Je remercie le team manager Clément pour son aide dans la mise en place de méthodologies rigoureuses (justifiées sur le fonctionnement des voitures ...). Je remercie également Lorenzo pour sa gestion efficace de la ferme de calculs et sa grande expérience dans les calculs numériques à éléments finis, (indispensables dans une thèse de simulation). Sa rigueur scientifique et son professionnalisme ne cesseront d'être exemplaires pour la suite de mon parcours professionnel. Je suis reconnaissant de tout l'apport que m'ont procuré mes collègues dans cette thèse, Blandine, Daniel, François, Xavier,

Vincent et Olivier. Je souhaite particulièrement remercier: Adi et Thierry pour les nombreuses discussions cocasses et passionnantes abordées autour d'un café au sujet des dernières recherches en zététique, sur les légendes associées à l'ordre des Templiers ou autres Cathares, ... ; Pierre et Florian pour leurs indéfectibles soutiens. Merci également à Christelle qui s'est occupée avec efficacité de la préparation de mes missions ou encore de la gestion du matériel bureautique.

Je remercie également les collègues de l'équipe Device Modeling dont la proximité immédiate de l'équipe TCAD a favorisé de longues discussions intéressantes sur la modélisation compact analytique des transistors MOSFETs.

Je voudrais également souligner la précieuse solidarité entre thésards ST (tous dans le même bateau) qui m'a beaucoup apporté (étant le seul thésard arrivé en 2005 dans l'équipe). Je souhaite remercier les anciens thésards de l'équipe Device Modeling pour les midis piscines Anna, Hélène et Manu avec une mention particulière pour mon prédécesseur Fabien. Je souhaite également remercier les thésards qui me suivent dans l'équipe, Andres, Medhi, Romuald et Sébastien. Je remercie particulièrement mes "petits frères scientifiques", Alban, Marc, Paco et Vincent. Les virées nocturnes (à l'exemple de la STarac) resteront de grands moments de bonheur. Je souhaite vivement à tous une fin de thèse couronnée de succès.

Je souhaite également remercier l'équipe administrative du laboratoire INL qui s'est occupée avec efficacité des détails de la majorité de mes missions et de mes voyages en conférence.

Les mesures expérimentales de Wafer Bending n'auraient pu être menées à bien sans une action concertée avec plusieurs équipes de recherche: les équipes de modélisation de ST Rousset, ST Agrates et l'équipe de caractérisation mécanique du laboratoire CPM-GC. Dans le cadre des étapes préliminaires de mesures et de calibration de la modélisation des composantes de contraintes des lamelles de wafer, je remercie Ola Bolstrom, Florian Cacho et Gianpetro Carnevale. Merci à Sylvain Blayac d'avoir mis à ma disposition le banc d'expérience de Wafer Bending. Enfin, je suis profondément reconnaissant à Moustapha Kasbari et Romain Delamare de m'avoir consacré du temps, dans le cadre respectif de leurs thèse et post-doc, à la mise en place des mesures des caractéristiques électriques dans les transistors sous contrainte. Je remercie Christian Rivero dans la supervision des mesures de Wafer Bending.

J'ai eu l'occasion d'utiliser des simulateurs de transport Monte Carlo de dispositifs électroniques nécessitant plusieurs mois de développement... voire plusieurs années. Je tiens à remercier Andrea Ghetti de ST Agrates de m'avoir transféré le code de MC++ et de m'avoir porté assistance dans son utilisation. Le Monte Carlo SPARTA est, quant à lui, inclus dans la suite commerciale de SYNOPSIS, je remercie également son développeur Fabian Bufler de m'avoir aidé dans le balbutiement de mes premières simulations sous contraintes.

Le développement du simulateur Kubo-Greenwood 2Dk en auto-cohérence s'est réalisé en étroite collaboration avec l'équipe CMO de l'IEF. A cette occasion, je remercie Karim, Arnaud et Philippe. La préparation du papier en commun aura été l'un des moments les plus intenses de ma thèse. J'adresse également un clin d'œil à Damien pour le road trip plein de souvenirs en Californie après la conférence SISPAD.

La fin de la rédaction de cette thèse s'étant déroulée dans les locaux de l'IMEP, je souhaite remercier l'ensemble des membres de ce laboratoire de m'avoir accueilli et donné tous les moyens de la mener à bien. J'exprime toute ma gratitude pour ces personnes que j'ai pu rencontrer durant cette période et qui ont facilité mon intégration dans le laboratoire. Je tiens particulièrement à remercier chaleureusement Bruno, Raphaël et Quentin sans qui cet accueil n'aurait pas été possible. Je garde en mémoire les discussions sur la musique, les BDs durant les pauses de ces longues soirées de rédaction, tout comme les soirées au Druid's bar.

Je voudrais remercier les professeurs Christian Regnaut et Saïd Amokrane de la faculté Paris XII qui m'ont donné ce goût si particulier pour la Physique ... pour la beauté des Sciences. Je suis également reconnaissant à Michel Héritier de m'avoir accepté dans le Master de recherche "Physique de la matière condensée" d'Orsay (ex-DEA de Physique du solide). Cette année reste inoubliable par l'excellente qualité des différents cours que j'ai suivis.

Ces années de thèse ont également été celles de l'expérimentation de "Colloc's" sous toutes ses formes. Ces "colloc's" ont toutes été une source de réconfort et m'ont toutes encouragé dans les bons et mauvais moments. Dans l'ordre chronologique, je tiens à remercier Clémence (la justice dans le commerce), Ben et la maison du bonheur (le bonheur est dans les près de St-égréve), Manu (merci pour tous les bonnes pizzas), la team "14 rue Thiers" avec Pascalette la niçarte attitude et Morgan BBP society command board executive officer (la force dans la diversité... mais avant tout, elle est dans le 94), le squat de longue durée à la Guiguassette (Cristo, Kro, Elise, Emeu, Etienne et Jo... un p'tit yams!).

Je voudrais remercier ceux qui n'étaient jamais loin de ces colloc's: l'Ours Vincent (à la recherche de son Loup), Pierre, Céline (Volkswagen combi T3 attitude), Mathieu Letac et Flo (à quand le commerce de saucisse-galettes sur Gre ou Stuttgart!). Merci à Thomas, Lise, Guillaume et Hélène pour les bons moments passés ensemble autour d'un bon repas ou d'une p'tite mousse. Merci à l'INRIA computer graphics Ph. student connexion et à son entourage, Jul', Bab, Lio, Soph', Clara, David et sa petite famille (un poker ou une belotte!). Je souhaite également remercier dans le désordre Alanne, Cécile, Mathieu Mex, François, Thomas et Vincent.

Mille mercis à ma grande famille grenobloise de la chorale des bar'hics (auto-proclamée d'intérêt publique). Que d'émotions à se retrouver ensemble pour chanter. Je remercie les massifs alpins des environs de Grenoble qui m'ont procuré de belles balades et de belles sensations fortes sur mes deux skis. On peut d'ailleurs rencontrer Marise et Julien dans les balcons de la Belledonne cherchant de La Vulnéraire. Merci pour votre accueil inconditionnel certains dimanches soirs qui m'a donné à chaque fois une belle bouffée d'oxygène.

Merci également à mes amis parisiens de longue date, qui malgré la distance m'ont apporté beaucoup de soutien: les rangs d'oigneurs, la bande à Monta, Ja et Végéta. Merci à Maxime et ses coups de tel de sa lointaine Pologne.

Il est probable que des noms n'apparaissent pas dans ces quelques lignes, tout simplement par oubli devant le grand nombre de personnes à remercier, et cela malgré ma grande crainte d'oublier quelqu'un. Toutefois, je suis certain que ces personnes se reconnaîtront, je leur témoigne toute ma reconnaissance.

Enfin, je remercie affectueusement ma famille qui m'a toujours supportée (au sens figuré comme au sens propre) durant toutes ces années. Je dédie ces travaux à mes parents, mes sœurs Marylène, Roselyne .... mes beaux-frères, ainsi qu'à mes schtroumpfs de neveux et nièce dont j'ai vu sortir le bout du nez au cours de cette thèse: Baptiste, Clément, Raphaël et Justine. J'ajoute une tendre pensée à mes correcteurs pour les heures passées à scruter mes moindres fautes syntaxiques et grammaticales de ce manuscrit.



# TABLE DES MATIÈRES

<b>Remerciements</b>	<b>v</b>
<b>Table des Matières</b>	<b>ix</b>
<b>CHAPITRE I: Introduction générale</b>	<b>3</b>
<b>I.1. Introduction aux MOSFETs</b>	<b>3</b>
I.1.1. Contexte industriel	3
I.1.2. Notions élémentaires des dispositifs MOSFETs	4
I.1.3. Mobilité effective	6
<b>I.2. Challenges industriels et projets scientifiques</b>	<b>7</b>
I.2.1. Challenges industriels	7
I.2.1.1. Ingénierie de contrainte	8
I.2.1.2. Structures alternatives à l'architecture MOSFET planaire	9
I.2.2. Projets français et européen en marge de cette thèse	10
<b>I.3. Modélisation des effets de contrainte et de confinement</b>	<b>10</b>
I.3.1. Revue de la littérature	10
I.3.1.1. pMOSFET	10
I.3.1.2. nMOSFET	12
I.3.2. Remarques générales	14
I.3.3. Objectifs de thèse	15
I.3.4. Stratégie de modélisation adoptée durant cette thèse	16
<b>I.4. Outils de simulations numériques du transport de charges</b>	<b>17</b>
I.4.1. Equation du transport de Boltzmann	17
I.4.1.1. Formulation de l'équation maîtresse du transport	18
I.4.1.2. Mécanismes d'interaction	19
I.4.1.3. Domaine de validité de l'équation de transport de Boltzmann	20
I.4.2. La simulation de Dérive-Diffusion	20
I.4.2.1. Théorie du modèle de Dérive-Diffusion	20
I.4.2.2. Modèle de mobilité utilisé à STMicroelectronics	22
I.4.2.3. Modèle de saturation à fort champ utilisé à STMicroelectronics	22
I.4.2.4. Modélisation des effets quantiques	23
I.4.2.4.1. <i>Modèle du Tox effectif</i>	23
I.4.2.4.2. <i>Modèle de Densité Gradient</i>	24
I.4.2.5. Modélisation des effets des contraintes mécaniques	25
I.4.3. La méthode Monte Carlo	26
I.4.3.1. Présentation succincte de la méthode Monte Carlo	26
I.4.3.2. Etapes d'une simulation Monte Carlo	26
I.4.3.3. Simulations Monte Carlo de dispositifs	27
I.4.4. Formule de transport de Kubo-Greenwood	28
<b>I.5. Structure du manuscrit</b>	<b>29</b>
<b>Références</b>	<b>31</b>

<b>CHAPITRE II: Structures de bandes de matériaux sous contrainte</b>	<b>39</b>
<b>II.1. Introduction</b>	<b>39</b>
<b>II.2. Introduction aux structures de bandes</b>	<b>40</b>
II.2.1. Cristal et première zone de Brillouin d'un semi-conducteur de type IV.	40
II.2.2. Notions élémentaires des structures de bandes	41
II.2.3. Introduction aux méthodes de calcul de structures de bandes	43
II.2.4. Méthode ab initio	45
II.2.4.1. Notions de base de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)	45
II.2.4.2. Notions de base de la correction GW	47
II.2.4.3. Intégration sur la zone de Brillouin	48
II.2.4.4. Paramétrage de la méthode dans l'étude de la structure de bandes du Si et Ge	48
II.2.4.5. Utilisation de la méthode DFT-LDA	49
II.2.5. Modèles semi-empiriques	50
II.2.5.1. Méthode des Pseudo-potentiels Empiriques (EPM)	50
II.2.5.2. Méthode k.p 30 bandes	52
II.2.5.2.1. Présentation de la méthode	52
II.2.5.2.2. Procédure d'ajustement des paramètres du modèle k.p	57
II.2.5.3. Avantages et inconvénients des méthodes EPM et k.p	58
II.2.6. Modèle de l'approximation de la masse effective	60
<b>II.3. Structures de bandes de matériaux non contraints</b>	<b>63</b>
II.3.1. Comparaison des structures de bandes	64
II.3.2. Extrema de bandes	66
II.3.3. Masses de courbure et paramètres de Luttinger	68
II.3.4. Densité d'états	70
<b>II.4. Introduction de la contrainte dans le calcul de la structure de Bandes</b>	<b>71</b>
II.4.1. Problématique des calculs de structures de bandes sous contrainte	71
II.4.2. Introduction de la contrainte dans le calcul des structures de bandes	71
II.4.2.1. Méthode ab initio	72
II.4.2.2. Méthode EPM: Développement d'une fonction d'interpolation nouvelle	75
II.4.2.3. Méthode k.p 30 bandes optimisée	76
<b>II.5. Structures de bandes de matériaux sous contrainte biaxiale</b>	<b>80</b>
II.5.1. Comparaison des structures de bandes	80
II.5.2. Déplacement des bandes d'énergie dans les systèmes contraints Si <sub>1-x</sub> Gex / Si <sub>1-y</sub> Gey	80
II.5.3. Masses effectives dans les systèmes contraints Si <sub>1-x</sub> Gex / Si <sub>1-y</sub> Gey	84
II.5.3.1. Masses de courbure des électrons	85
II.5.3.2. Masses effectives de densité d'états des trous	87
<b>II.6. Structures de bandes de matériaux sous contrainte uniaxiale</b>	<b>90</b>
II.6.1. Bandes de conduction	90
II.6.2. Bandes de valence	90
II.6.2.1. Déplacement des bandes de valence	91
II.6.2.2. Courbures de bande selon <110>: analyse à partir de la variation de l'inverse de la masse	91
<b>II.7. Calcul analytique du Gap sous contrainte uniaxiale</b>	<b>93</b>
II.7.1. Méthode de calcul analytique du gap	93
II.7.1.1. Déplacement des bandes de conduction	93
II.7.1.2. Déplacement des bandes de valence	94
II.7.1.3. Fonction minimum analytique	96
II.7.2. Résultats des déplacements des bandes	97

II.7.3. Valeurs de Gap sous contraintes uniaxiales	97
<b>II.8. Discussion et Conclusion</b>	<b>98</b>
<b>Références</b>	<b>100</b>
<b>Simulateurs utilisés</b>	<b>105</b>
<b>CHAPITRE III: Transport de charges dans les transistors MOSFETs sous contraintes</b>	<b>109</b>
<b>III.1. Introduction</b>	<b>109</b>
III.1.1. Objectif du chapitre	109
III.1.2. Simulations Monte Carlo	109
III.1.2.1. Simulateur Monte Carlo d'ensemble: MC++	110
III.1.2.2. Simulateur Monte Carlo à flux incident: SPARTA	110
III.1.2.3. Comment intégrer la structure électronique dans un Monte Carlo "full-band"	111
<b>III.2. Modélisation des propriétés de transport dans les dispositifs non contraints</b>	<b>113</b>
III.2.1. Note préalable sur la calibration de MC++	113
III.2.1.1. Matériau massif	113
III.2.1.2. Couche d'inversion ; MOSFET long	114
III.2.2. Structure simulée	115
III.2.3. Quelques comparaisons entre SPARTA et MC++	116
III.2.3.1. Caractéristiques électriques d'un nMOSFET	116
III.2.3.1.1. <i>Caractéristiques Id-Vd</i>	116
III.2.3.1.2. <i>Caractéristiques Id-Vg</i>	116
III.2.3.1.3. <i>Bilan</i>	116
III.2.3.2. Profils de vitesse et de concentration le long du canal d'un dispositif MOSFET à canal ultra-court	117
III.2.3.3. Bilan sur les simulateurs MC++ et SPARTA	119
III.2.4. Influence de l'orientation et la longueur du canal sur un pMOS	120
III.2.4.1. Influence de l'orientation du canal d'un pMOSFET et de sa longueur	120
III.2.4.2. Caractéristiques électriques	120
III.2.4.3. Ion, Ilin en fonction de la longueur de grille	121
III.2.4.4. Ratio des courants Ion et Ilin en fonction de la longueur de grille	123
III.2.4.5. Note sur les modèles Dérive-Diffusion	125
III.2.4.6. Bilan sur la modélisation numérique des propriétés de transport dans un dispositif MOSFET non contraint	126
III.2.5. Des profils de champs et de vitesse issus des simulations Monte Carlo d'un nMOS-FET	127
III.2.5.1. Influence des conditions de polarisation	127
III.2.5.2. Influence de la longueur de grille	128
III.2.5.3. Profils d'énergie	129
<b>III.3. Simulations des propriétés de transport dans les MOSFETs contraints</b>	<b>130</b>
III.3.1. Quelques aspects pratiques à ne pas oublier	131
III.3.1.1. La très longue convergence des simulations Monte Carlo	131
III.3.1.2. Influence de la structure de bandes sur la variation de courant	133
III.3.1.2.1. <i>nMOSFETs</i>	135
III.3.1.2.2. <i>pMOSFETs</i>	135
III.3.1.2.3. <i>Bilan</i>	135
III.3.1.3. Contraintes utilisées dans les simulations numériques	135
III.3.1.4. Variations de la tension de seuil dans le cas du dispositif nMOSFET	136



III.3.2. Propriétés de transport des nMOSFETs sous contrainte	137
III.3.2.1. Simulations de courants sous contraintes uniaxiales	137
III.3.2.2. Analyse des simulations dans le régime linéaire du transport	139
III.3.2.2.1. Canal orienté <110>	139
III.3.2.2.2. Canal orienté <100>	142
III.3.2.3. Analyse des simulations dans le régime de saturation du transport	142
III.3.2.4. Remarques sur les simulations nMOSFETs sous contrainte	144
<b>III.4. Conclusion</b>	<b>145</b>
<b>Références</b>	<b>146</b>
<b>Simulateurs utilisés</b>	<b>149</b>
<b>CHAPITRE IV: Transport dans les systèmes confinés</b>	<b>153</b>
<b>IV.1. Introduction</b>	<b>153</b>
<b>IV.2. Introduction du confinement dans le calcul de structures de bandes.</b>	<b>153</b>
IV.2.1. Potentiel de confinement	154
IV.2.1.1. Hétérostructure	155
IV.2.1.2. Champ électrique constant	155
IV.2.2. Approximation de la fonction enveloppe Luttinger-Kohn	155
IV.2.3. Précision des résultats et temps de calcul	159
<b>IV.3. Structures de bandes dans un FD MOSFET non contraint</b>	<b>159</b>
IV.3.1. pMOSFETs	159
IV.3.1.1. Relation de dispersion des sous-bandes	159
IV.3.1.2. Déplacement des sous-bandes en fonction du confinement	160
IV.3.1.3. Fonctions d'onde et densités d'états	163
IV.3.2. nMOSFETs	164
IV.3.2.1. Relation de dispersion des sous-bandes	164
IV.3.2.2. Déplacement des sous-bandes en fonction du confinement	167
IV.3.2.3. Fonctions d'onde	168
<b>IV.4. Structures de bandes dans un FD MOSFET contraint</b>	<b>168</b>
IV.4.1. Introduction de la contrainte dans le calcul de structures de bandes de systèmes confinés	169
IV.4.1.1. Présentation de la problématique du calcul de structures de bandes dans un système 2D contraint	169
IV.4.1.2. Introduction de la contrainte dans les modèles k.p et EMA	171
IV.4.1.3. Etude approfondie des bandes de valence d'un matériau semi-conducteur contraint sous confinement	171
IV.4.1.3.1. Contrainte biaxiale tensile	171
IV.4.1.3.2. Contrainte uniaxiale tensile	172
IV.4.2. pMOSFETs sous diverses contraintes	172
IV.4.2.1. pMOSFETs sous déformation plane	172
IV.4.2.2. pMOSFETs sous contrainte biaxiale	174
IV.4.2.3. pMOSFETs sous contrainte uniaxiale	177
IV.4.2.4. Bilan sur les pMOSFETs	178
IV.4.3. nMOSFET sous diverses contraintes	180
IV.4.3.1. nMOSFET sous contraintes biaxiales	180
IV.4.3.2. nMOSFET sous contraintes uniaxiales	181
<b>IV.5. Discussion et conclusion sur les structures de bandes sous confinement</b>	<b>183</b>
IV.5.1. Traitement des conditions aux limites (aux interfaces Si/SiO <sub>2</sub> )	183

IV.5.2. Comparaisons avec d'autres méthodes: LCBB et TB	184
IV.5.2.1. Comparaison avec la méthode LCBB	184
IV.5.2.2. Comparaison avec la méthode TB	184
IV.5.3. Conclusion sur l'introduction du confinement dans le calcul de structures de bandes	185
<b>IV.6. Modélisation des propriétés de transport de gaz de trous par la formule de Kubo-Greenwood</b>	<b>186</b>
IV.6.1. Présentation de la problématique	186
IV.6.2. Formule de transport Kubo-Greenwood	186
IV.6.2.1. Transport des trous sous confinement	186
IV.6.2.2. Utilisation de la formule Kubo-Greenwood	188
IV.6.3. Application du couplage auto-cohérent k,p-Poisson-Schrödinger à une structure MOSFET.	188
IV.6.4. Transport des trous dans une couche d'inversion sous contrainte biaxiale	191
IV.6.5. Transport des trous dans une couche d'inversion sous contrainte uniaxiale	192
IV.6.5.1. Intégrales	192
IV.6.5.2. Variation de mobilité	193
IV.6.5.3. Analyse	194
<b>IV.7. Discussion sur le Transport des électrons dans les couches d'inversion sous contrainte</b>	<b>194</b>
<b>IV.8. Conclusion sur l'étude des propriétés de transport dans les systèmes confinés</b>	<b>196</b>
<b>Références</b>	<b>197</b>
<b>Simulateurs utilisés</b>	<b>200</b>

## **CHAPITRE V: Données expérimentales du transport dans les MOSFETs sous contraintes** **203**

<b>V.1. Introduction</b>	<b>203</b>
<b>V.2. Théorie de piezorésistance et expériences</b>	<b>204</b>
V.2.1. Expériences de Wafer Bending	204
V.2.1.1. Banc expérimental de Wafer Bending	204
V.2.1.2. Contraintes et mesures	206
V.2.2. Méthode d'extraction des coefficients du modèle de piezorésistance dans une couche d'inversion	210
V.2.2.1. Méthodes d'extraction de la variation de mobilité	211
V.2.2.1.1. Méthode de la variation de courant de drain	211
V.2.2.1.2. Méthode de la variation de $G_m$	211
V.2.2.1.3. Méthode split-CV	211
V.2.2.2. Exemples d'extraction de coefficients longitudinaux du modèle de piezorésistance	212
V.2.3. Extraction des coefficients de piezorésistance dans une couche d'inversion	213
V.2.3.1. nMOSFET	213
V.2.3.2. pMOSFET	215
<b>V.3. Solutions numériques vs. expériences de Wafer Bending</b>	<b>217</b>
V.3.1. Simulations Kubo-Greenwood de couche d'inversion de trous	217
V.3.1.1. Confrontation des simulations et des données expérimentales de Wafer Bending	217
V.3.1.2. Analyse de l'influence des temps de relaxation sur les propriétés de transport des trous sous contrainte uniaxiale	218

---

V.3.2. Simulations Monte Carlo vs. expériences	219
V.3.2.1. Confrontation des simulations Monte Carlo et des données expérimentales de Wafer Bending	219
V.3.2.2. Analyse des coefficients de piezorésistance du gaz d'électrons	221
<b>V.4. Discussion</b>	<b>223</b>
<b>V.5. Conclusion</b>	<b>223</b>
<b>Références</b>	<b>224</b>
<b>Simulateurs utilisés</b>	<b>225</b>
<b>CHAPITRE VI: Conclusion Générale</b>	<b>229</b>
<b>VI.1. Résultats</b>	<b>229</b>
<b>VI.2. Perspectives</b>	<b>231</b>
<b>Annexe du chapitre I</b>	<b>233</b>
<b>ANNEXE I.A Développement des modèles de Dérive-Diffusion à partir des moments de l'équation de Boltzmann</b>	<b>233</b>
<b>ANNEXE I.B Principes de fonctionnement d'un simulateur Monte Carlo</b>	<b>235</b>
<b>Annexe du chapitre II</b>	<b>239</b>
<b>ANNEXE II.A Relations entre les tenseurs de contrainte et de déformation dans les cas typiques de contraintes uniaxiales et biaxiales.</b>	<b>239</b>
<b>ANNEXE II.B Théorie des potentiels de déformation</b>	<b>245</b>
<b>ANNEXE II.C Courbures de bande sous contraintes uniaxiales: analyse à partir de courbes isoénergies</b>	<b>248</b>
<b>Annexe du chapitre III</b>	<b>251</b>
<b>ANNEXE III.A Simulations de MC++ dans un barreau de Silicium non contraint</b>	<b>251</b>
<b>ANNEXE III.B Simulations de SPARTA dans un barreau de Silicium non contraint de type n</b>	<b>253</b>
<b>ANNEXE III.C Notions des effets de transport hors-équilibre</b>	<b>255</b>
<b>ANNEXE III.D Variation de la tension de seuil sous contrainte</b>	<b>256</b>
<b>Sigles &amp; Notations</b>	<b>257</b>
<b>1. Acronymes de laboratoires</b>	<b>257</b>
<b>2. Sigles</b>	<b>257</b>
<b>3. Notations</b>	<b>259</b>

# CHAPITRE I: Introduction générale



---

# **CHAPITRE I: INTRODUCTION GÉNÉRALE**

## **I.1. Introduction aux MOSFETs**

### **I.1.1. Contexte industriel**

Depuis les années 1960, l'approfondissement des connaissances des semi-conducteurs et des technologies associées a permis l'essor rapide de l'industrie de la microélectronique. L'industrie du semi-conducteur s'est distinguée par un rythme soutenu d'améliorations dans sa production. En effet, l'indicateur le plus remarquable de ces améliorations est la capacité de l'industrie à réduire, de manière exponentielle, les dimensions caractéristiques minimales des dispositifs utilisés dans la fabrication des circuits intégrés (ou loi de *scaling*). Le niveau d'intégration est l'évolution la plus fréquemment citée, souvent exprimée par la "loi de Moore" (c'est à dire que le nombre de composants par puce double environ tous les 24 mois [1]). Au cours des années, cette loi empirique a parfois été considérée comme une prophétie "auto-réalisée" (*self-fulfilling prophecy* [2]). L'accomplissement de cette loi permet aujourd'hui l'introduction de plusieurs dizaines de millions de transistors dans nos microprocesseurs. Par ailleurs, la "loi de Moore" constitue un lien entre les dimensions du transistor et les considérations socio-économiques. En effet, la réduction des dimensions caractéristiques du transistor s'accompagne de la diminution du coût par fonction logique<sup>1</sup>. Ce qui conduit à des améliorations significatives de la productivité économique et de la qualité de vie globale par la prolifération d'ordinateurs, d'outils de communication ou encore de produits électroniques industriels et de consommation.

Le transistor MOSFET (*Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*) est l'un des transistors les plus couramment employés dans les circuits intégrés. Les dimensions de ces dispositifs sont caractérisées chez les industriels par le concept de *noeud technologique*, qui reflète la longueur de grille minimale du dispositif. Le noeud technologique actuellement en cours d'industrialisation est le noeud 45nm. A cette date, les feuilles de route des industriels du semi-conducteur rivalisent avec les projections les plus ambitieuses de la réduction des dispositifs CMOS (les feuilles de route de l'ITRS 2007 prédisent des transistors MOSFETs de longueurs de 11 nm pour 2022 [2]). Toutefois, malgré le regroupement des industriels dans ce but [3], il est plutôt difficile pour la plupart des acteurs de la microélectronique d'imaginer les moyens de financer l'augmentation incessante du coût des équipements de fabrication pour les 15 prochaines années [2].

Par ailleurs, la diversification des produits de l'industrie de la microélectronique, ainsi que l'intégration de technologies non-CMOS dans les circuits intégrés, requièrent des innovations dans des champs pluridisciplinaires, tels que la nano-électronique, la nano-thermomécanique ou encore la nano-biologie. La diversification de la production de l'industrie du semi-conducteur est récemment indiquée par une loi complémentaire à celle de Moore, appelée la "loi more than Moore" [2].

Avant de préciser les challenges industriels qui ont façonné les objectifs de cette thèse, nous rappelons brièvement le concept de base du transistor MOSFET.

---

<sup>1</sup>La diminution du coût unitaire des transistors n'est pas liée dans un rapport proportionnel avec la diminution des caractéristiques des transistors. En effet, l'investissement des industriels dans les programmes R&D et les outils de production sont de plus en plus conséquents. Le coût des matériaux et du budget thermique par unité de surface augmente à chaque noeud technologique.

## I.1.2. Notions élémentaires des dispositifs MOSFETs

Les propriétés des semi-conducteurs peuvent être contrôlées en les dopant avec des impuretés (autres matériaux). Un semi-conducteur présentant plus d'électrons que de trous (par un fort dopage en atomes donneurs) est alors dit de type  $n$ , tandis qu'un semi-conducteur présentant plus de trous que d'électrons (par un fort dopage en atomes accepteurs) est dit de type  $p$ . Le dopage des semi-conducteurs constitue une étape élémentaire des procédés de fabrication des dispositifs électroniques.

Nous étudions dans ce manuscrit les propriétés de transport des dispositifs MOSFET à effet de champ largement utilisés dans l'industrie.

Les dispositifs MOSFETs sont constitués de 4 électrodes (Figure I.1): la grille, la source, le drain et le substrat (ou encore *Bulk*). Les tensions appliquées à la source, grille, drain et substrat sont généralement notées  $V_s$ ,  $V_g$ ,  $V_d$  et  $V_b$ . Les grandeurs caractéristiques du transistor MOSFET sont la longueur de grille  $L_g$ , son épaisseur  $w$  et l'épaisseur d'oxyde  $T_{ox}$ . Les types de dopage introduits dans les différents modules du MOSFET vont conditionner ses propriétés électriques. De fait, le courant électrique dans les MOSFET est généré par les porteurs minoritaires de la zone semi-conductrice, appelée canal. Lorsque le courant de drain est porté par les électrons (par les trous) le dispositif est appelé nMOSFET (pMOSFET, respectivement). Par ailleurs, les porteurs de charge sont injectés dans la source et collectés dans le drain.

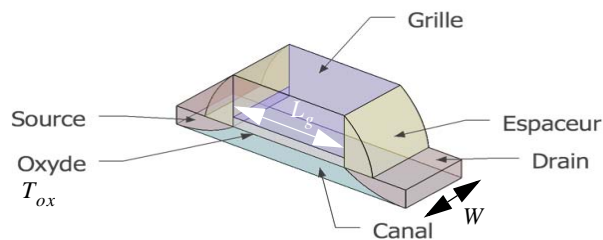


Figure I.1: Schéma d'une structure d'un transistor MOSFET.

Un transistor MOSFET est principalement constitué de 3 modules:

- Le module de grille: c'est l'électrode qui commande le régime de fonctionnement du dispositif, tel un interrupteur. Le champ électrique transverse issu de cette électrode, et transmis à travers l'oxyde isolant de grille, va moduler la densité des porteurs de charge dans le canal. Cette électrode est dopée  $n^+$  ou  $p^+$ , lorsqu'il s'agit d'un nMOS ou d'un pMOS.
- Le module de canal: cette zone est située sous l'oxyde de grille. Elle est le lieu de conduction des porteurs minoritaires. Le substrat est dopé  $p$  ou  $n$  lorsqu'il s'agit d'un dispositif nMOS ou pMOS.
- Le module de jonction et extension: ce sont les électrodes latérales situées aux extrémités du canal. Ces électrodes sont appelées zones de source et de drain et notées  $S/D$ . Ces zones s'apparentent à des réserves de porteurs de charge. Par ailleurs, le courant électrique est généré dans le dispositif lorsqu'un différentiel de potentiel existe entre ces électrodes. Ces régions sont dopées  $n$  ou  $p$  lorsqu'il s'agit d'un dispositif nMOS ou pMOS.

L'empilement du contact métallique de grille, de l'oxyde isolant de grille et du substrat forme la capacité MOS. Cette capacité va déterminer le régime de fonctionnement du dispositif. Le transistor MOSFET fonctionne généralement selon deux principaux régimes: le régime sous le seuil et celui d'inversion. La frontière entre ces deux régimes est caractérisée par une valeur particulière de la tension de grille, appelée tension de seuil  $V_{th}$ . D'un point de vue physique, cette tension est atteinte lorsque la densité des porteurs minoritaires égale celle des porteurs majoritaires dans le canal. Dans le cas des nMOSFET, son expression la plus connue est la suivante [4]:

$$V_{th} \approx V_{FB} + 2\phi_f + \frac{\sqrt{2\varepsilon_0\varepsilon_{Si}qN_{ch}2\phi_f}}{C_{ox}} \quad \text{Eq-I.1}$$

$V_{FB}$  correspond à la tension de bande plate (*flat band*).  $\phi_f$  correspond au potentiel de Fermi.  $\varepsilon_0$  et  $\varepsilon_{Si}$  sont respectivement les constantes diélectriques du vide et du semi-conducteur (ici du Si).  $N_{ch}$  est la concentration dans le canal.  $C_{ox}$  est la capacité d'oxyde du dispositif, exprimée par  $C_{ox} = \varepsilon_{ox}/T_{ox}$ , où  $\varepsilon_{ox}$  est la constante diélectrique de l'oxyde de grille.

Pour une tension de grille inférieure à  $V_{th}$ , le transistor est en régime bloqué, ou sous le seuil. La conduction s'effectue par diffusion des porteurs de charge. Pour une tension au-dessus de  $V_{th}$ , le transistor est en régime d'inversion ou passant. La conduction dans ce régime s'effectue essentiellement par dérive induite par le champ électrique longitudinal.

Dans le régime d'inversion, nous distinguons deux modes, linéaire et saturé, en fonction de la différentielle de tension  $V_{ds}$  entre la source et le drain:

- En mode linéaire dans un MOSFET à canal long, c'est à dire  $V_{ds} < V_{gs} - V_{th}$ , le courant est proportionnel à  $V_{ds}$ :

$$I_d = \mu_n C_{ox} \frac{W}{L_g} \left( (V_{gs} - V_{th}) V_{ds} - \frac{V_{ds}^2}{2} \right) \quad \text{Eq-I.2}$$

où  $w$  est la largeur de grille,  $L_g$  est la longueur de grille et  $C_{ox}$  est la capacité d'oxyde par unité de surface.  $\mu_n$  correspond à la mobilité effective des porteurs de charge, liée aux propriétés de transport. Ces aspects seront définis ultérieurement en Section I.1.3. Par ailleurs, la dérivée de ce courant en fonction de  $V_{gs}$  est appelée transconductance  $G_m$ . Dans le cadre du régime linéaire, cette dernière s'exprime comme suit:

$$G_m = C_{ox} \frac{W}{L} V_{ds} \cdot \left( \mu_n + \frac{\partial \mu_n}{\partial V_{gs}} \cdot V_{gs} \right) \quad \text{Eq-I.3}$$

Notons que cette caractéristique est fortement dépendante de la mobilité effective des porteurs de charge.

- En revanche, lorsque  $V_{ds} > V_{gs} - V_{th}$ , la dépendance du courant de drain en fonction de  $V_{ds}$  se réduit fortement et  $I_d$  dépend alors à  $V_{gs}$  de manière quadratique:

$$I_d = \mu_n C_{ox} \frac{W}{L} (V_{gs} - V_{th})^2 \quad \text{Eq-I.4}$$

Dans ce manuscrit, les courants de drain des régimes linéaire et saturé sont respectivement notés  $I_{lin}$  et  $I_{on}$ .



### 1.1.3. Mobilité effective

Le terme de mobilité  $\mu_n$  des équations Eq-I.2 et Eq-I.4 est directement lié aux propriétés de transport. Le modèle de Drude est l'une des expressions les plus connues de ce terme qui s'écrit comme suit:

$$\mu = \left| \frac{q\tau}{m_c^*} \right| \quad \text{Eq-I.5}$$

La mobilité dépend du type de porteur de charge, du temps de relaxation  $\tau$  dû aux interactions entre les porteurs et la matière et de la masse effective de conduction  $m_c^*$ .

Plusieurs mécanismes d'interaction interviennent dans le calcul de ces propriétés. Si les mécanismes d'interaction sont indépendants, les éléments de la matrice d'interactions peuvent s'ajouter et on obtient le taux d'interaction total. Dans l'approximation du temps d'interaction, cela équivaut à additionner l'inverse des temps de relaxation  $\tau$  de chaque interaction  $i$  (phonons, impuretés ionisées et rugosité de surface) à une énergie donnée  $E$ :

$$\frac{1}{\tau_{tot}(E)} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(E)} \quad \text{Eq-I.6}$$

La mobilité totale à faible champ peut s'obtenir par l'insertion de l'équation Eq-I.6 dans l'expression Eq-I.5. Cependant, bien que rigoureux, ce calcul est complexe et ne permet pas de discriminer facilement les différentes contributions à la mobilité [5]. Afin de manipuler plus facilement l'expression de la mobilité, il est possible de simplifier les calculs pour obtenir la règle de Matthiessen (voir Eq-I.7).

L'expérience montre qu'il est possible de définir une loi de la mobilité, dite universelle, pour les électrons et les trous, valable quelle que soit la technologie utilisée. La loi de mobilité universelle  $\mu_{eff}$  peut être décomposée en plusieurs composantes représentatives des mécanismes d'interaction [6]. Ces composantes sont en fonction puissance  $s$  d'un champ effectif  $E_{eff}$ , c'est à dire  $(E_{eff})^s$ . A bas champ électrique longitudinal, c'est à dire à faible  $v_d$  (lorsque le transistor est en régime linéaire), seules trois composantes de la mobilité prédominent:

- La mobilité liée aux interactions relatives à la rugosité de surface, prépondérante à fort champ effectif. En comparaison des matériaux massifs, les MOSFETs présentent des conditions aux limites qui perturbent le transport des porteurs de charge. La présence de l'interface Si/SiO<sub>2</sub> est perçue par les porteurs de charge de la couche d'inversion comme un ensemble de potentiels perturbatifs. Ceux-ci définissent la rugosité de surface [5]. La rugosité de surface est donc une contribution additionnelle au transport de charges dans les dispositifs électriques:

$$\text{pour les électrons: } \mu_{sr} \left[ \frac{cm^2}{Vs} \right] = 1450 \cdot E_{eff}^{-2,9} \left[ \frac{MV}{cm} \right] \quad \text{à 300 K}$$

$$\text{pour les trous: } \mu_{sr} \left[ \frac{cm^2}{Vs} \right] = 140 \cdot E_{eff}^{-1} \left[ \frac{MV}{cm} \right] \quad \text{à 300 K}$$

- La mobilité liée aux interactions avec les phonons, prépondérante à moyen champ effectif. Ces interactions sont liées aux phonons du matériau massif du canal, mais aussi aux phonons de surface qui apparaissent à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. Pour des températures inférieures à 100 K, l'interaction avec les phonons acoustiques domine. Au delà de cette température, l'interaction avec les phonons optiques domine:

$$\text{pour les électrons: } \mu_{ph} \left[ \frac{cm^2}{Vs} \right] = 330 \cdot E_{eff}^{-0,3} \left[ \frac{MV}{cm} \right] \quad \text{à 300 K}$$

$$\text{pour les trous: } \mu_{ph} \left[ \frac{cm^2}{Vs} \right] = 90 \cdot E_{eff}^{-0,3} \left[ \frac{MV}{cm} \right] \quad \text{à 300 K}$$

- La mobilité liée aux interactions coulombiennes, engendrées par les impuretés ionisées, est généralement prise en compte, bien que sa contribution ne soit pas universelle. Cette composante du transport dans les MOSFETs se déduit des caractéristiques dans les matériaux massifs. Par exemple, l'impact du dopage sur la vitesse des porteurs de charge dans le canal se déduit des caractéristiques des matériaux massifs<sup>2</sup>. Sa contribution est prépondérante à faible champ électrique. Par ailleurs, ce mécanisme est plutôt limitant à basse température:  $\mu_c \propto E_{eff} \cdot T$

Dans le cadre d'une modélisation analytique relativement simple, la mobilité totale en couche d'inversion peut être extrapolée en utilisant la loi de Matthiessen:

$$\frac{1}{\mu_{eff}} = \frac{1}{\mu_{ph}} + \frac{1}{\mu_{sr}} + \frac{1}{\mu_c} \quad \text{Eq-I.7}$$

Le champ effectif  $E_{eff}$  reflète le champ électrique de surface, mais n'a pas de définition physique précise [7]. Toutefois, ce dernier permet l'addition des contributions au transport pour créer la loi de mobilité universelle. En effet, la mobilité dans un transistor est dépendante du champ électrique de surface et des paramètres technologiques (dopage). Ce champ effectif s'exprime de manière générale par l'expression suivante:

$$E_{eff} = (\alpha Q_{inv} + \beta Q_{dep}) \quad \text{Eq-I.8}$$

$Q_{inv}$  et  $Q_{dep}$  sont les charges d'inversion et de déplétion dans le canal. Les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  sont des coefficients d'ajustement qui dépendent du substrat, de l'orientation cristalline, de la direction du transport et du type de porteur. Pour un substrat de Si orienté selon la direction  $\langle 001 \rangle$  avec comme direction de transport  $\langle 110 \rangle$ , les coefficients d'ajustement du champ effectif valent ( $\alpha = 1/2$ ,  $\beta = 1$ ) dans le cas des électrons et ( $\alpha = 1/3$ ,  $\beta = 1$ ) dans le cas des trous.

## I.2. Challenges industriels et projets scientifiques

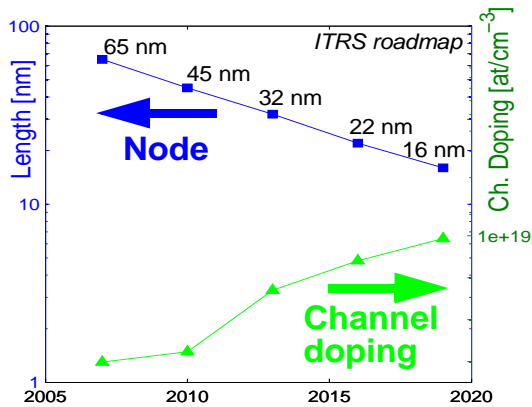
### I.2.1. Challenges industriels

L'industrie de la microélectronique connaît régulièrement des périodes indécises. La diminution des caractéristiques des dispositifs CMOS (*Complementary Metal Oxide Semiconductor*) ne s'effectue pas sans obstacles technologiques à surmonter. Chaque transition de noeud technologique se ponctue par des ruptures technologiques.

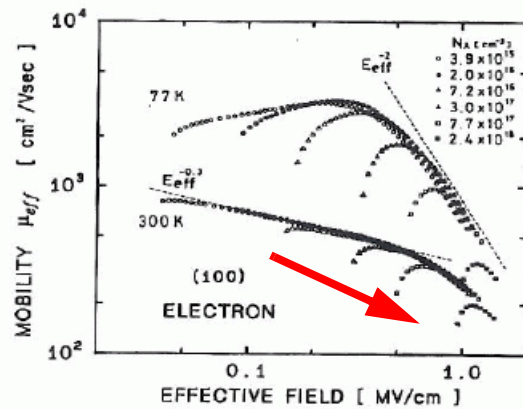
Le dopage dans le canal a significativement augmenté au fur et à mesure de la réduction des dimensions des transistors MOSFETs<sup>3</sup> (voir Figure I.2). Le champ effectif dans le dispositif en est également intensifié. De fait, la mobilité des porteurs de charge, liée au champ effectif, en est également fortement dégradée (Figure I.3). Afin de conserver et même d'améliorer les performances des dispositifs, des *boosters* technologiques ont été mis en place. L'ingénierie de contrainte par l'utilisation de l'effet piezorésistif, constitue l'un de ces *boosters*. Par ailleurs, le transistor MOSFETs reste une technologie dominante dans les circuits intégrés par sa capacité à augmenter ses performances tout en diminuant sa puissance de consommation [8]. Toutefois, le transistor MOSFET n'a pratiquement subi de changement de structure. Les industriels explorent actuellement des structures innovantes de transistor afin de pallier au ralentissement de la "loi de Moore". L'utilisation de dispositifs à substrat à base d'isolant n'est pas exclu dans le développement du noeud 22 nm et en

<sup>2</sup>à la condition que la variation spatiale du champ électrique en ces points soit lente.

<sup>3</sup>Le dopage dans le canal est augmenté en fonction du noeud technologique afin de limiter les effets de canaux courts. Ces effets sont détaillés en Ref. [9].



**Figure I.2:** Dopage du canal en fonction des années associées à la réalisation des noeuds technologiques prévue par la feuille de route de l'ITRS [2].



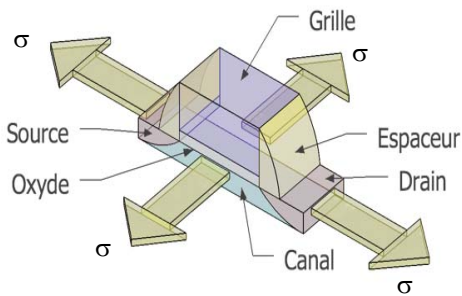
**Figure I.3:** Mobilité effective des électrons en fonction du champ effectif [7].

deçà.

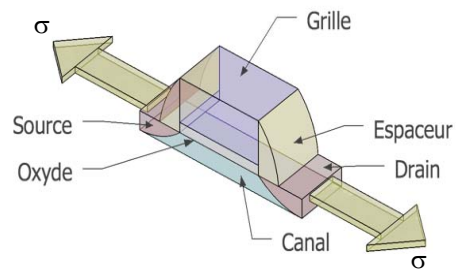
### 1.2.1.1. Ingénierie de contrainte

Des contraintes sont introduites intentionnellement dans les procédés de fabrication des transistors MOSFETs dans le noeud technologique 90nm et en deçà. Ces contraintes modifient en profondeur les caractéristiques électriques en sortie des dispositifs électroniques. Sous certaines conditions d'utilisation, ces contraintes améliorent les performances électriques des dispositifs électroniques. Plusieurs types de contraintes sont actuellement générés dans les procédés de fabrication:

- Les contraintes biaxiales (Figure I.4) sont produites par la croissance du canal sur un substrat constitué d'un matériau massif relaxé (par exemple, le cas typique d'une fine couche de Si déposée par épitaxie sur du matériau SiGe massif [10][11] ou encore sur isolant SiO<sub>2</sub> [12]).



**Figure I.4:** Structure MOSFET sous contrainte biaxiale tensile. Les Flèches symbolisent les contraintes appliquées de valeurs  $\sigma$ .



**Figure I.5:** Structure MOSFET sous contrainte uniaxiale tensile. Les Flèches symbolisent les contraintes appliquées de valeurs  $\sigma$ .

- Les contraintes uniaxiales (Figure I.5) sont produites par deux procédés de fabrication. Premièrement par le dépôt de films de nitrure compressif ou tensile sur les dispositifs, enveloppant les zones de source/drain et la grille [13][14]. Deuxièmement, par l'introduction de matériaux dans les zones de source et drain [15][16].

L'ingénierie de contrainte semble privilégier les contraintes uniaxiales en appliquant les deux procédés de fabrication selon le type de dispositifs [8]:

- Le dépôt de film tensile de nitrure est appliquée dans les dispositifs nMOSFETs. Il résulte de ces procédés de fortes composantes tensile et compressive dans les directions respectives longitudinales et normales au plan du canal.

- Les extensions SiGe dans les sources/drain des dispositifs pMOSFETs permettent de comprimer le canal par les côtés. La composante dominante de contrainte est longitudinale et de nature tensile.

L'ingénierie de contraintes uniaxiales par dépôt de film de nitrure est utilisée dans les procédés de fabrication du groupe industriel STMicroelectronics depuis le noeud technologique 65nm. Les valeurs moyennes des contraintes  $\sigma$  de la technologie 65nm dans le référentiel du canal, issues de simulations mécaniques [17], sont reportées en Tableau I.1 pour deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ .

**Tableau I.1:** Valeurs moyennes des contraintes dans le canal [17]. Les composantes du tenseur de contrainte sont exprimées dans le référentiel du canal.  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  et  $\sigma_{zz}$  correspondent aux composantes de contrainte longitudinale, transverse et perpendiculaire au canal.  $\sigma_{xz}$  correspond à la composante de cisaillement.

[MPa]	Composantes du tenseur de contrainte			
	$\sigma_{xx}$	$\sigma_{yy}$	$\sigma_{zz}$	$\sigma_{xz}$
canal $\langle 110 \rangle$	105,7	-63,4	-144,5	54,5
canal $\langle 100 \rangle$	88,5	-29,8	-138,5	51,4

Dans cette technologie récente, les valeurs des contraintes longitudinales appliquées par dépôt de film de nitrure ne dépassent pas 200 MPa dans le canal. En revanche, l'introduction de matériaux SiGe dans les zones source/drain laisse présager des valeurs moyennes de contrainte compressive dans le canal excédant 1 GPa [8][16][18].

### 1.2.1.2. Structures alternatives à l'architecture MOSFET planaire

Par ailleurs, les feuilles de route commencent à présenter les éventuelles limitations technologiques des prochains dispositifs conventionnels MOSFETs planaires à base de substrat Si [2]. Des dispositifs "post-CMOS" deviennent des alternatives technologiques de plus en plus envisagées dans les prochains noeuds technologiques<sup>4</sup>. Parmi ces dispositifs, citons ceux à base de substrat SOI (*Silicon on Insulator*) et SON (*Silicon on Nothing*) [19]. Dans ces types de dispositifs, le transport s'effectue uniquement par un gaz confiné de porteurs de charge. L'influence des effets de confinement sur les propriétés électroniques et de transport de ces porteurs de charge doit être étudiée et prise en compte dans la modélisation et la conception de ces dispositifs. De plus, la combinaison des effets de contraintes biaxiales et de confinement a récemment été caractérisée dans des dispositifs à substrat isolant SOI [12].

<sup>4</sup>De plus, l'amélioration des performances des circuits électriques ne se réalise pas uniquement avec l'augmentation du niveau d'intégration, mais aussi avec un ensemble complexe donné de paramètres. Ces derniers sont choisis par les règles de design et de technologie.

## **I.2.2. Projets français et européen en marge de cette thèse**

La stratégie de conception d'un transistor demande l'intervention de la modélisation numérique afin de faciliter et améliorer la vitesse et le coût de développement. La modélisation des futures générations de transistors MOSFET implique une compréhension profonde des principes physiques fondamentaux de la contrainte et des phénomènes quantiques. La perspective de cette modélisation est de prédire aussi précisément que possible l'impact de ces effets sur les caractéristiques électriques en sortie des dispositifs MOSFETs. Il est donc nécessaire que les acteurs de chaque domaine de la microélectronique adaptent leurs connaissances et leur expertise technique à ces phénomènes. A cette fin, le projet national MODERN a été élaboré en regroupant de grands groupes industriels (CEA-LETI, NXP et STMicroelectronics) ainsi que des laboratoires académiques (CNRS, INPG, INSA Lyon) [20]. Par ailleurs, un projet Européen, coordonné par ST-Microelectronics, a également été conçu dans la perspective de répondre à ces problématiques [21]. Cette thèse CIFRE, issue d'une collaboration entre l'entreprise ST Microélectronique et l'institut INSA Lyon, a activement participé à ces deux projets.

## **I.3. Modélisation des effets de contrainte et de confinement**

### **I.3.1. Revue de la littérature**

Toutes les questions concernant l'influence des effets de contraintes et de confinement sur les propriétés électroniques et de transport des semi-conducteurs ont fortement mobilisé la communauté de la modélisation. Cette activité s'est manifestée par les nombreuses publications durant ces quinze dernières années. La modélisation de ces effets va dépendre du type de matériau étudié ( $n$  ou  $p$ ). Ainsi, les travaux de la littérature traitent, généralement de manière indépendante, les effets de contrainte et de confinement sur le comportement de chaque type de porteur (électron ou trou). Dans cette section, nous séparons également les travaux effectués dans la littérature en fonction du type de porteur produisant le transport.

Les outils de simulation de transport (Monte Carlo, Kubo-Greenwood) et le modèle de piezorésistance, mentionnés ci-dessous, seront plus amplement détaillés dans la Section I.4. Les notions élémentaires associées aux méthodes numériques utilisées ou développées durant cette thèse y seront introduites.

#### **I.3.1.1. pMOSFET**

En 1994, D. K. Nayak et al. [22] donnèrent la première analyse des propriétés de transport des trous sous contrainte biaxiale à partir de la résolution de la formule de Kubo-Greenwood. Par la suite, Fischetti et al. [23] ont complété ces études à l'aide de la méthode Monte Carlo, qui résout les propriétés de transport pour toutes les conditions de polarisation. Les dispositifs pMOSFETs ont été largement étudiés sous contraintes biaxiales (canal contraint déposé par épitaxie sur un matériau massif) [24][25]. Les effets de confinement sur le transport des trous (gaz de porteurs 2D) ont été pris en compte pour la première fois par Oberhuber et al. [26]. La combinaison des effets de contrainte biaxiale et de confinement a également été étudiée par Fischetti et al. [27] sur trois différentes orientations de substrat. Cependant, les dispositifs électroniques ont montré de meilleures améliorations de leurs caractéristiques électriques sous contraintes uniaxiales. Des études complémentaires à l'aide de simulateur Monte Carlo ont donc été réalisées en tenant compte de ces contraintes uniaxiales [28][29][30][31]. En 2007, un ensemble de travaux, analysant l'influence des effets de confinement en conjonction des contraintes uniaxiales, a été simultanément publiés sur la

base de simulations Kubo-Greenwood [32][33]. Par ailleurs, l'influence de contraintes biaxiales et uniaxiales sur les propriétés de transport a été étudiée pour différentes orientation de substrat afin de déterminer une orientation cristallographique présentant les meilleur compromis de performances [34][35][36]. Enfin, un degré de raffinement dans l'analyse a récemment été ajouté par Pham et al. [37][38][39], via l'introduction de l'autocohérence dans le calcul de structures de bandes par l'approche du  $k.p$ -Poisson-Schrödinger. Par ailleurs, ces derniers travaux se sont aussi attachés à décrire les propriétés de transport dans des architectures alternatives de MOSFETs à base de substrat SOI. Notons également l'apparition récente de nouvelles méthodes de résolution déterministe de l'équation de Boltzmann dans une couche d'inversion [40]. Cette méthode, efficace en temps de calcul, est développée sur la base des harmoniques sphériques.

L'ensemble des références associées à ces travaux est résumé en Tableau I.2 dans l'ordre chronologique.

**Tableau I.2:** Liste des références associées à la modélisation des propriétés de transport dans les matériaux massifs de type  $p$ , les transistors pMOSFETs planaires, ainsi que les architectures alternatives de type SOI. Cette liste est classée dans l'ordre chronologique. ( ) et < > indiquent respectivement l'orientation du substrat et la direction des contraintes uniaxiales appliquées.

Auteur	Méthode	Dimension	Structure de bande	Structure	Contraintes	Confrontation simu. / exp.
Nayak et al. [22] (1994)	Kubo-Greenwood	3Dk	$k.p$ 6 bandes	Matériau massif croissance (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	non
Fischetti et al. [23] (1996)	Monte Carlo d'ensemble	3Dk	EPM	Matériau massif croissance (001)	Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub> / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	oui
Oberhuber et al. [26] (1998)	Monte Carlo d'ensemble	2Dk	$k.p$ 6 bandes + Poisson	pMOSFET planaire substrat (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	oui
Bufler et al. [24] (2003)	Monte Carlo à flux incident	3Dk	EPM	pMOSFET planaire substrat (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	non
Jungemann et al. [25] (2003)	Monte Carlo d'ensemble	3Dk	EPM	pMOSFET planaire substrat (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	non
Fischetti et al. [27] (2003)	Kubo-Greenwood	2Dk	$k.p$ 6 bandes + Poisson	Couche d'inversion substrat (001), (011) et (111)	Biaxiales	oui
Thompson et al. [32] (2006)	Kubo-Greenwood	2Dk	$k.p$ 6 bandes + Poisson	Couche d'inversion 1- substrat (001) 2-transport<110>/<001> 3-<100>/<011>	1- Biaxiale 2- Uniaxiale <110> 3- Uniaxiale <100>	oui
Wang et al. [33] (2006)	Monte Carlo d'ensemble Kubo-Greenwood	MC:3Dk K-G: 2Dk	$k.p$ 6 bandes + Poisson	Couche d'inversion substrat (001) transport <110>	1-Biaxiale 2-Uniaxiales <110>	oui
Bufler et al. [36] (2006)	Monte Carlo à flux incident	3Dk	$k.p$ 6 bandes	pMOSFET planaire substrat (110) transport 1- <111> 2- <001> 3- <110>	Uniaxiales: 1- <111> 2- <001> 3- <110>	oui
Krishnamohan et al. [28][29] (2006-2007)	Monte Carlo	3Dk	EPM	pMOSFET planaire substrat (001)	- Uniaxiale longitudinale arbitraire	non

**Tableau I.2:** Liste des références associées à la modélisation des propriétés de transport dans les matériaux massifs de type  $p$ , les transistors pMOSFETs planaires, ainsi que les architectures alternatives de type SOI. Cette liste est classée dans l'ordre chronologique. ( ) et < > indiquent respectivement l'orientation du substrat et la direction des contraintes uniaxiales appliquées.

Auteur	Méthode	Dimension	Structure de bande	Structure	Contraintes	Confrontation simu. / exp.
Fan et al. [30] (2007)	Monte Carlo d'ensemble	3Dk	$k.p$ 6 bandes	pMOSFET planaire substrat (001)	-Uniaxiales <110> et < $\bar{1}10$ >	oui
Bufler et al. [35] (2008)	Monte Carlo à flux incident	3Dk	$k.p$ 6 bandes	pMOSFET planaire Substrat (110) et (100) transport <110>	stress <110> + pockets SiGe	oui
Huet et al. [31] (2008)	Monte Carlo d'ensemble	3Dk	$k.p$ 30 bandes	Double grille pMOSFETs Substrat (001)	-Biaxiale	non
Krishnamohan et al.[34] (2008)	Monte Carlo Kubo-Greenwood	3Dk	EPM	Double grille pMOSFETs Substrat (001), (110) et (111)	Uniaxiale longitudinale arbitraire	non
Pham et al. [37][38][39] (2007-2008)	Kubo-Greenwood	2Dk	$k.p$ 6 bandes + Poisson autocohérent	1- pMOS planaire: substrat (001), (110) et (111) 2- SOI Simple Grille substrat (001) 3- Double Grille substrat (001) transport <110> -4 HOI: substrat (001) -5 SSDOI: substrat (001)	1- Uniaxiale longitudinale arbitraire 2- Biaxiale (SiGe) 3- Biaxiale et Uniaxiale <110> -4 HOI: Biaxiale (SiGe) -5 Biaxiale (SiGe)	oui
De Michielis [41] (2008)	Monte Carlo multi sous-bandes	2Dk	Modèle analytique (référence $k.p$ 6 bandes)	1- pMOS planaire substrat (001) 2- pMOSFET	non contraint	oui
Pham et al. [40] (2008)	Boltzmann Déterministe	2Dk	$k.p$ 6 bandes + Poisson autocohérent	-pMOSFET double grille substrat (001) transport <110>	uniaxiale <110>	oui

### I.3.1.2. nMOSFET

De part la description relativement simple des vallées de conduction par l'approche Poisson-Schrödinger, la combinaison des effets de confinement et de contraintes biaxiales dans les couches d'inversion a rapidement été modélisée au début des années 90 [42][43]. Des études complémentaires de ces effets ont été réalisées sur des structures MOSFETs à l'aide de l'approche Monte Carlo 3Dk [23][25][44][45]. Récemment, la communauté de la modélisation numérique a connu un regain d'intérêt pour la simulation des propriétés de transport des électrons sous contraintes uniaxiales [46][47]. La nature 2Dk du transport dans les transistors MOSFETs contraints a par ailleurs été étudiée par l'utilisation de la formule Kubo-Greenwood [48] et Monte Carlo multi sous-bandes [49][50].

L'ensemble des références associées à ces travaux est résumé en Tableau I.3 dans l'ordre chronologique.

**Tableau I.3:** Liste des références associées à la modélisation des propriétés de transport dans les matériaux massifs de type  $n$ , les transistors nMOSFETs planaires, ainsi que les architectures alternatives de type SOI. Cette liste est classée dans l'ordre chronologique. ( ) et < > indiquent respectivement l'orientation du substrat et la direction des contraintes uniaxiales appliquées.

	Méthode	Dimension	Structure de bande	Structure	Contraintes	Confrontation simu. / exp.
Basu et al. [42] (1992)	Eq. Boltzmann linéarisée	2Dk	masses effectives +Poisson	Couche d'inversion croissance (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	oui
Stern et al. [43] (1992)	Eq. Boltzmann linéarisée	2Dk	masses effectives +Poisson	Couche d'inversion croissance (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	oui
Miyata et al. [51] (1993)	Monte Carlo d'ensemble	3Dk	masses effectives	Matériau massif croissance (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	non
Fischetti et al. [23] (1996)	Monte Carlo d'ensemble	3Dk	EPM	Matériau massif croissance (001)	Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub> / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	oui
Fischetti et al. [48] (2002)	Kubo-Greenwood	2Dk	masses effectives (ellipsoïdes non-paraboliques) +Poisson	Couche d'inversion croissance (001) Transport <100>	Biaxiale Si / Si <sub>0.75</sub> Ge <sub>0.25</sub>	oui
Bufler et al. [44] (2003)	Monte Carlo à flux incident	3Dk	EPM	nMOSFET planaire substrat (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	oui
Jungemann et al. [25][45] (2003-2004)	Monte Carlo d'ensemble	3Dk	EPM	nMOSFET planaire substrat (001)	Si / Si <sub>1-y</sub> Ge <sub>y</sub>	non
Uchida et al. [46] (2005)	Eq. Boltzmann linéarisée	2Dk	masses effectives (EPM) +Poisson	Couche d'inversion substrat (001) Transport <110> et <100>	-Biaxiale -Uniaxiale <110> et <100>	oui
Ponton et al. [49] (2006)	Monte Carlo multi sous-bandes	2Dk	Poisson-Schrödinger	1-nMOSFET planaire 2-nMOSFET Double-grille (différents Tox)	Biaxiale (SiGe, 20% Ge)	oui
Ungersboeck et al. [47] (2007)	Monte Carlo	3Dk et 2Dk	3D: EPM 2D: masses effectives (EPM) +Poisson	Matériau massif et couche d'inversion substrat (001)	-Uniaxiale <110> et <100>	oui
Comparone et al. [50] (2008)	Monte Carlo multi sous-bandes	2Dk	Poisson-Schrödinger	1-nMOSFET planaire 2-nMOSFET Double-grille (Tox 4nm)	1-Biaxiale, Uniaxiale <110> et <100> 2-Uniaxiale <110> et <100>	oui



### I.3.2. Remarques générales

#### - Architecture des dispositifs et choix de la simulation de transport

Le choix de la méthode dans la résolution des propriétés de transport va dépendre de la structure du dispositif. La modélisation des propriétés de transport dans les architectures MOSFETs sous contrainte se réalise à l'aide de l'approche Monte Carlo. En revanche, les effets de confinement sont actuellement encore peu pris en compte dans les simulations évoluées des dispositifs MOSFETs (notamment en raison de la complexité des algorithmes mise en oeuvre). Les effets de confinement sont généralement réalisés dans des couches d'inversion à l'aide de formules semi-analytiques, dérivées de l'équation de Boltzmann, comme par exemple la formule de Kubo-Greenwood. Les simulations des couches d'inversion à l'aide de la formule de Kubo-Greenwood ne sont pas exécutées de manière pleinement auto-cohérente entre le calcul des structures de bandes et l'équation de Poisson, à la notable exception de Pham et al. [37][38][39]. Cette approche, bien que contraignante dans le développement d'algorithmes, constitue une avancée relativement forte dans l'étude des propriétés de transport des transistors pMOSFETs sous contraintes.

Par ailleurs, remarquons les travaux [41][49][52] effectués à l'aide d'un Monte Carlo multi sous-bandes tenant compte d'un couplage avec l'équation de Schrödinger dans la direction transverse au canal. Particulièrement dans le cadre de l'étude des transistors pMOSFETs, De Michielis et al. [41] calibre les masses de confinement à l'aide du  $k.p$  6 bandes. Les relations de dispersion dans le plan du transport sont obtenues à partir d'un modèle, analytique non-parabolique et anisotropique, paramétré sur les résultats de la méthode  $k.p$  6 bandes. L'étude de l'impact des contraintes sur les caractéristiques électriques des transistors nMOSFETs a également été effectuée par l'approche Monte-Carlo multi sous-bandes [49][50]. Dans le cadre de la modélisation des propriétés de transport 2Dk dans une couche d'inversion d'une structure nMOSFET par la formule de Kubo-Greenwood, Uchida et al. présentent une bonne adéquation entre les simulations de transport et des mesures expérimentales à fort champ effectif [46]. Il est à remarquer que leurs modélisations ne prennent pas en compte les interactions de rugosité de surface. Or, la détermination précise de l'influence de la contrainte dans les interactions de rugosité de surface est particulièrement sujet de discussions dans la modélisation des transistors nMOSFETs tenant compte des effets de confinement [48][49][50].

Récemment, les effets de contraintes appliqués sur un dispositif pMOSFET double grille ont été étudiés à l'aide de simulations 2Dk Boltzmann déterministes basées sur des harmoniques sphériques [40]. Ces dernières simulations présentent un excellent compromis précision / temps de calcul.

#### - Influence de la structure de bandes

Il est notable des Tableau I.2 et Tableau I.3 que plusieurs méthodes de calculs de structures de bandes sont utilisées dans les simulations Monte Carlo. Toutefois, aucune étude ne compare les résultats de simulations Monte Carlo incluant des structures de bandes issues de différentes méthodes de calcul.

Par ailleurs, une première étude approfondie de l'impact des effets de confinement sur les performances des dispositifs pMOSFETs sous contrainte a été effectuée par E. X. Wang [33]. Dans ce travail, les propriétés de transport sont analysées à partir des structures de bandes des matériaux massifs (3D) et des matériaux confinés (2D). Toutefois, le couplage entre les effets de contrainte et de confinement n'a pas été caractérisé et quantifié à partir des structures de bandes 2D. Or, l'influence de ce couplage est particulièrement notable dans les dispositifs sous contraintes uniaxiales.

Enfin, les contraintes de cisaillement induisent une brisure de symétrie importante dans le cristal. Des modifications sont apportées aux vallées de conduction. Des levées de dégénérescence ainsi qu'une modification des courbures de bande apparaissent sous contrainte de cisaillement.

L'observation de la variation de masse de courbure résultante [46][47][53] a conduit, au cours de cette thèse, à l'étude de son influence sur les propriétés de transport .

- Longueur de grille et régime de transport

L'évolution de la variation des courants en fonction des dimensions caractéristiques des dispositifs sous contrainte est une donnée cruciale dans la conception des feuilles de route des industriels du semi-conducteur. Pourtant, peu d'études ont été réalisées dans ce domaine [24][44][45]. Il est à noter que Ponton et al. [49] ont modélisé l'impact de la contrainte sur les courants de saturation ( $I_{on}$ ) dans les structures nMOSFETs planaires et double-grille à canaux ultra-courts ( $L_g = 25$  nm) à l'aide de simulations Monte Carlo multi sous-bandes tenant compte des effets de confinement. Dans ces travaux, la répartition des différentes contributions au transport est obtenue dans les différentes structures nMOSFETs. La modélisation de l'interaction de la rugosité de surface en fonction de la contrainte est notamment discutée. En conclusion de ces travaux, la diminution des variations de courant en fonction de la contrainte est également attendue à mesure d'une réduction des dimensions des transistors MOSFETs.

Par ailleurs, seuls les travaux de Jungemann montrent l'influence du régime de transport [45] sur les variations de courant ( $I_{lin}$ ,  $I_{on}$ ) des dispositifs sous contrainte. Cependant, ces dernières simulations sont exécutées en tenant compte d'un gaz d'électrons 3Dk.

- Simulations vs. expériences:

Une proportion non négligeable d'études théoriques analysant l'impact des contraintes sur les caractéristiques électriques des MOSFETs a été menée sans confrontation avec des expériences (nMOS [45][51], pMOS [22][28][29]). Les variations de courant de MOSFETs en fonction de la contrainte sont usuellement reportés dans la littérature par l'ajustement des coefficients du modèle piezorésistance aux mesures. Cependant, aucune comparaison quantitative n'a été effectuée entre des coefficients de piezorésistance extraits des mesures et ceux issus des résultats théoriques.

Par ailleurs, la confrontation des études théoriques aux mesures ont principalement été menées sur des contraintes longitudinales et transverses pour des directions de canal  $\langle 110 \rangle$  (pMOS: [33][30][32][38]; nMOS: [46][47]). Thompson et al. [32] ont été les premiers à proposer une étude expérimentale complète des coefficients de piezorésistance de MOSFETs orientés  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Toutefois, les coefficients piezorésistifs des MOSFETs pour les deux orientations de canal ont été traités indépendamment.

Remarquons également que Pham et al. [38] ont récemment étudié l'influence de contraintes longitudinales arbitraires dans les couches d'inversion des pMOSFETs pour trois orientations de substrat (001) (110) et (111). Les simulations réalisées dans ces travaux sont confrontées à un large panel de données expérimentales couvrant un grand nombre de dispositifs électroniques alternatifs au "classique" MOSFET planaire.

### **I.3.3. Objectifs de thèse**

L'exécution de cette thèse s'est effectuée dans un souci constant d'intégrer les connaissances des effets quantiques et de contrainte. Par ailleurs, cette thèse a aussi consisté au développement d'outils et de techniques propres à l'étude de ces effets dans le but d'être intégrés à l'organisation opérationnelle de la modélisation des transistors MOSFETs au sein de l'équipe TCAD (*Technology Computer-Aided Design*).

Dans le contexte mentionné en Sections I.3.1. et I.3.2., les objectifs de cette thèse ont été de:

- Développer des modèles semi-empiriques de calculs de structures de bandes intégrant les effets de contrainte et de confinement<sup>5</sup>. Ces modèles seront confrontés aux résultats des calculs évolués *ab initio*. Notons que les propriétés électrostatiques et de transport des dispositifs sont fortement liées à la structure électronique des matériaux utilisés. Un accent particulier sera porté sur l'apparition de couplages entre les effets de contrainte et de confinement.

- Développer et utiliser des méthodes de calcul des propriétés de transport (Kubo-Greenwood et Monte Carlo), intégrant les structures de bandes préalablement calculées.

- Valider les approches Monte Carlo et Kubo-Greenwood dans le cadre d'une modélisation de référence des propriétés de transport dans les dispositifs MOSFETs sous contrainte. Les simulations ont été réalisées sur des transistors à canal ultra-court dans l'optique d'une réduction des dimensions caractéristiques de ces dispositifs. De plus, l'influence du régime de transport sur les performances des dispositifs a été étudié. Par ailleurs, l'influence du couplage entre les effets de contrainte et de confinement a été particulièrement étudié dans les couches d'inversion de gaz 2Dk de trous.

- Confronter les résultats des méthodes développées aux mesures de courants de drain de MOSFETs effectuées durant cette thèse. Cette approche a permis de valider les stratégies de modélisation mises en place.

- Comparer les résultats des modèles développés durant cette thèse, à ceux obtenus des modèles couramment utilisés dans l'équipe TCAD. Ainsi, une attention particulière a été portée dans l'étude des domaines de validité des modèles physiques les plus couramment utilisés dans l'industrie. Par exemple, un ensemble cohérent de coefficients du modèle piezorésistance, utilisé en TCAD, est proposé à l'issue de cette confrontation entre les expériences et les simulations.

Les résultats de ce manuscrit doivent constituer un ensemble de simulations de référence dans les procédures d'ajustement des modèles de mobilité sous contrainte des simulateurs TCAD de dispositifs.

### **I.3.4. Stratégie de modélisation adoptée durant cette thèse**

La finesse de la physique et l'ensemble des outils mathématiques, inclus dans la modélisation vont dépendre de la précision voulue ainsi que du temps souhaité de calcul. Ainsi, la modélisation d'un matériau, d'une zone de transistor, de l'intégralité d'un transistor, ou encore la modélisation d'un circuit ne requièrent pas les mêmes outils numériques et les mêmes connaissances physiques. En effet, les phénomènes physiques à prendre en compte ne sont pas les mêmes en fonction de l'échelle étudiée.

La stratégie de modélisation adoptée durant cette thèse s'inscrit dans une approche multi-échelle / multi-physique, illustrée en Figure I.6. Les structures de bandes sont des propriétés physiques fondamentales associées aux matériaux. Les simulateurs les plus évolués de calculs de propriétés de transport, nécessitent la description des structures de bandes des matériaux composant le dispositif modélisé. La démarche de modélisation, tant dans le calcul des structures de bandes que dans celui des propriétés de transport, consiste à ajuster les modèles les simples (mais aussi les plus rapides) aux modèles les plus prédictifs (mais aussi les plus complexes et donc coûteux en terme de temps de calculs):

---

<sup>5</sup>Par exemple, la tension de seuil (Eq-I.1) est directement liée aux structures de bandes des matériaux constituant la capacité MOS [54].

- Dans le cadre des calculs de structures de bandes, les simulations *ab initio* vont servir de références dans l'ajustement des modèles semi-empiriques EPM,  $k.p$ , plus rapides qui permettent en quelques secondes d'évaluer l'intégralité de la structure électronique.
- En ce qui concerne les calculs des propriétés de transport, les résultats de ce manuscrit s'insèrent dans une stratégie d'ajustement des méthodes utilisées en TCAD. Cette approche consiste à déterminer les paramètres des simulations Dérive-Diffusion (dont les temps de calcul sont rapides) à partir de solutions plus évoluées (mais aussi plus coûteuses en terme de temps de calcul).

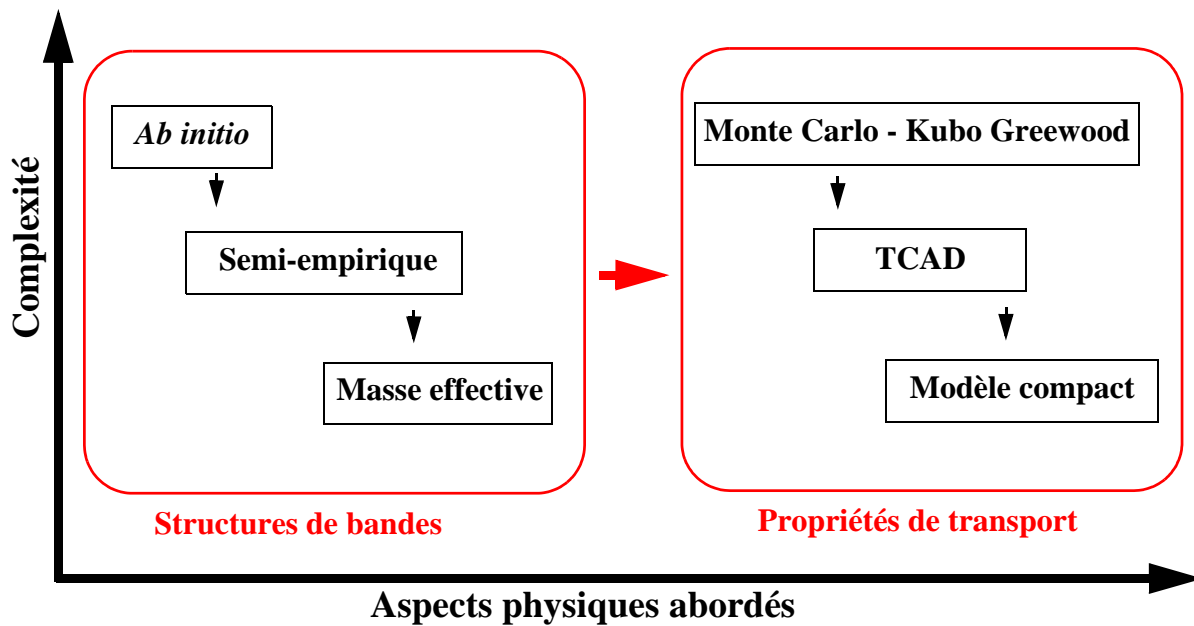


Figure I.6: Approche multi-physique / multi-échelle adoptée durant cette thèse dans la perspective de l'étude des propriétés de transport dans les transistors MOSFETs sous contrainte.

## I.4. Outils de simulations numériques du transport de charges

Nous détaillons dans cette section, les outils de simulations utilisés ou développés durant cette thèse dans le cadre de l'étude des propriétés de transport dans les MOSFETs sous contrainte. L'utilisation et le développement de ces outils s'insèrent dans la stratégie de modélisation mentionnée en Section I.3.4.

Dans une première section, nous introduisons les concepts fondamentaux du transport de charge à partir du développement de l'équation de Boltzmann. Par la suite, nous détaillons les méthodes numériques qui ont été utilisées durant cette thèse dans le calcul des propriétés de transport: les méthodes Dérive-Diffusion, Monte Carlo et Kubo-Greenwood.

### I.4.1. Equation du transport de Boltzmann

L'équation de Boltzmann joue un rôle dans la compréhension théorique des "phénomènes de transport", c'est à dire de la réponse d'un système maintenu dans des conditions extérieures de déséquilibre (différence de potentiel, de température, de concentration ou vitesse, imposées entre deux points). Son développement est particulièrement bien détaillé dans [55].

### 1.4.1.1. Formulation de l'équation maîtresse du transport

Cette équation permet de caractériser l'état macroscopique du gaz par la *fonction de distribution*  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ . Cette fonction est définie à l'instant  $t$ , de telle sorte que  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)d^n r d^m k$  donne la probabilité d'avoir une particule qui se trouve dans le volume  $d^n r$  autour du point  $\vec{r}$ , et qui possède le vecteur d'onde  $\vec{k}$  à  $d^m k$  près.  $n$  et  $m$  correspondent respectivement aux dimensions des espaces réels et des vecteurs d'onde.

Cette fonction caractérise la répartition des particules dans l'espace des phases de dimension  $n \times m$ . A l'équilibre thermodynamique, cette fonction se résume à la fonction de Fermi-Dirac. La connaissance de la fonction de distribution permet d'accéder à toutes les grandeurs macroscopiques caractéristiques du système. Par exemple, en trois dimensions:

- La concentration des particules  $n(\vec{r}, t)$

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \int g(\vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3 k \quad \text{Eq-I.9}$$

- La densité de courant  $J(\vec{r}, t)$

$$J(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \int q \cdot v(\vec{k}) \cdot g(\vec{k}) \cdot f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3 k \quad \text{Eq-I.10}$$

- L'énergie du gaz électronique  $w(\vec{r}, t)$  en fonction de l'énergie des particules  $E(\vec{k})$ <sup>6</sup> dans l'espace réciproque:

$$W(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \int E(\vec{k}) \cdot g(\vec{k}) \cdot f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3 k \quad \text{Eq-I.11}$$

où  $g(\vec{k})$  est la densité d'états et  $v(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$  est la vitesse de groupe.

L'équation de Boltzmann se démontre en faisant le bilan sur un domaine infinitésimal<sup>7</sup> des variations temporelles des particules qui se meuvent dans l'espace des phases sous l'action d'une force extérieure. Le bilan doit respecter les lois de conservation:

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}(\vec{r})}{\hbar} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right] f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} + s(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad \text{Eq-I.12}$$

où  $\vec{v}(\vec{k})$  est la vitesse de groupe,

$\vec{F} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \vec{p}}{\partial t}$  est la force appliquée,

$s$  est le taux net de génération / recombinaison de paire électron-trou par unité de temps,

$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$  représente l'intégrale de collision.

Le premier terme de l'Eq-I.12 correspond à la variation de  $f$  en fonction du temps. Le second terme prend en compte les variations dues au gradient de concentration de particules. Le troisième

<sup>6</sup>. voir chapitre II concernant le calcul de structures de bandes.

<sup>7</sup>.Domaine infinitésimal tel que les fluctuations des grandeurs physiques à l'échelle macroscopique soient négligeables.

terme correspond à l'effet d'une force appliquée (électrique, par exemple) sur les particules. L'intégrale de collision correspond à l'influence des interactions des particules avec la matière sur  $f$ .

Le premier membre de l'équation Eq-I.12 ne fait appel à aucune approximation. L'intégrale de collision dans le second membre de l'équation est, par contre, généralement calculée de façon approchée. A un moment donné  $t$ , la variation de la fonction de distribution  $f$ , due aux interactions des particules situées en  $\vec{k}$  avec la matière, est la somme des probabilités d'interaction de l'état  $\vec{k}$  à l'état  $\vec{k}'$  moins la somme des probabilités pour qu'il passe d'un état  $\vec{k}$  à l'état  $\vec{k}'$ :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \int_{\vec{k} \neq \vec{k}'} \{S(\vec{k}, \vec{k}')f(\vec{k})[1-f(\vec{k}')] - S(\vec{k}', \vec{k})f(\vec{k}')[1-f(\vec{k})]\} dk' \quad \text{Eq-I.13}$$

où  $S(\vec{k}, \vec{k}')$  est la densité de probabilité de passage par unité de temps d'un état initial  $\vec{k}$  à l'état final  $\vec{k}'$ ,  $f(\vec{k})$  représente la fonction de distribution en  $\vec{k}$ .

Les termes  $S(\vec{k}, \vec{k}')$  se calculent à partir de la règle de Fermi:

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{h} |M(\vec{k}, \vec{k}')|^2 g(\vec{k}') \delta(E(\vec{k}) - E(\vec{k}')) \quad \text{Eq-I.14}$$

avec  $M(\vec{k}, \vec{k}') = \langle \vec{k}' | M | \vec{k} \rangle = \int (\psi^*(r, \vec{k}') M \cdot \psi(r, \vec{k}) dr)$

$E(\vec{k})$  est l'énergie de dispersion,  $\psi(r, \vec{k})$  est la fonction d'onde de la particule,  $g(k)$  est la densité d'états,  $M$  est l'Hamiltonien perturbatif des interactions de la particule avec la matière.

#### I.4.1.2. Mécanismes d'interaction

Les principaux mécanismes d'interactions que peut subir un porteur lors de son transport vont se traduire par diverses expressions d'intégrale de collision (Eq-I.13). Notamment, ces intégrales vont se traiter par un couplage avec un potentiel de déformation [56]. Les principaux mécanismes sont les suivants:

- Collisions avec les phonons: Les phonons correspondent aux vibrations du réseau cristallin. En effet, l'excitation thermique va perturber l'arrangement périodique des noyaux qui vont osciller autour de leur position d'équilibre. L'électron ne peut plus être décrit par un état de Bloch; l'interaction va conduire à un nouvel état du porteur [57]. A faible énergie, les interactions avec les phonons acoustiques dominent. A plus forte énergie, les électrons se transfèrent d'une vallée à une autre à l'aide de phonons optiques selon les processus f (entre les vallées perpendiculaires) et g (entre vallées transverses). Des interactions équivalentes existent pour les trous [56]. L'interaction des porteurs avec les phonons diminue avec la température.
- Collision avec les impuretés ionisées: Ces interactions sont induites par les charges fixes comme les impuretés dans le canal. De telles charges représentent des irrégularités dans le réseau cristallin et agissent sur les porteurs comme des centres diffuseurs localisés. Du fait que la masse du centre diffuseur est largement supérieure à celle du porteur de charge, la collision d'un porteur avec ce centre est généralement considérée comme élastique. Ces collisions sont prédominantes à faible champ (l'influence de l'effet coulombien diminue avec l'accroissement de la vitesse du porteur).
- La rugosité de surface ou fluctuation géométrique de l'interface oxyde/Si dans les dispositifs MOSFETs. Ces interactions sont indépendantes de la température et deviennent d'autant plus importantes que le champ électrique transverse devient élevé.

<sup>8</sup>Pour un semi-conducteur non-dégénéré, il ya une forte probabilité pour que les états  $f(\vec{k})$  soient faiblement occupés. Par conséquent, il est habituel de réduire les termes  $[1-f(\vec{k})]$  à l'unité, notamment dans l'approche Monte Carlo (Section I.4.3.).

### I.4.1.3. Domaine de validité de l'équation de transport de Boltzmann

Pour une utilisation adéquate de la méthode, il convient de définir son domaine de validité. Le système étudié doit avoir des dimensions suffisamment grandes devant la longueur d'onde des particules dont les aspects ondulatoires deviennent alors négligeables. De fait, les particules sont considérées comme des objets ponctuels dont la position et l'impulsion sont précisément définies à tout instant. Ces particules sont soumises aux lois semi-classiques du mouvement. Le traitement quantique de l'équation n'intervient que par le biais de la structure de bandes ainsi que dans le calcul de l'intégrale de collision.

Le calcul de l'intégrale de collision dans l'équation de Boltzmann nécessite plusieurs hypothèses et approximations. Nous considérons seulement les collisions binaires; celles qui font intervenir plus de deux particules sont négligées. Plus précisément, deux particules n'entrent en collision que si elles se trouvent au même point  $\vec{r}$  et au même instant dans le système. Enfin, l'hypothèse du "chaos moléculaire" permet de négliger les corrélations entre les deux particules qui entrent en collision. Pour cela, la distance parcourue par une particule entre deux collisions doit être suffisamment grande devant la portée des forces d'interaction des centres diffuseurs.

La description des propriétés de transport dans les dispositifs dont les grandeurs caractéristiques sont inférieures à la longueur de cohérence de phase des électrons dépasse le domaine de validité de l'équation de transport de Boltzmann. Des approches plus complexes permettent de prendre en compte les aspects de cohérence quantique dans les propriétés de transport. Les simulateurs associés sont développés sur la base des fonctions de Green [58] et de Wigner [59]. Notons également que des corrections quantiques peuvent être intégrées aux simulations semi-classique des Monte Carlo [60].

## I.4.2. La simulation de Dérive-Diffusion

L'équation de Boltzmann est particulièrement complexe à résoudre dans son intégralité. En outre, la modélisation des dispositifs électroniques ne nécessite généralement pas une description détaillée des mécanismes microscopiques du transport. De fait, des modèles ont été élaborés en tenant compte d'approximations sur certains termes de l'équation de Boltzmann. Ces modèles permettent une souplesse d'utilisation ainsi qu'une réduction de temps de calcul significative.

Nous rappelons succinctement, dans ce paragraphe, les modèles de Dérive-Diffusion qui peuvent être déduits de l'équation de Boltzmann par la méthode des moments (voir ANNEXE I.A). Puis, nous détaillerons les modèles de Masetti et Canali étendu, associés respectivement à la mobilité à faible champ et à la saturation à fort champ. Enfin, les effets de contrainte sur la mobilité des porteurs de charge est généralement prise en compte dans les simulations Dérive-Diffusion par le modèle de piézorésistance. Nous aborderons succinctement les principaux aspects de ce modèle.

### I.4.2.1. Théorie du modèle de Dérive-Diffusion

Le modèle de Dérive-Diffusion s'exprime par les équations suivantes (voir ANNEXE I.A):

- Les équations de densité de courant  $\vec{J}$  :

$$\vec{J}_n(r, t) = |q|D_n\vec{\nabla}n(r, t) + |q|n(r, t)\mu_n\vec{E} \quad \text{Eq-I.15}$$

$$\vec{J}_p(r, t) = -|q|D_p\vec{\nabla}p(r, t) + |q|p(r, t)\mu_p\vec{E} \quad \text{Eq-I.16}$$

$$D_n = \frac{kT}{|q|}\mu_n, \quad D_p = \frac{kT}{|q|}\mu_p \quad \text{Eq-I.17}$$

Les indices  $n$  et  $p$  sont respectivement associés aux électrons et trous.  $D$  représente le

coefficient de diffusion.  $\mu$  correspond à la mobilité. La mobilité effective  $\mu$  lie la vitesse de dérive  $v_d$ , qui correspond à la vitesse moyenne des porteurs de charge, avec le champ électrique  $E$ :  $v_d = \mu E$ . Dans les expressions du modèle de Dérive-Diffusion elle se rattache au modèle de Drude (Eq-I.5).

- Les équations de continuité:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(r, t) - \frac{1}{|q|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{n-s_n}(r, t) = 0 \quad \text{Eq-I.18}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(r, t) + \frac{1}{|q|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{p-s_p}(r, t) = 0 \quad \text{Eq-I.19}$$

Les indices  $n$  et  $p$  sont respectivement associés aux électrons et trous.  $n(r, t)$  et  $p(r, t)$  représentent la densité des électrons et des trous.  $s(r, t)$  est liée aux taux de génération et recombinaison de paires électron-trou.

L'ensemble des équations Eq-I.15, Eq-I.16, Eq-I.18 et Eq-I.19 est couplé à l'équation de Poisson:

$$\nabla(\epsilon_r |\vec{E}|) = |q|(p(r, t) - n(r, t) + N_d - N_a) \quad \text{Eq-I.20}$$

Les méthodes de Dérive-Diffusion décrivent les propriétés de transport dans des conditions proches de l'équilibre<sup>9</sup>. En effet, on peut démontrer que, dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation (ANNEXE I.A), la fonction de distribution est similaire à celle de l'équilibre thermodynamique mais translatée de  $q\tau_m E$  dans la direction opposée au champ. Cette condition n'est donc valide qu'à faible champ. Cette méthode n'est donc pas adaptée à la simulation de dispositifs électroniques dans des conditions de transport fortement hors-équilibre. Or, le fonctionnement opérationnel des dispositifs nanométriques est particulièrement influencé par ces phénomènes hors-équilibre qui ne peuvent se décrire que par une résolution exacte de l'équation de Boltzmann.

Toutefois, dans le cadre des transistors à canaux ultra-courts dans un régime à fort champ (chapitre III, Section Eq-III.2.3.2.), les simulations Dérive-Diffusion doivent présenter des courants en cohérence avec ceux résultant des modèles avancés de transport. En effet, le courant de drain calculé par un modèle balistique<sup>10</sup> peut s'approximer de la manière suivante:

$$I = Qv_{therm} \quad \text{Eq-I.21}$$

$Q$  dénote la charge du système.  $v_{therm}$  correspond à la vitesse thermique des porteurs.

D'autre part, le courant de drain dans le régime de saturation<sup>11</sup> s'assimile à l'expression suivante:

$$I = Qv_{sat} \quad \text{Eq-I.22}$$

$Q$  dénote la charge du système.  $v_{sat}$  correspond à la vitesse de saturation des porteurs.

Or, les valeurs des vitesses  $v_{therm}$  et  $v_{sat}$  dans le silicium sont équivalentes. Ainsi la similitude entre les solutions des équations Eq-I.21 et Eq-I.22 tend à démontrer une estimation qualitativement correcte des simulations de Dérive-Diffusion dans les régimes de transport à fort champ.

Par ailleurs, la souplesse d'utilisation du modèle de Dérive-Diffusion permet de moduler les phénomènes de transport hors-équilibre via un réajustement approprié des paramètres du modèle de mobilité.

<sup>9</sup>Remarquons que des modèles plus évolués de transport peuvent être dérivés à partir des moments supérieurs de l'équation de Boltzmann. Par exemple, le modèle hydrodynamique est développé sur la base des trois premiers moments de l'équation de Boltzmann.

<sup>10</sup>Le transport quasi-balistique est notamment présent dans les transistors MOSFETs à canaux ultra-courts [61].

<sup>11</sup>Dans un régime de transport à fort champ.



Dans cette thèse, nous avons utilisé les modèles de Dérive-Diffusion dans le cadre de l'étude du transport hors-équilibre dans les MOSFETs à canal ultra-court. Etant donné que les modèles de Dérive-Diffusion sont particulièrement adaptés à la description des propriétés de transport à l'équilibre, ceux-ci nous servent de point de comparaison pour discriminer les effets de transport hors-équilibre dans les nanodispositifs.

#### 1.4.2.2. Modèle de mobilité utilisé à STMicroelectronics

La mobilité est une donnée essentielle dans le calcul du modèle de Dérive-Diffusion. Elle se calcule via des expressions analytiques basées sur des considérations semi-empiriques. Les coefficients d'ajustement sont calibrés à l'aide d'expériences ou de simulations basées sur des modèles avancés de transport (Monte Carlo, Kubo-Greenwood).

Dans nos simulations de Dérive-Diffusion, nous avons utilisé le modèle de Masetti [62], qui modélise la réduction de la mobilité en fonction de l'augmentation de la concentration des porteurs de charge:

$$\mu_0 = \mu_{min1} \exp\left(-\frac{P_c}{N_{tot}}\right) + \frac{\mu_{const} - \mu_{min2}}{1 + (N_{tot}/C_r)^\alpha} - \frac{\mu_1}{1 + (C_s/N_{tot})^\beta} \quad \text{Eq-I.23}$$

$\mu_{min1}$ ,  $\mu_{min2}$  et  $\mu_1$  représentent les mobilités de référence,  $P_c$ ,  $C_r$  et  $C_s$  les concentrations de dopage.  $\alpha$  et  $\beta$  sont des coefficients d'ajustement. Les valeurs de ces coefficients, pour les électrons et les trous, sont reportées en Tableau I.4.

**Tableau I.4:** Coefficients utilisés dans le modèle de mobilité de Masetti [62].

Symbole	Electrons	Trous	Unités
$\mu_{min1}$	52.2	44.9	cm <sup>2</sup> /Vs
$\mu_{min2}$	52.2	0	cm <sup>2</sup> /Vs
$\mu_1$	43.4	29.0	cm <sup>2</sup> /Vs
$P_c$	0	$9.23 \cdot 10^{16}$	cm <sup>-3</sup>
$C_r$	$9.68 \cdot 10^{16}$	$2.23 \cdot 10^{17}$	cm <sup>-3</sup>
$C_s$	$3.34 \cdot 10^{20}$	$6.10 \cdot 10^{20}$	cm <sup>-3</sup>

Par ailleurs, dans les dispositifs MOSFETs, la dégradation de la mobilité par l'interface Si/oxyde est prise en compte dans nos simulations Dérive-Diffusion, par le modèle renforcé de Lombardi [63].

#### 1.4.2.3. Modèle de saturation à fort champ utilisé à STMicroélectonics

A fort champ, la vitesse de dérive des porteurs de charge n'est plus proportionnelle au champ électrique  $\vec{E}$ . De fait, elle sature à une valeur finie de vitesse. Dans nos simulations Dérive-Diffusion, nous avons utilisé le modèle étendu de Canali. Dans ce modèle, l'effet de saturation se modélise par la modulation de la mobilité à faible champ par un ratio entre la vitesse de saturation  $v_{sat}$  et un champ conducteur  $E_{hfs}$ , comme suit:

$$\mu(E) = \frac{\mu_0}{\left[1 + \left(\frac{\mu_0 E_{hfs}}{v_{sat}}\right)^\beta\right]^{1/\beta}} \quad \text{Eq-I.24}$$

$\mu_0$  dénote la mobilité à faible champ (Eq-I.23). La vitesse de saturation est dépendante de la température,  $T$  [K], telle que  $v_{sat} = v_{sat,0} \cdot \left(\frac{300[K]}{T}\right)^{v_{sat,exp}}$ . Il est à noter que la vitesse  $v_{sat,0}$  est tirée des expériences à température ambiante [64][65]. Le champ conducteur  $E_{hfs}$  choisi est la composante du champ électrique parallèle au courant des porteurs de charge  $\vec{J}$ , telle que  $E_{hfs} = \vec{E} \cdot \frac{\vec{J}}{J}$ .  $\beta$  est un paramètre lié à la dépendance en température, tel que  $\beta = \beta_0 \left(\frac{T}{300[K]}\right)^{\beta_{exp}}$ . Les valeurs de ces coefficients sont reportées en Tableau I.5.

**Tableau I.5:** Coefficients utilisés dans le modèle de saturation à fort champ du modèle étendu de Canali [64].

Symbole	Electrons	Trous	Unités
$v_{sat,0}$	$1.07 \cdot 10^7$	$8.37 \cdot 10^6$	cm/s
$v_{sat,exp}$	0.87	0.52	1
$\beta_0$	1.109	1.213	1
$\beta_{exp}$	0.66	0.17	1

#### 1.4.2.4. Modélisation des effets quantiques

Les charges d'inversion dans un dispositif MOSFETs sont fortement influencées par le potentiel de grille. Or, les forts gradients de potentiel confinent les charges à proximité de l'oxyde de grille par le potentiel de grille. Sous ces conditions de polarisation, la nature ondulatoire des porteurs de charge dicte leur probabilité de présence dans la couche d'inversion. La principale conséquence est l'éloignement du barycentre des charges d'inversion de l'interface Si/oxyde, laissant un espace quasiment vide de charge à l'interface Si/oxyde.

Nous exposons ci-dessous deux approches qui permettent de modéliser le déplacement du barycentre des porteurs de charge à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>:

- Le modèle du  $T_{ox}$  prend en compte une variation effective de l'épaisseur d'oxyde, telle que  $\Delta T_{ox,eff} = T_{ox} + \Delta T_{ox}$  [4][54][66].
- Le modèle plus complexe de Densité Gradient tient compte d'une énergie potentielle  $\Lambda$  supplémentaire dans l'expression de la densité des porteurs de charge  $n$  [67][68][69].

Nous nous sommes particulièrement servis du modèle du  $T_{ox}$  effectif pour prendre en compte les effets de confinement dans les dispositifs MOSFETs simulés.

##### 1.4.2.4.1. Modèle du $T_{ox}$ effectif

L'espace vide de charge, dû aux effets quantiques, est associé à une région du canal jouxtant l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. L'épaisseur d'oxyde  $T_{ox}$  ajoutée est alors équivalente à la largeur de la région considérée. D'après l'équation Eq-I.1, cette augmentation d'épaisseur d'oxyde induit une variation de la tension de seuil  $V_{th}$  qui s'exprime au premier ordre comme suit [54]:

$$\Delta V_{th} = \left( \frac{\partial}{\partial T_{ox}} V_{th} \right) = 2\phi_f + \sqrt{\frac{2q\epsilon_{Si}N_{ch}\phi_f}{\epsilon_{ox}}} \cdot \Delta T_{ox} \quad \text{Eq-I.25}$$

$\phi_f$  est le potentiel de Fermi,  $\epsilon_{Si}$  et  $\epsilon_{ox}$  sont respectivement les constantes diélectriques du Silicium et de l'oxyde.  $N_{ch}$  est la concentration d'impuretés dans le canal.

Dans le cadre de nos simulations Dérive-Diffusion, l'impact des effets quantiques ont été déduits de l'estimation du décalage approprié de la tension de seuil  $\Delta V_{th}$ <sup>12</sup>.

1.4.2.4.2. Modèle de Densité Gradient

Ce modèle est issu de la méthode des moments appliquée à l'équation de Wigner [70]. La fonction de Wigner est définie par la transformée de Fourier du produit de fonctions d'onde en deux points de l'espace:

$$f_W(r, k, t) = \frac{1}{\pi^3} \int \psi(r-r', t) \psi^*(r-r', t) \exp(i2r'k) dr' \tag{Eq-I.26}$$

De l'équation de transport de Wigner<sup>13</sup>, les modèles de Dérive-Diffusion quantiques sont obtenus en utilisant la méthode des moments:

- la densité des porteurs de charge,

$$n(r, t) = N_c \exp\left(\frac{E_f - E_c - \Lambda_n}{kT}\right) \tag{Eq-I.27}$$

- la densité de courant,

$$\vec{J}_n(r, t) = -\mu_n kT \vec{\nabla} n - \mu_n n \vec{\nabla} (E_c - kT \ln N_c - \Lambda_n) \tag{Eq-I.28}$$

où l'expression de l'énergie potentielle  $\Lambda_n$  est la suivante:

$$\Lambda_n = -\frac{\gamma \hbar^2}{12m^*} \left( \Delta(\ln n) + \frac{1}{2} (\nabla \ln n)^2 \right) = -\frac{\gamma \hbar^2}{6m^*} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \tag{Eq-I.29}$$

$E_f$  correspond à l'énergie de Fermi,  $E_c$  est l'énergie des vallées de conduction.  $N_c$  est la densité d'états effective des électrons. Les quantités analogues  $\Lambda_p, E_v, N_v$  sont aussi introduites pour les trous. L'énergie potentielle  $\Lambda_n$  et  $\gamma$  sont les facteurs de correction quantique.

L'expression de la densité des porteurs de charge (Eq-I.27) dans le modèle Densité-Gradient ne se différencie de l'expression classique que par la présence de l'énergie potentielle  $\Lambda_n$ . L'effet quantique peut ainsi apparaître comme le terme d'une force supplémentaire qui est composée des dérivées d'ordre supérieure du potentiel classique [68].

<sup>12</sup>-La variation effective de l'épaisseur d'oxyde  $\Delta T_{ox}$  peut, par la suite, être calculée du décalage de la tension de seuil  $\Delta V_{th}$  à partir de l'équation Eq-I.25.

<sup>13</sup>-L'équation de Wigner est dérivée de l'équation fondamental de Liouville Von Neumann, tel que dans le cas d'un confinement 2D:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_W(x, k, t) + \frac{\hbar k}{m^*} \nabla_x \cdot f_W(x, k, t) - \theta(f_W(x, k, t)) = \left. \frac{\partial}{\partial t} f_W(x, k, t) \right|_{coll}$$

où le terme  $\theta$  est un terme quantique résultant des effets non locaux du potentiel:

$$\theta(\rho(x, k, t)) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int V_W(x, k') f_W(x, k+k', t) dk'$$

avec,

$$V_W(x, k) = \int \left[ E_n\left(x + \frac{1}{2}x'\right) - E_n\left(x - \frac{1}{2}x'\right) \right] dx'$$

$V_W$  est appelée potentiel de Wigner. Ce dernier est calculé à partir des profils des profils d'énergie des sous-bandes  $E_n(x)$  (voir chapitre IV) le long de la direction de transport. Les interactions des porteurs de charge sont prises en compte dans le terme  $\left. \frac{\partial}{\partial t} f_W(x, k, t) \right|_{coll}$ .

### I.4.2.5. Modélisation des effets des contraintes mécaniques

La structure électronique des matériaux est modifiée par l'application d'une contrainte (voir chapitre II). Ainsi, la résistivité du matériau dépend de son état de déformation. On parle d'effet piezorésistif. Dans le cadre du Si et du Ge, ce phénomène a été mis en évidence et formalisé par Smith en 1954 [71]. La piezorésistivité est une propriété anisotrope: l'augmentation ou la diminution de résistivité dépend de l'orientation de la contrainte [6][72].

Le modèle de piezorésistance est couramment utilisé dans les simulateurs Dérive-Diffusion pour sa simplicité d'utilisation et son efficacité. Nous présentons ci-dessous le modèle de piezorésistance. Les notions sur les relations entre les tenseurs de contrainte et déformation, ainsi que la notation adaptée à leur utilisation dans le modèle de piezorésistance, sont rappelées en ANNEXE II.A.

Le modèle de piezorésistivité se base sur la théorie de la réponse linéaire. Elle relie la variation de mobilité  $\frac{\Delta\mu}{\mu}$  au tenseur de contrainte  $\sigma_{vect}$  de façon telle que, pour une structure zinc-blende, nous avons:

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = -\bar{\Pi}\sigma_{vect} \quad \text{où} \quad \bar{\Pi} = \begin{bmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-I.30}$$

$\Pi$  dénote le tenseur de piezorésistivité.

L'effet de piezorésistance s'introduit aisément dans les modèles de Dérive-Diffusion. Par exemple, la composante de dérive de la densité de courant d'électrons (Eq-I.15) sous l'effet d'une contrainte, représentée par le tenseur  $\sigma_{vect}$ , s'exprime par:

$$J_n(r, t) = |q|n(r, t)\mu_n(1 - \bar{\Pi}\sigma_{vect})\vec{E} \quad \text{Eq-I.31}$$

Les valeurs des coefficients  $\pi_{ij}$  dépendent des matériaux étudiés, du dispositif étudié et, enfin, des conditions de polarisation<sup>14</sup>.

Bien qu'un consensus général existe sur la valeur des coefficients de piezorésistance dans les matériaux massifs, leurs valeurs dans les MOSFETs nécessitent une calibration. En effet, les valeurs des coefficients de piezorésistance vont dépendre de la nature du transport dans l'architecture du dispositif MOSFET. La calibration de ces coefficients s'effectue sur des mesures expérimentales, pour des valeurs de contraintes bien déterminées, ou encore sur des résultats de simulations avancées du transport. Cette thèse se propose de calibrer le modèle de piezorésistance par des expériences (Wafer Bending), puis, de valider cette approche par l'analyse de simulations de transport avancées (Monte Carlo, Kubo-Greenwood, ...).

<sup>14</sup>Les coefficients d'élasticité  $c_{ij}$  (ANNEXE II.A) sont également dépendants des matériaux composants le dispositif étudié.

### I.4.3. La méthode Monte Carlo

Le transport, dans des conditions fortement hors-équilibre, nécessite la résolution exacte de l'équation maîtresse de Boltzmann. Ces conditions sont notamment présentes dans les nanodispositifs électroniques à effet de champ. Des outils de simulations spécifiques sont nécessaires pour modéliser ces effets de transport hors-équilibre.

La méthode Monte Carlo est particulièrement adaptée à la résolution de l'équation de Boltzmann. Les simulations Monte Carlo servent de référence dans la calibration des méthodes des moments de l'équation de Boltzmann, plus efficaces en temps de calcul (Dérive-Diffusion, Hydrodynamique, ...).

Nous introduisons brièvement dans cette section le principe de fonctionnement de la méthode Monte Carlo. Nous verrons que la structure de bandes du matériau constituant le canal est une donnée cruciale qui doit être fournie aux simulateurs Monte Carlo. Des informations complémentaires sur le fonctionnement de la méthode sont également reportées en ANNEXE I.B.

#### I.4.3.1. Présentation succincte de la méthode Monte Carlo

Cette méthode consiste à résoudre de manière statistique l'équation de Boltzmann en simulant le comportement des porteurs de charge dans le dispositif, sans aucune approximation macroscopique. Les solutions issues de la méthode Monte Carlo constituent souvent une référence lors du paramétrage des autres simulateurs puisqu'elles restent très proches des phénomènes physiques fondamentaux.

Son fonctionnement est déjà décrit de façon précise et étayée dans la littérature (simulations Monte Carlo dans les matériaux [56], dans les dispositifs électroniques [73][74][75][76][77]). Nous ne reprenons ici que les notions de base servant à la compréhension des simulations Monte Carlo.

La Figure I.7 montre schématiquement l'architecture numérique d'un simulateur Monte Carlo de dispositifs électroniques.

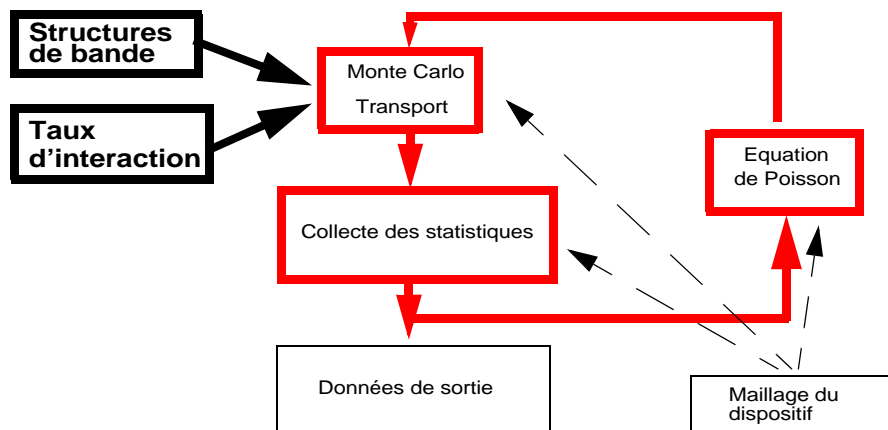


Figure I.7: Structure d'un simulateur Monte Carlo [78].

#### I.4.3.2. Etapes d'une simulation Monte Carlo

Comme illustré en Figure I.7, les trois principales fonctions d'un Monte Carlo de dispositifs électroniques sont les suivantes:

- le transport de particules.
- la collecte de statistiques.
- la résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson.

La simulation du transport par Monte Carlo dans un dispositif électronique s'effectue à l'aide de particules. Le transport des porteurs de charge sur les vols libres est régi par les lois semi-classiques:

$$h \frac{d\vec{k}}{dt} = q\vec{F}$$

Eq-I.32

$$h \frac{d\vec{r}}{dt} = \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

Ces lois déterminent l'évolution temporelle de la position  $\vec{r}$  et du vecteur d'onde  $\vec{k}$  de la particule sous l'action d'une force externe  $\vec{F}$ .  $E(\vec{k})$  correspond à la structure de bandes.

Les interactions entre les particules et leur environnement (phonons, impuretés, ...) sont calculées par l'intégrale de collision (voir Section I.4.1.1.). Après chaque interaction, un vecteur d'onde final est déterminé par le calcul de l'intégrale de collision. Ces interactions se concrétisent dans les simulations Monte Carlo par des interruptions dans les trajectoires des particules dans l'espace réel et réciproque (voir ANNEXE I.B). Ce calcul nécessite la description de la structure de bande.

La résolution de l'équation de Poisson couplée à la répartition des particules dans le système et la collecte des statistiques sont effectués à intervalle régulier en fonction du type de simulation Monte Carlo considéré (Monte Carlo d'ensemble ou à flux incident, voir Section I.4.3.3. ). A chaque intervalle, la valeur du courant dans le système considéré (courant de drain pour les dispositifs MOSFETs) est moyennée sur l'ensemble des itérations prises en compte lors des collectes de statistiques (voir ANNEXE I.B). La convergence des simulations Monte Carlo est atteinte lorsque la différence sur la valeur moyenne du courant entre deux itérations de Poisson est inférieure à une barre d'erreur satisfaisante (définie par l'utilisateur).

### I.4.3.3. Simulations Monte Carlo de dispositifs

La simulation Monte Carlo d'un MOSFET en 2D nécessite un maillage adapté au dispositif. Les particules sont injectées par des contacts, définis lors de l'initialisation des simulations Monte Carlo. Les surfaces non contactées sont considérées comme des surfaces réfléchissantes. L'interface Si/SiO<sub>2</sub> subit un traitement différent. Par la rugosité de surface, une proportion des porteurs de charge est réfléchiée et une autre est diffusée. En préliminaire des simulations Monte Carlo, la charge totale du dispositif  $-qN_{charge}$  et une cartographie initiale du potentiel électrique dans le dispositif sont évaluées par simulation Dérive-Diffusion. Durant cette thèse, nous avons utilisé deux approches de Monte Carlo semi-classiques: le Monte Carlo à flux incident et le Monte Carlo d'ensemble. La gestion des particules est différente selon l'approche Monte Carlo utilisée:

- Le Monte Carlo à flux incident (ou encore appelé *Single-Particle*) suit une particule d'un contact à l'autre. La charge de la particule équivaut à la charge totale  $-qN_{charge}$  estimée par la simulation Dérive-Diffusion.
- Le Monte Carlo d'ensemble gère un ensemble de particules  $N_{particules}$ . Chaque particule simulée porte une charge équivalente à  $-qN_{charge}/N_{particules}$ .

La simulation commence à l'équilibre thermodynamique, où la solution est connue. Durant la simulation, les particules passent d'une maille à une autre, sous l'impulsion du champ électrique et des interactions.

Le fonctionnement d'un simulateur Monte Carlo nécessite l'intégration d'une structure de bandes, ainsi que des taux d'interaction calculés à partir de la structure de bandes. Ces données interviennent dans le transport des particules de la méthode Monte Carlo. La structure de bandes est une donnée essentielle de la méthode Monte Carlo. Son utilisation est récurrente dans l'évolution des porteurs de charge dans l'espace réciproque. Dans le cadre de cette thèse, nous avons calculé nos propres structures de bandes, contraintes ou non contraintes, que nous avons intégrées aux simulateurs Monte Carlo.

### I.4.4. Formule de transport de Kubo-Greenwood

Dans cette section, la formule de transport de Kubo-Greenwood est démontrée sur la base de l'équation maîtresse de Boltzmann, dont elle est une linéarisation, dans le cadre d'un gaz 3D. Cette formule s'adapte aussi bien aux gaz d'électrons 3D, qu'aux gaz d'électrons 2D.

Plusieurs approximations sur l'équation de transport de Boltzmann (voir Section I.4.1.) permettent d'aboutir à la formule linéarisée du Kubo-Greenwood. Dans un milieu homogène en dopage et température, la densité de courant dans un état stationnaire (où l'on s'éloigne peu des conditions d'équilibre) s'exprime de la manière suivante:

$$\vec{J}(r) = qn(r)\vec{v}(r) = q \int n(r, k) \vec{v}(r, k) (f(k) - f_0(k)) dk^3 \quad \text{Eq-I.33}$$

où  $q$  est la charge des porteurs,  $n$  est leur densité,  $f_0$  est la distribution des charges à l'équilibre (Boltzmann ou Fermi-Dirac selon l'approximation considérée).

Par ailleurs, sous l'approximation du temps de relaxation (Eq-I.A.5 de l'annexe ANNEXE I.A), l'équation de transport de Boltzmann se simplifie sous les mêmes conditions par:

$$\frac{\vec{F}}{h} \cdot \vec{\nabla}_k f + \frac{f - f_0}{\tau} = 0 \quad \text{Eq-I.34}$$

où  $\tau$  est le temps de relaxation moyen<sup>15</sup>.  $\vec{F}$  est la force appliquée.

Sous ces conditions à faible champ, la dérivée de la distribution s'écrit:

$$\vec{\nabla}_k f \approx \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{\nabla}_k E(k) = \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v}(k) \quad \text{Eq-I.35}$$

où  $E(k)$  et  $v(k)$  sont l'énergie et la vitesse des porteurs de charge associées au point  $k$  de la structure de bandes. A l'aide de l'Eq-I.34, l'équation de Boltzmann s'écrit alors de la manière suivante:

$$f(k) - f_0(k) = \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau(k) \vec{F} \cdot \vec{v}(k) \quad \text{Eq-I.36}$$

A partir de l'équation Eq-I.33, la densité de courant est finalement obtenue par:

$$\vec{J} = q \vec{F} \frac{\int n(k) \frac{\partial f_0}{\partial E}(k) \tau(k) \vec{v}(k) \times \vec{v}(k) dk^3}{\int f_0(k) dk^3} \quad \text{Eq-I.37}$$

Maintenant, si on développe l'expression de la mobilité à partir de la densité de courant, *i.e.*  $\vec{J} = q \langle n \rangle \mu \cdot \vec{E}$ , où  $\vec{E} = \vec{F}/q$  est le champ électrique de dérive et  $\mu$  est le tenseur de mobilité (de dimension  $3 \times 3$  dans le cadre d'un gaz 3D), nous obtenons la formule de Kubo-Greenwood:

$$\mu \cdot \vec{E} = \frac{\vec{J}}{q \langle n \rangle} = q \frac{\int n(k) \frac{\partial f_0}{\partial E}(k) \tau(k) \vec{v}(k) \times \vec{v}(k) dk^3}{\int n(k) f_0(k) dk^3} \cdot \vec{E} \quad \text{Eq-I.38}$$

Le développement de ce simulateur s'est effectué dans le cadre d'une étroite collaboration entre STMicroelectronics (Crolles) et l'équipe CMO de l'Institut d'Electronique Fondamentale de l'université Paris XI (Orsay) [79].

<sup>15</sup> Précisons la relation entre les temps de relaxation et les taux d'interaction. De l'équation Eq-I.13, des approximations permettent de définir l'intégrale de collision  $\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = -(f(k) - f_0(k)) \int_{k' \neq k} S(\vec{k}, \vec{k}') dk'$  [80].

$S(\vec{k}, \vec{k}')$  correspond à la densité de probabilité de passage par unité de temps d'un état initial  $\vec{k}$  à l'état final  $\vec{k}'$ . En assimilant cette équation à celle de l'approximation du temps de relaxation (voire Eq-I.A.5 de l'annexe ANNEXE I.A), nous obtenons,  $1/\tau(\vec{k}) = \int_{k' \neq k} S(\vec{k}, \vec{k}') dk'$ .

## I.5. Structure du manuscrit

Le **chapitre II** présente les modèles de calcul de structures de bandes semi-empiriques développés au cours de cette thèse (EPM et  $k.p$  30 bandes). Les effets de contrainte sont intégrés aux modèles. Un accent particulier est porté sur la procédure d'ajustement de la méthode  $k.p$  30 bandes. De fait, un ensemble de simulations de référence *ab initio* a été généré afin de compléter les données expérimentales sur les propriétés intrinsèques des semi-conducteurs Silicium et Germanium dans leurs états relaxé et contraint. Enfin, une optimisation de type gradient-conjugué permet la détermination des paramètres du modèle  $k.p$ . Des grandeurs macroscopiques, associées aux structures de bandes des semi-conducteurs relaxés et contraints, seront extraites et comparées aux valeurs théoriques et expérimentales de la littérature. Ce chapitre sera aussi l'occasion de présenter un modèle analytique de gap intégrant les effets de contrainte. Des solutions de ce modèle seront calculées pour des conditions de contraintes uniaxiales et comparées aux résultats de modèles numériques plus complexes.

Le **chapitre III** est consacré à l'étude des propriétés de transport dans les structures MOSFETs à canal ultra-court. Les structures de bandes issues des résultats du chapitre II, seront intégrées dans les simulations de transport par une procédure systématique qui sera présentée. Les simulations de transport de ce chapitre ne seront réalisées qu'à l'aide de structures de bandes 3D. Ce chapitre est séparé en deux principales sections. La première section est associée à la comparaison des solutions de deux simulateurs Monte Carlo de conceptions différentes (MC++ et SPARTA) concernant le courant de drain de MOSFETs relaxés. Entre autres, des tendances sur l'évolution des courants de drain en fonction de l'orientation du canal, de la longueur de grille mais aussi du régime de transport considéré (*Ion / Ilin*) sont dégagées. De cette première étude, une relative confiance dans l'utilisation des simulateurs Monte Carlo sera admise. Dans une seconde section, des variations de courant de nMOSFETs à canal ultra-court en fonction de contraintes uniaxiales seront calculées dans les régimes de transport linéaire et de saturation. Les résultats obtenus, seront analysés sur la base de considérations physiques associées aux structures de bandes sous contrainte.

Le **chapitre IV** est dédié à l'influence des effets de confinement sur les propriétés électroniques et de transport des trous dans les dispositifs alternatifs de type SOI. Ce chapitre s'organise en deux principales sections. La première est dédiée à l'introduction du confinement dans les méthodes de calcul de structures de bandes. Le modèle couramment utilisé de masse effective sera examiné en comparaison de la méthode plus complexe  $k.p$  30 bandes EFA (*Envelop Function Approximation*). Notamment, les effets de couplage entre les effets de contrainte et de confinement seront attentivement étudiés. La seconde partie présente la mise en place d'un simulateur de transport à "l'état de l'art" sur la base de la formule de Kubo-Greenwood. Au préalable des calculs des propriétés de transport dans une couche d'inversion, les structures de bandes sont obtenues par une approche  $k.p$ -Poisson-Schrödinger auto-cohérente. Ensuite, des variations de courant seront estimées dans une couche d'inversion de trous en fonction de contraintes uniaxiales selon deux orientations de transport. Ces résultats seront à comparer avec ceux issus de la formule de Kubo-Greenwood dans les matériaux massifs (structures de bandes 3D). L'influence du couplage entre les effets de contrainte et de confinement sur les propriétés de transport sera particulièrement étudiée.

Le **chapitre V** est consacré à la mise en place de mesures expérimentales de courants de drain MOSFETs sous contraintes uniaxiales. Ces mesures, effectuées par la technique à quatre pointes (appelée *Wafer Bending*), permettent de parfaitement contrôler les valeurs de contrainte imposées aux dispositifs MOSFETs. Finalement, les résultats obtenus des simulations évoluées de transport (chapitre III et IV) sont confrontés à ces variations de courant sous contraintes uniaxiales. Un ensemble cohérent de coefficients de piezorésistance seront extraits de ces comparaisons, satisfaisant à la fois les mesures expérimentales et résultats théoriques. Par ailleurs, le domaine de validité du modèle de piezorésistance sera attentivement examiné.



Enfin, les différentes parties de ce manuscrit sont associées en Tableau I.6 à des recommandations de la feuille de route de l'ITRS [2] concernant les efforts à fournir par les industriels et les partenaires académiques dans la modélisation des futures générations de transistors

**Tableau I.6:** Quelques citations de la feuille de route [2] associées aux études présentées dans les différentes parties du manuscrit.

Partie du manuscrit	Citation de la feuille de route [2]
Objectif global	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ultimate nanoscale device simulation capability: “Méthodes, modèles et algorithmes qui contribuent à la prédiction des limites des CMOS”.</li> <li>- Device modeling: “La modélisation des dispositifs est utilisée pour étudier la réduction des échelles dans les dispositifs et l’optimisation des technologies. La capacité de reproduire correctement les performances actuelles et de prédire les limitations de demain est primordiale”.</li> <li>- Numerical methods: “Des méthodes numériques et algorithmes nécessitent des améliorations pour appuyer les outils TCAD dans la prise en compte d’une complexité croissante des phénomènes physiques”.</li> </ul>
Chapitre II	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Device Modeling: “Des modèles complets doivent inclure les effets (de contrainte) sur les structures de bandes (déplacement des bandes, densité d’états, masses effectives)”.</li> <li>- Materials modeling: “La plupart des modèles utilisés dans la simulation des dispositifs peuvent être considérés comme des modèles de matériaux, puisqu’ils sont basés sur la structure électronique des semi-conducteurs.”</li> </ul>
Chapitre III	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ultimate nanoscale device simulation capability: “L’ingénierie de contrainte doit être prise en compte [...] l’efficacité, la précision et la robustesse des calculs sont des problématiques clés”.</li> <li>- Device modeling: “La complexité actuelle de la physique des composants requiert [...] l’usage de méthodes Monte Carlo, qui résolvent stochastiquement l’équation de Boltzmann”.</li> <li>- Device modeling: “Les dispositifs FD <i>fully-Depleted</i> [...] SOI, multi-grille [...] ont été investigués Pour ces structures, les modèles de transport partiellement balistique [...] sont indispensables [...] La description de la mobilité pour des directions arbitraires de canal devient indispensable [...] Une description complète des effets de contrainte devient nécessaire”.</li> </ul>
Chapitre IV	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ultimate nanoscale device simulation capability: “<i>Quantum-based</i> simulateur, [...] précis et efficace en temps de calcul, incluant les structures de bandes et le spectre des phonons [...] Les simulations doivent être applicables au-delà des CMOS planaires standards”.</li> <li>- Device modeling: “La complexité actuelle de la physique des composants requiert [...] l’usage de simulateurs, basés sur l’équation de Schrödinger, qui prennent en compte les effets quantiques”.</li> </ul>
Chapitre V	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ultimate nanoscale device simulation capability: “Modèles physiques prédictifs sur les performances des dispositifs induites sous contrainte”.</li> <li>- Device modeling: “Les effets (de contrainte) sur la mobilité sont d’une importance cruciale. Ils induisent une piezorésistivité anisotrope, provoquée par le changement des masses effectives, mais aussi par la variation des temps de relaxation, aussi bien que par la dépendance de la vitesse de saturation à la contrainte.”</li> </ul>

## Références

- [1] <http://www.intel.com/technology/mooreslaw>
- [2] <http://www.itrs.net>
- [3] <http://www.electronicweekly.com/blogs/david-manners-semiconductor-blog/2007/12/apocalyptic-statistics-for-fut.html>
- [4] H. Matthieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*, (Dunod, 5ème édition, 2001).
- [5] E. Fuchs, *Etude Théorique et Expérimentale du Transport Electronique dans les dispositifs nanométriques sur Silicium*, Thèse de doctorat: Ecole Doctorale Physique, Spécialité Electronique, 2006.
- [6] F. Payet, *Modélisation et Intégration de Transistors a Canal de Silicium contraint pour les noeuds Technologiques CMOS 45nm et en deçà*, Thèse de doctorat: Ecole Doctorale Physique, Physique et Modélisation des Systèmes Complexes: Micro et Nanoélectronique, 2005.
- [7] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase and H. Tango, "On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFETs .1. Effects of substrate impurity concentration", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.41, no.12, pp. 2357-2362 1994; S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase and H. Tango, "On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFETs .2. Effects of surface orientation", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.41, no.12, pp. 2363-2368 1994.
- [8] S. E. Thompson, M. Armstrong, C. Auth, S. Cea, R. Chau, G. Glass, T. Hoffman, J. Klaus, Z. Y. Ma, B. McIntyre, A. Murthy, B. Obradovic, L. Shifren, S. Sivakumar, S. Tyagi, T. Ghani, K. Mistry, M. Bohr and Y. El-Mansy, "A logic nanotechnology featuring strained-silicon", *IEEE Electron Device Letters*, vol.25, no.4, pp. 191-193 2004.
- [9] D. Rideau, *Introduction to MOSFETs Compact Models v1.2*, rapport interne ST Microélectronics, 2006.
- [10] H. M. Manasevit, I. S. Gergis and A. B. Jones, "Electron-mobility enhancement in epitaxial multilayer Si-Si<sub>1-x</sub>Gex alloy-films on (100) Si", *Applied Physics Letters*, vol.41, no.5, pp. 464-466 1982.
- [11] R. People, J. C. Bean, D. V. Lang, A. M. Sergent, H. L. Stormer, K. W. Wecht, R. T. Lynch and K. Baldwin, "Modulation doping in GexSi<sub>1-x</sub>/Si strained layer heterostructures", *Applied Physics Letters*, vol.45, no.11, pp. 1231-1233 1984.
- [12] K. Rim, K. Chan, L. Shi, D. Boyd, J. Ott, N. Klymko, F. Cardone, L. Tai, S. Koester, M. Cobb, D. Canaperi, B. To, E. Duch, I. Babich, R. Carruthers, P. Saunders, G. Walker, Y. Zhang, M. Steen and M. Jeong, "Fabrication and mobility characteristics of ultra-thin strained Si directly on insulator (SSDOI) mosfets", 2003 IEEE International Electron Devices Meeting, Technical Digest, pp. 49-52 2003.
- [13] A. Shimizu, K. Hachamine, N. Ohki, H. Ohta, M. Koguchi, Y. Nonaka, H. Sato and F. Ootsuka, "Local Mechanical-Stress Control (LMC): A new Technique for CMOS-Performance Enhancement", *International Electron Devices Meeting 2001, Technical Digest*, pp. 433-436 (2001).
- [14] S. Ito, H. Namba, K. Yamaguchi, T. Hirata, K. Ando, S. Koyama, S. Kuroki, N. Ikezawa, T. Suzuki, T. Saitoh and T. Horiuchi, "Mechanical stress effect of etch-stop nitride and its impact on deep submicron transistor design", *International Electron Devices Meeting 2000, Technical Digest*, pp. 247-250 2000.
- [15] S. Gannavaram, N. Pesovic and M. C. Ozturk, "Low temperature (<= 800 degrees c) recessed junction selective silicon-germanium source/drain technology for sub-70 nm CMOS", *International Electron Devices Meeting 2000, Technical Digest*, pp. 437-440 2000.
- [16] P. R. Chidambaram, B. A. Smith, L. H. Hall, H. Bu, S. Chakravarthi, Y. Kim, A. V. Samoilo, A. T. Kim, P. J. Jones, R. B. Irwin, M. J. Kim, A. L. P. Rotondaro, C. F. Machala and D. T. Grider, "35% drive current

- improvement from recessed-sige drain extensions on 37 nm gate length pmos", 2004 Symposium on VLSI Technology, Digest of Technical Papers, pp. 48-49 2004.
- [17] F. Cacho, "CESL Induced Stress in C065: Part1: Silicon anisotropy & channel orientation effect", Rapport interne STMicroelectronics: MTM\_07\_061\_1, 2007; H. Brilliet et F. Cacho, "Modeling of CESL Induced Stress: Shape and Deposition Features", Rapport interne STMicroelectronics: MTM\_07\_061\_2, 2007.
- [18] L. Smith, V. Moroz, G. Eneman, P. Verheyen, F. Nouri, L. Washington, M. Jurczak, O. Penzin, D. Pramanik and K. De Meyer, "Exploring the limits of stress-enhanced hole mobility", Ieee Electron Device Letters, vol.26, no.9, pp. 652-654 2005.
- [19] T. Skotnicki, "Silicon-On-Nothing Nanodevices", ESSDERC 2007: SINANO Workshop, 14 sept. 2007.
- [20] Modélisation de Dispositifs Electronique en Régime Nanométrique [MODERN]: développement d'outils pour la simulation avancée du transport dans les nano-MOSFETs: Tache 2.2.
- [21] PULLing the limits of NANOCMOS electronics [PULLNANO]: Subproject 6 / Workpackage 6.1.
- [22] D. K. Nayak and S. K. Chun, "Low-field hole mobility of strained Si on (100) Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> substrate", Applied Physics Letters, vol.64, no.19, pp. 2514-2516 1994.
- [23] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys", Journal of Applied Physics, vol.80, no.4, pp. 2234-2252 1996.
- [24] F. M. Bufler and W. Fichtner, "Scaling and strain dependence of nanoscale strained-Si p-MOSFET performance", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.50, no.12, pp. 2461-2466 2003.
- [25] C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "MC simulation of strained Si/SiGe devices", ESSDERC 2003: Proceedings of the 33rd European Solid-State Device Research Conference, pp. 9-14 2003.
- [26] R. Oberhuber, G. Zandler and P. Vogl, "Subband structure and mobility of two-dimensional holes in strained Si/SiGe MOSFETs", Physical Review B, vol.58, no.15, pp. 9941-9948 1998.
- [27] M. V. Fischetti, Z. Ren, P. M. Solomon, M. Yang and K. Rim, "Six-band k.p calculation of the hole mobility in silicon inversion layers: Dependence on surface orientation, strain, and silicon thickness", Journal of Applied Physics, vol.94, no.2, pp. 1079-1095 2003.
- [28] T. Krishnamohan, C. Jungemann, D. Kim, E. Ungersboeck, S. Selberherr, P. Wong, Y. Nishi and K. Saraswat, "Theoretical investigation of performance in uniaxially- and biaxially-strained Si, SiGe and Ge double-gate p-MOSFETs", 2006 International Electron Devices Meeting, Vols 1 and 2, pp. 681-684 2006.
- [29] T. Krishnamohan, C. Jungemann, D. Kim, E. Ungersboeck, S. Selberherr, A. T. Pham, B. Meinerzhagen, P. Wong, Y. Nishi and K. C. Saraswat, "High performance, uniaxially-strained, silicon and germanium, double-gate p-MOSFETs", Microelectronic Engineering, vol.84, no.9-10, pp. 2063-2066 2007.
- [30] X. F. Fan, L. F. Register, B. Winstead, M. C. Foisy, W. Q. Chen, X. Zheng, B. Ghosh and S. K. Banerjee, "Hole mobility and thermal velocity enhancement for uniaxial stress in Si up to 4 GPa", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.54, no.2, pp. 291-296 2007.
- [31] K. Huet, C. Chassat, D. P. Nguyen, S. Galdin-Retailleau, A. Bournel and P. Dollfus, "Full band monte carlo study of ballistic effects in nanometer-scaled strained p channel double gate MOSFETs", Physica Status Solidi C - Current Topics in Solid State Physics, Vol 5, No 1, vol.5, no.1, pp. 43-46 2008.
- [32] S. E. Thompson, G. Y. Sun, Y. S. Choi and T. Nishida, "Uniaxial-process-induced strained-Si: Extending the CMOS roadmap", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.53, no.5, pp. 1010-1020 2006.
- [33] E. X. Wang, P. Matagne, L. Shifren, B. Obradovic, R. Kotlyar, S. Cea, M. Stettler and M. D. Giles, "Physics of hole transport in strained silicon mosfet inversion layers", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.53,

no.8, pp. 1840-1851 2006.

- [34] T. Krishnamohan, D. Kim, D. Viet Dinh, A. T. Pham, B. Meinerzhagen, C. Jungemann and K. Krishna, "Comparison of (001), (110) and (111) uniaxial- and biaxial-strained-Ge and strained-Si pMOS DGFETs for all channel orientations: Mobility enhancement, drive current, delay and off-state leakage", 2008 International Electron Devices Meeting, Vols 1 and 2, pp. 1- 4 2008.
- [35] F. M. Bufler, R. Gautschi and A. Erlebach, "Monte carlo stress engineering of scaled (110) and (100) bulk pMOSFETs", IEEE Electron Device Letters, vol.29, no.4, pp. 369-371 2008.
- [36] F. M. Bufler, A. Tsibizov and A. Erlebach, "Scaling of bulk pMOSFETs: (110) surface orientation versus uniaxial compressive stress", IEEE Electron Device Letters, vol.27, no.12, pp. 992-994 2006.
- [37] A. T. Pham, C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "Physics-based modeling of hole inversion-layer mobility in strained-SiGe-on-insulator", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.54, no.9, pp. 2174-2182 2007.
- [38] A. T. Pham, C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "Microscopic modeling of hole inversion layer mobility in unstrained and uniaxially stressed si on arbitrarily oriented substrates", Solid-State Electronics, vol.52, no.9, pp. 1437-1442 2008.
- [39] A. T. Pham, C. Jungemann, M. Klawitter and B. Meinerzhagen, "Efficient simulation of hole transport in strained Si and SiGe on insulator inversion layers", Solid-State Electronics, vol.52, no.10, pp. 1660-1668 2008.
- [40] A. T. Pham, C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "Deterministic multisubband device simulations for strained double gate PMOSFETs including magnetotransport", 2008 International Electron Devices Meeting, Vols 1 and 2, pp. 1- 4 2008.
- [41] M. De Michielis, D. Esseni, P. Palestri and L. Selmi, "A new multi subband monte carlo simulator for nano p-MOSFETs", Ulis 2008: Proceedings of the 9th International Conference on Ultimate Integration on Silicon, pp. 67-70 2008.
- [42] P. K. Basu and S. K. Paul, "Reduced intervalley scattering rates in strained Si/SixGe1-x quantum-wells and enhancement of electron-mobility - a model calculation", Journal of Applied Physics, vol.71, no.7, pp. 3617-3619 1992.
- [43] F. Stern and S. E. Laux, "Charge-transfer and low-temperature electron-mobility in a strained Si layer in relaxed Si1-xGex", Applied Physics Letters, vol.61, no.9, pp. 1110-1112 1992.
- [44] F. M. Bufler and W. Fichtner, "Scaling of strained-si n-MOSFETs into the ballistic regime and associated anisotropic effects", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.50, no.2, pp. 278-284 2003.
- [45] C. Jungemann, N. Subba, J. S. Goo, C. Riecobene, Q. Xiang and B. Meinerzhagen, "Investigation of strained Si/SiGe devices by MC simulation", Solid-State Electronics, vol.48, no.8, pp. 1417-1422 2004.
- [46] K. Uchida, T. Krishnamohan, K. C. Saraswat and Y. Nishi, "Physical mechanisms of electron mobility enhancement in uniaxial stressed mosfets and impact of uniaxial stress engineering in ballistic regime", IEEE International Electron Devices Meeting 2005, Technical Digest, pp. 135-138 2005.
- [47] E. Ungersboeck, S. Dhar, G. Karlowatz, V. Sverdlov, H. Kosina and S. Selberherr, "The effect of general strain on the band structure and electron mobility of silicon", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.54, no.9, pp. 2183-2190 2007.
- [48] M. V. Fischetti, F. Gámiz and W. Hänsch, "On the enhanced electron mobility in strained-silicon inversion layer", Journal of Applied Physics, vol.92, no.12, pp. 7320-7324 2002.
- [49] D. Ponton, L. Lucci, P. Palestri, D. Esseni and L. Selmi, "Assessment of the Impact of Biaxial Strain on the Drain Current of Decanometric n-MOSFET", ESSDERC 2006: Proceedings of the 36th European Solid-State Device Research Conference, pp. 166-169 2006.

- [50] G. Comparone, P. Palestri, D. Esseni, L. Lucci and L. Selmi, "A Better Understanding of the Requirements for Predictive Modeling of Strain Engineering in nMOS Transistors", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol.5, no.6, pp. 1106-1114 2008.
- [51] H. Miyata, T. Yamada and D. K. Ferry, "Electron-transport properties of a strained Si layer on a relaxed Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> substrate by monte-carlo simulation", *Applied Physics Letters*, vol.62, no.21, pp. 2661-2663 1993.
- [52] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers", *Physical Review B*, vol.48, no.4, pp. 2244-2274 1993.
- [53] D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini, M. Minondo, C. Tavernier, H. Jaouen and A. Ghetti, "Strained Si, Ge, and Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> alloys modeled with a first-principles-optimized full-zone k.p method", *Physical Review B*, vol.74, no.19, pp. 195208-195228 2006.
- [54] F. Gilibert, *Modélisation des contraintes dans les dispositifs Si/SiGe basée sur l'analyse des structures de bandes*, Thèse de doctorat: Université de Provence, Ecole Doctorale Physique Modélisation et Sciences pour l'Ingénieur, 2005.
- [55] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer and B. Roulet, *Physique Statistique*, (edition Hermann, 2001, paris) .
- [56] C. Jacoboni and L. Reggiani, "The monte-carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials", *Reviews of Modern Physics*, vol.55, no.3, pp. 645-705 1983.
- [57] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, HRW International Editions (1988).
- [58] S. Datta, "Nanoscale device modeling: The green's function method", *Superlattices and Microstructures*, vol.28, no.4, pp. 253-278 2000.
- [59] D. Querlioz, J. Saint-Martin, V. N. Do, A. Bournel and P. Dollfus, "A study of quantum transport in end-of-roadmap DG-MOSFETs using a fully self-consistent Wigner Monte Carlo approach", *Ieee Transactions on Nanotechnology*, vol.5, pp. 737-744 2006; D. Querlioz, J. Saint-Martin, V. N. Do, A. Bournel and P. Dollfus, "Fully quantum self-consistent study of ultimate DG-MOSFETs including realistic scattering using a Wigner Monte-Carlo approach", 2006 International Electron Devices Meeting, Vols 1 and 2, pp. 685-688 2006.
- [60] M. A. Jaud, *Quantum-corrected Monte Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs*, Thèse de doctorat, Université Paris Sud XI, 2006; M. A. Jaud, S. Barraud, P. Dollfus, H. Jaouen, F. de Crecy and G. Le Carval, "Validity of the effective potential approach for the simulation of quantum confinement effects: A Monte Carlo study", *Journal of Computational Electronics*, Vol.5, no.2-3, pp.171-175 2006.
- [61] E. Fuchs, *Etude Théorique et Expérimentale du Transport Electronique dans les dispositifs nanométriques sur Silicium*, Thèse de doctorat: Ecole Doctorale Physique, Spécialité Electronique, 2006.
- [62] G. Masetti, M. Severi and S. Solmi, "Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-doped, phosphorus-doped, and boron-doped silicon", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.30, no.7, pp. 764-769 1983.
- [63] C. Lombardi, S. Manzini, A. Saporito and M. Vanzì, "A physically based mobility model for numerical-simulation of nonplanar devices", *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol.7, no.11, pp. 1164-1171 1988.
- [64] C. Canali, C. Jacoboni, F. Nava, G. Ottaviani and A. Alberigi-Quaranta, "Electron drift velocity in silicon", *Physical Review B*, vol.12, no.6, pp. 2265-2284 1975.
- [65] G. Ottaviani, L. Reggiani, C. Canali, F. Nava and A. Alberigiquaranta, "Hole drift velocity in silicon", *Physical Review B*, vol.12, no.8, pp. 3318-3329 1975.
- [66] M. J. Van Dort, P. H. Woerlee, A. J. Walker, A. Casper, H. Juffermans and H. Lifka, "Influence of High

- Substrate Voltage and the Mobility of Deep-Submicrometer MOSFET's", IEEE Transactions on Electron Devices,, Vol.39, no.4, pp. 932-938 1992.
- [67] A. Wettstein, *Quantum effects in MOS Devices*, PhD thesis, Series in Microelectronics, vol. 94, (Hartung-Gorre, 2000).
- [68] A. Wettstein, A. Schenk and W. Fichtner, "Quantum device-simulation with the density-gradient model on unstructured grids", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.48, no.2, pp. 279-284 2001.
- [69] D. Connelly, Z. P. Yu and D. Yergeau, "Macroscopic simulation of quantum mechanical effects in 2-D MOS devices via the density gradient method", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.49, no.4, pp. 619-626 2002.
- [70] M. G. Ancona and H. F. Tiersten, "Macroscopic physics of the silicon inversion layer", Physical Review B, vol.35, no.15, pp. 7959-7965 1987.
- [71] C. M. Smith, "piezoresistance Effect in Germanium and Silicon", Physical Review, vol.94, no.1, pp. 42-49 1954.
- [72] T. Guillaume, *influence des contraintes mécaniques non-intentionnelles sur les performances des transistors MOS à canal ultra-court*, Thèse de Doctorat, INPG, Grenoble, 2005.
- [73] M. S. Lundstrom, *Fundamentals of carrier transport*, (Cambridge University Press, 2001).
- [74] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Monte-carlo analysis of electron-transport in small semiconductor-devices including band-structure and space-charge effects", Physical Review B, vol.38, no.14, pp. 9721-9745 1988.
- [75] C. Jungemann, S. Keith, M. Bartels and B. Meinerzhagen, "Efficient full-band monte carlo simulation of silicon devices", IEEE Transactions on Electronics, vol.E82C, no.6, pp. 870-879 1999.
- [76] H. Kosina, M. Nedjalkov and S. Selberherr, "Theory of the monte carlo method for semiconductor device simulation", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.47, no.10, pp. 1898-1908 2000.
- [77] F. M. Bufler, *Full-Band Monte Carlo Simulation of Nanoscale Strained-Silicon MOSFETS*, Series in Microelectronics, vol.140, (Hartung-Gorre, 2003).
- [78] P. Palestri, *Basics of Monte-Carlo Device Simulation*, cours d'université d'été SINANO, 2006.
- [79] K. Huet, M. Feraille, D. Rideau, R. Delamare, V. Aubry-Fortuna, M. Kasbari, S. Blayac, C. Rivero, A. Bournel, C. Tavernier, P. Dollfus and H. Jaouen, "Experimental and theoretical analysis of transport in uniaxially strained pMOSFETs", ESSDERC 2008: Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference, pp. 234-237 2008.
- [80] P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*, (Springer, Third Edition, 2005).



# **CHAPITRE II: Structures de bandes de matériaux sous contrainte**





## **CHAPITRE II: STRUCTURES DE BANDES DE MATÉRIAUX SOUS CONTRAINTE**

### **II.1. Introduction**

L'étude de la structure de bandes dans la Première Zone de Brillouin (PZB) des matériaux est à l'origine de la compréhension de la plupart des phénomènes physiques électrostatiques et de transport se produisant dans les dispositifs électroniques. L'application de contraintes brise les symétries du cristal, ce qui a pour conséquence de profondes modifications de la structure de bande. Les caractéristiques électrostatiques et de transport dans ces matériaux sont profondément modifiées. Ce chapitre est à la base d'une modélisation physique et prédictive des propriétés du Silicium sous contrainte:

Ce chapitre répond à 2 objectifs:

- L'utilisation et le développement de méthodes de calcul de structures incluant l'impact de la contrainte dans le Silicium (Si), le Germanium (Ge) et les alliages SiGe.
- L'utilisation des calculs de structures de bandes pour déterminer les grandeurs macroscopiques utiles à la modélisation des dispositifs électroniques.

La première partie introduit succinctement les différentes méthodes de calcul de structures de bandes. Les différents degrés d'approximation utilisés selon la méthode seront abordés, ainsi que la physique sous-jacente. Une comparaison complète sera effectuée entre les différentes méthodes. De plus, nous discuterons les aspects associés au degré de précision et au temps de résolution des méthodes semi-empiriques de calcul de structures de bandes. Par ailleurs, les grandeurs macroscopiques telles que le gap, les densités d'états et les masses effectives seront déterminées à partir des structures de bandes calculées.

La seconde partie est dédiée à l'introduction de la contrainte biaxiale dans le calcul des structures de bandes. La perte de symétrie dans le matériau, induite par cette perturbation, implique des modifications sur la structure de bandes qui seront explicitées. Nous détaillons l'introduction de la contrainte dans les méthodes numériques de calcul de structures de bandes. Par ailleurs, nous exposons le calcul analytique de structures de bandes  $k.p$  6 bandes avec l'ajout de la contrainte.

Dans la troisième partie, les calculs de structures de bandes sont effectués pour des cas typiques de contraintes biaxiales avec les méthodes numériques  $k.p$ , EPM et ab initio.

Dans la quatrième partie, les bandes de valence sont décrites pour des contraintes uniaxiales. Ces contraintes prennent en compte dans leur ensemble des composantes de déformation uniaxiales et de cisaillement.

La cinquième partie est dédiée à l'estimation de valeurs de gap sous contraintes uniaxiales par une approche entièrement analytique. Cette section sera aussi l'occasion de présenter une nouvelle méthode de résolution analytique de l'Hamiltonien de la méthode  $k.p$  6 bandes.

Dans chacune de ces parties, des grandeurs physiques sont quantifiées en fonction de cas typiques de contrainte biaxiale et uniaxiale (tels que les masses effectives, le déplacement des extrema de bandes...). Ces structures de bandes, présentées dans ce chapitre, seront utilisées dans l'étude des propriétés de transport dans les nanodispositifs électroniques MOS à effet de champ en chapitre III.

## II.2. Introduction aux structures de bandes

Dans ce paragraphe, nous développons le concept de structure de bandes qui est une donnée essentielle dans la compréhension du comportement des porteurs de charge dans un cristal. Par la suite, nous introduisons les méthodes *ab initio* et semi-empiriques EPM et *k.p* qui permettent de calculer ces structures de bandes.

Nous détaillons les paramètres de la méthode *ab initio* qui nous ont servi dans l'ajustement de la méthode *k.p* 30 bandes.

Par ailleurs, nous présentons la méthode *k.p* 30 bandes que nous avons développée durant cette thèse. Les outils et les procédures appliqués à ce travail sont également exposés.

### II.2.1. Cristal et première zone de Brillouin d'un semi-conducteur de type IV.

Les éléments semi-conducteurs de type IV, comme le Silicium et le Germanium, cristallisent selon la structure cristalline de type zinc-blende, dans laquelle deux sous-réseaux de Bravais Cubique à Faces Centrées (CFC) interpénétrés [1] (voir Figure 1). sont décalés d'un vecteur  $\vec{R} = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$  en unité [*a*] (paramètre de maille du réseau cubique). La cellule élémentaire est constituée de deux atomes appartenant aux deux sous-réseaux cubiques, placés aux positions (0, 0, 0) et (1/4, 1/4, 1/4). La position des atomes est périodique dans la structure, les propriétés physiques associées à cette structure sont également périodiques. L'ensemble des potentiels coulombiens créés par les électrons de coeur et des noyaux atomiques forme le *champ cristallin*.

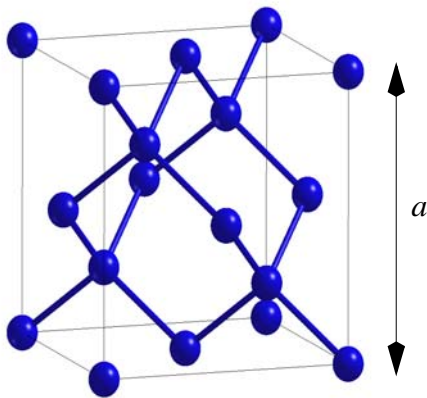


Figure II.1: Structure cristalline du Si; *a* est le paramètre de maille du réseau.

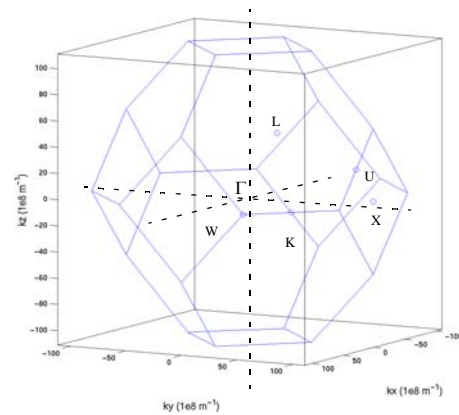


Figure II.2: Zone de Brillouin du Si. Les points W, L, K, X, U représentent les directions principales.

À la périodicité dans l'espace réel, un espace réciproque est défini par la transformée de Fourier. Cet espace permet de décrire les propriétés de la structure cristalline dans l'espace des vecteurs d'onde *k*. L'entité élémentaire de l'espace réciproque (cellule de Wigner-Seitz) du réseau réciproque est appelée Première Zone de Brillouin (PZB). Dans le cas d'un réseau CFC, la PZB forme un octoèdre tronqué, représentée en Figure II.2. Des points de haute symétrie sont également tracés, dont les coordonnées sont les suivantes:

- X en  $\frac{2\pi}{a}[1, 0, 0]$  (Y en  $\frac{2\pi}{a}[0, 1, 0]$ ; Z en  $\frac{2\pi}{a}[0, 0, 1]$ ).
- L en  $\frac{2\pi}{a}[1/2, 1/2, 1/2]$ , (N en  $\frac{2\pi}{a}[1/2, \bar{1}/2, 1/2]$ ).

- K en  $\frac{2\pi}{a}[3/4, 3/4, 0]$ , (U en  $\frac{2\pi}{a}[1, 1/4, 1/4]$ ).
- W en  $\frac{2\pi}{a}[1, 1/2, 0]$ .
- $\Gamma$  en  $\frac{2\pi}{a}[0, 0, 0]$  (Ce point définit le centre de la PZB).

Tout au long de ce manuscrit, l'orientation des vecteurs ou des plans dans le réseau cristallin sera défini à l'aide des indices de Miller [1]:

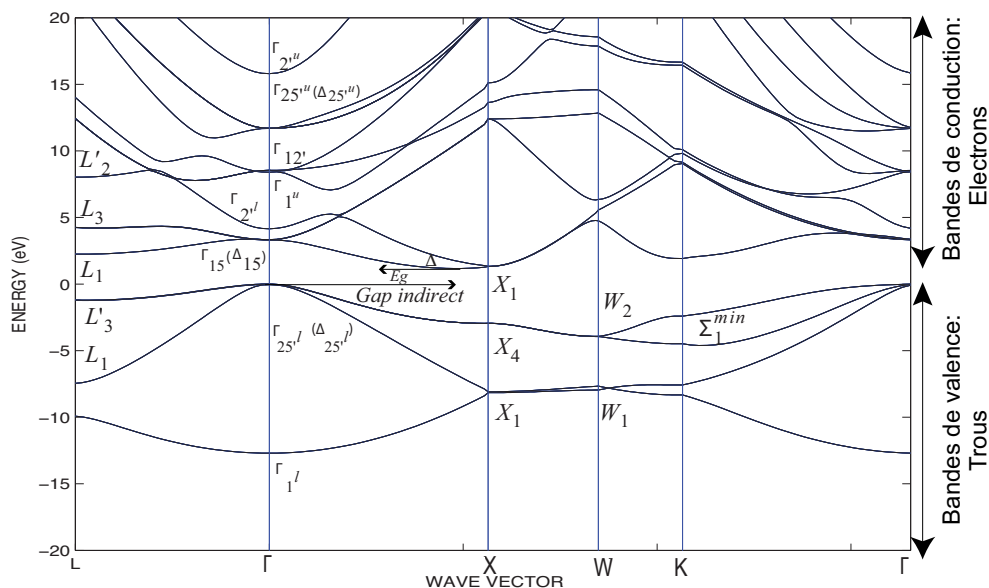
- $\langle hkl \rangle$  et  $[hkl]$  indiquent une direction cristallographique.
- $\{hkl\}$  indique les directions cristallographiques équivalentes.
- $(hkl)$  correspond au plan normal à la direction  $\langle hkl \rangle$ .

$h, k, l$  sont des entiers définis en unité de vecteurs de base du réseau de Bravais  $\vec{R}_B$ .

## II.2.2. Notions élémentaires des structures de bandes

Cette section est consacrée à l'introduction des propriétés associées aux porteurs de charge dans un solide. Le champ cristallin périodique du solide va fortement influencer l'ensemble des énergies et des fonctions d'onde accessibles aux électrons de valence délocalisés sur l'ensemble du cristal. Les énergies  $E$  des porteurs de charge sont définies dans l'espace réciproque en fonction du vecteur d'onde  $\vec{k}$ . En raison de la délocalisation des électrons de valence sur l'ensemble du cristal, il existe plusieurs énergies pour un même vecteur d'onde. Ces énergies sont indicées par un nombre quantique  $n$  qui définit une bande. L'ensemble des bandes forment la *structure de bandes*.

La connaissance de la structure de bandes permet de distinguer un semi-conducteur, des métaux et des isolants. Nous montrons la structure de bandes du semi-conducteur Si non contraint en Figure II.3. Les états en  $\Gamma$  ainsi qu'en d'autres points de haute symétrie sont reportés. Nous observons qu'il existe une zone d'énergie qui n'est pas accessible aux électrons, appelée *bande interdite* ou *gap*  $E_g$ . De part et d'autre du gap, les bandes sont appelées bandes de valence et de conduction. Pour le Si, ce gap est indirect, puisque les vecteurs d'onde  $\vec{k}$  du maximum des bandes de valence et du minimum des bandes de conduction ne coïncident pas.

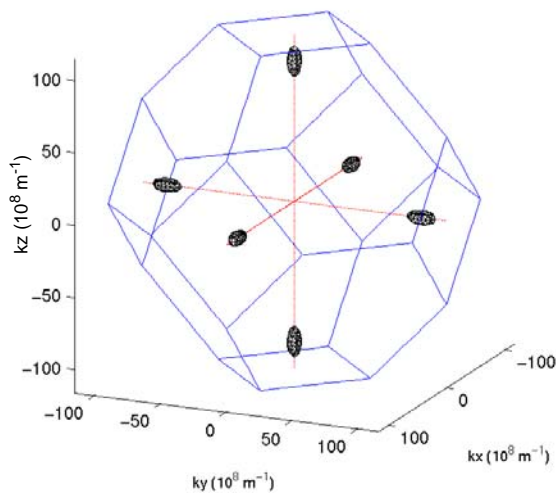


**Figure II.3:** Relation de dispersion d'un cristal zinc-blende (Silicium dans cette figure) dans la première zone de Brillouin. Les méthodes de calcul de structures de bandes  $k.p$  30 bandes ont été ajustées sur des points de haute symétrie. Les états en  $\Gamma$  et autres points de haute symétrie sont reportés et indiqués par leurs notations. Les écarts dus aux couplages spin-orbite sont également reportés. Les méthodes de calcul de structures de bandes présentées dans cette thèse ont été comparées sur l'ensemble de ces points (voir Sections II.3. et II.4.).

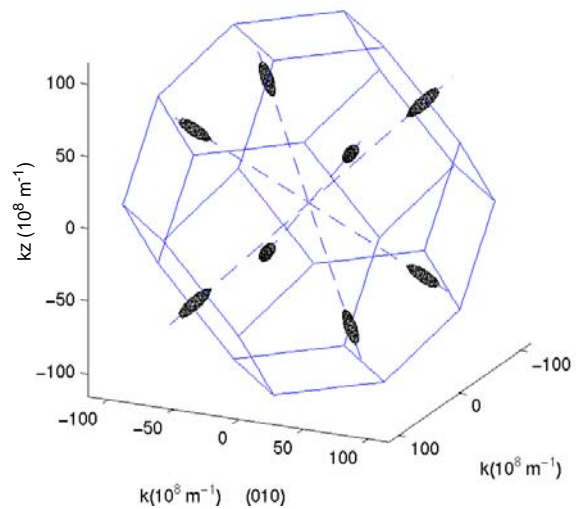
Dans le matériau semi-conducteur intrinsèque (pur), l'énergie de Fermi (pour laquelle les états d'énergie inférieure sont occupés à 0K) est située dans le gap. Ainsi, les électrons à 0K occupent uniquement les bandes de valence. Cependant, le gap des semi-conducteurs étant suffisamment faible, comme dans les cas du Si et Ge massifs, des forces ainsi que l'agitation thermique des électrons permettent leurs transferts des bandes de valence aux bandes de conduction.

Les propriétés de transport sont principalement influencées par les porteurs de charge dont la distribution est essentiellement localisée dans les zones proches des extréma de bande, appelées *vallées*.

En Figure II.4 et Figure II.5, nous montrons respectivement les surfaces isoénergies des vallées de conduction  $\Delta$  (situées sur le chemin  $\Gamma$ -X) et  $L$  (situées en  $\frac{2\pi}{a}[1/2, 1/2, 1/2]$ ) du Si non contraint. Les vallées  $\Delta$  du Si non contraint ont des énergies plus basses que les vallées  $L$ , et inversement dans le cas du Ge. La Figure II.6 montre le détail de la structure de bandes du Si non contraint autour du maximum des bandes de valence en  $\Gamma$  dans les 3 directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . Trois bandes coexistent: la bande des "trous lourds" (hh), celle des "trous légers" (lh) et celle des trous "spin-orbite" (so). Dans le matériau non contraint, les bandes hh et lh ont leurs maxima confondus, et n'ont pas le même rayon de courbure. Le décalage entre la bande so et les bandes hh et lh trouve son origine dans l'interaction entre le spin des électrons et le moment orbital du noyau. Sous des conditions d'utilisation usuelle des dispositifs pMOSFETs, les porteurs de charge sont diffusés dans les zones de plus basse énergie des bandes des trous près du point  $\Gamma^1$ .

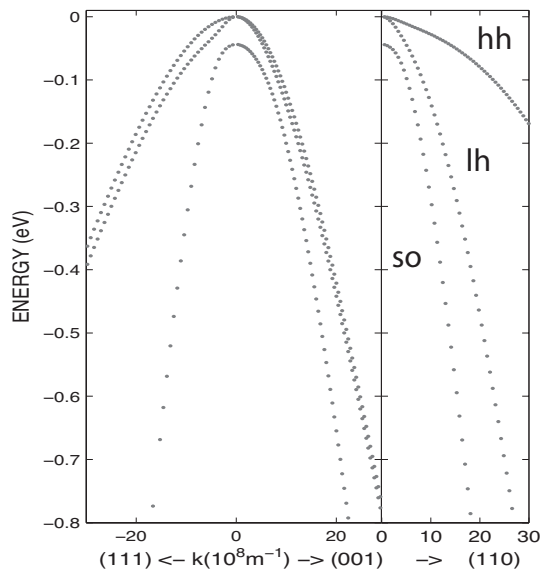


**Figure II.4:** Surfaces isoénergies ( $E-E_0=50\text{meV}$ ) autour du minimum de la bande de conduction sur le chemin  $\Gamma$ -X représentées dans la première zone de Brillouin [2].



**Figure II.5:** Surfaces isoénergies ( $E-E_0=50\text{meV}$ ) autour du minimum de la bande de conduction sur le chemin  $\Gamma$ -L représentées dans la première zone de Brillouin [2].

<sup>1</sup>Le sommet de la bande de valence hh est considéré comme la bande de valence la plus haute en énergie, alors qu'elle est la bande des trous la plus basse en énergie. Cette convention a été adoptée tout au long de cette section.



**Figure II.6:** Bandes de valence dans les directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . Les trois premières bandes de valence sont appelées hh (*heavy hole* ou trous lourds), lh (*light hole* ou trous légers) et so (spin-orbite).

Par ailleurs, deux types de porteurs de charge permettent de décrire les propriétés de transport dans les semi-conducteurs: Les électrons sur les bandes de conduction et les trous sur les bandes de valence<sup>2</sup>. Ces derniers sont traités comme des quasi-particules créées par l'absence d'électrons (transférés dans la bande de conduction) dans les bandes de valence.

### II.2.3. Introduction aux méthodes de calcul de structures de bandes

Les structures de bandes sont calculées à partir de la résolution de l'Hamiltonien du système. Cet Hamiltonien décrit l'énergie totale du système. Les énergies et les fonctions d'onde, régissant l'évolution des électrons de valence dans le solide, sont calculées à partir de l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien du système:

$$H\psi = E\psi \quad \text{Eq-II.1}$$

$H$  correspond à l'Hamiltonien du système,  $E$  est l'ensemble des énergies constituant la structure de bandes.  $\psi$  est une fonction propre du système, c'est à dire une fonction d'onde des porteurs de charge.

La description complète des interactions se produisant dans un solide est exprimée par l'Hamiltonien:

$$H = \sum_i T_i + \sum_{i \neq j} V_{ij} + \sum_{i, I} V_{iI} + \sum_I T_I + \sum_{I \neq J} V_{IJ} \quad \text{Eq-II.2}$$

↙
↙
↙
↙
↙

Energie cinétique des électrons    Interaction e<sup>-</sup>-e<sup>-</sup>    Interaction e<sup>-</sup>-noyau    Energie cinétique des noyaux    Interaction noyau-noyau

Les termes  $T$  correspondent à des énergies cinétiques. Les termes  $v$  correspondent à des énergies d'interaction entre les électrons (e<sup>-</sup>)  $v_{ij}$ , entre les noyaux  $v_{IJ}$  et entre les électrons et les noyaux  $v_{iI}$ .

<sup>2</sup>D'où l'origine de la nomenclature des premières bandes de valence.

Dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer, le réseau cristallin est considéré statique et l'Hamiltonien se réduit de la manière suivante:

$$H = \sum_i T_i + \sum_{i \neq j} V_{ij} + \sum_{i,I} V_{iI} \tag{Eq-II.3}$$

↑ Energie cinétique des électrons   
 ↑ Interaction e<sup>-</sup>-e<sup>-</sup>   
 ↑ Interaction e<sup>-</sup>-noyau statique

Une exacte description de l'interaction  $V_{ij}$  (problème à plusieurs corps) nécessite une équation avec  $3N$  degrés de liberté couplés spatialement. Dans le cas d'un système macroscopique, le nombre  $N$  est de l'ordre de grandeur du nombre d'Avogadro ( $\approx 10^{23}$ ). Plusieurs méthodes ont été développées à partir de différentes approximations, ou encore des différentes descriptions de fonctions d'onde, prises en compte dans l'Hamiltonien, comme décrit dans la Figure II.7. Nous avons utilisé la méthode *ab initio* DFT/LDA avec la correction à plusieurs corps *GW* [90], qui calcule de manière précise les structures de bandes. A partir de cette méthode, nous avons développé les modèles de calcul de structures de bandes semi-empiriques *Empirical Pseudopotential Method* (EPM) et *k.p* 30 bandes. Ces modèles comportent des paramètres qu'il faut ajuster à partir de l'expérience ou des simulations *ab initio*. Par ailleurs, les principales caractéristiques du modèle semi-empirique *Tight Binding* (TB) sont également reportées en Figure II.7.

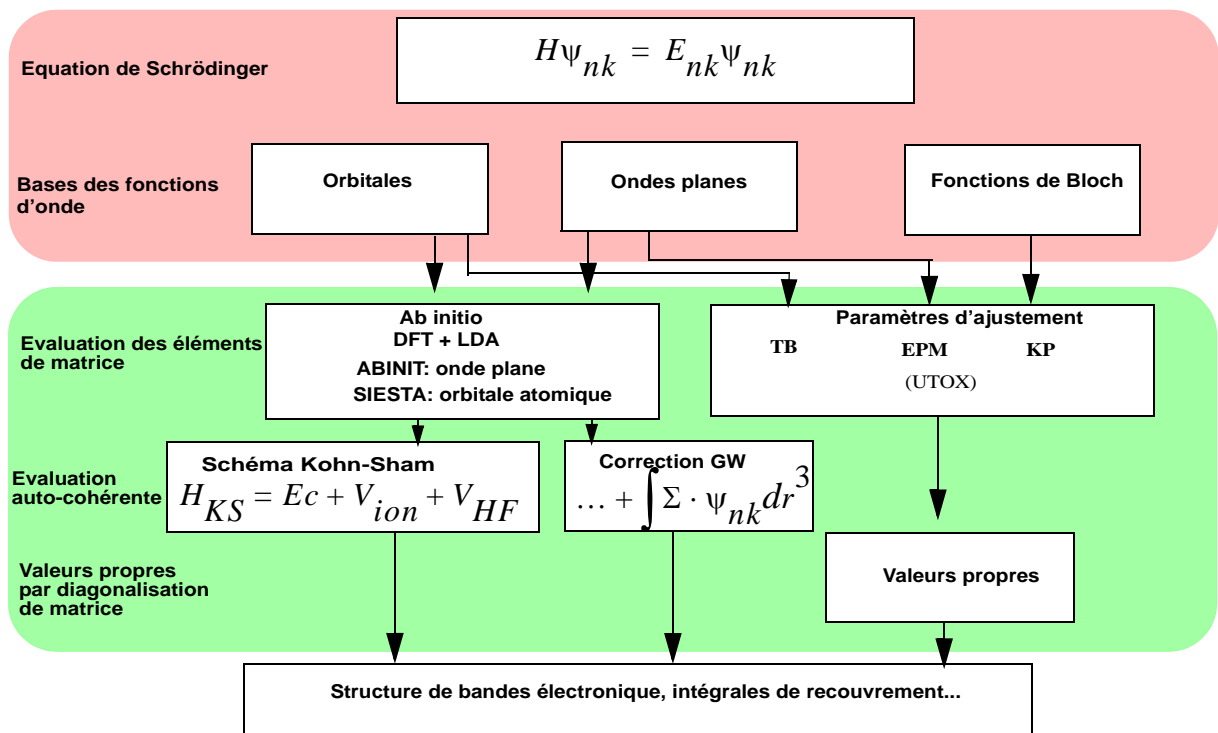


Figure II.7: Différentes méthodes de calcul de structures de bandes en fonction de la description des fonctions d'onde et des approximations prises en compte.

L'ensemble des calculs, obtenus à partir des méthodes *ab initio*, *k.p* et EPM, a été comparé aux résultats expérimentaux du Si, Ge et SiGe. Nous montrons que les modèles *k.p* et EPM, développés durant cette thèse, reproduisent de manière précise aussi bien l'ensemble des structures de bandes, le déplacement des bandes, que la variation des masses effectives en fonction de la contrainte. Nous montrons un bon accord entre les résultats de la méthode largement utilisée de l'EPM non local de Chelikowsky et Cohen [3] et ceux de la méthode *k.p* développée durant cette thèse.

## II.2.4. Méthode *ab initio*

### II.2.4.1. Notions de base de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

Les calculs *ab initio* de cette thèse ont été effectués selon la théorie de la fonctionnelle de densité DFT à l'aide du simulateur Abinit [90]. La littérature [4][5] explique de manière très détaillée la méthode employée. Nous ne déclinons dans cette section que les notions fondamentales de la méthode. De même, nous ne définirons que succinctement l'ensemble des paramètres qui nous ont permis d'obtenir les structures de bandes par cette méthode.

L'Hamiltonien Eq-II.3 s'exprime de la manière suivante:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar}{2m_0} \nabla_i^2 + V_{ext}(r_i) \right] + \sum_{i < j}^N \frac{|q|^2}{|r_i - r_j|} \quad \text{Eq-II.4}$$

$i$  indexe les électrons.  $r_i$  correspond à la position de l'électron  $i$ . Par l'approche DFT, l'ensemble des électrons est pris en compte dans la fonction d'onde du système étudié. Par cette méthode, la structure électronique des électrons, interagissant avec un potentiel externe cristallin  $V_{ext}(r)$ , est déterminée par la densité de charge  $\rho(r)$ .

D'après le théorème de Hohenberg-Kohn [6], les propriétés de l'état fondamental du système peuvent être déterminées à travers la fonctionnelle de densité des électrons qui dépend uniquement de 3 coordonnées spatiales. L'énergie fonctionnelle  $E(\rho)$  pour un système à plusieurs électrons avec les interactions électroniques peut être écrite sous la forme suivante:

$$E(\rho) = -\frac{\hbar}{2m_0} \nabla^2 + \int V_{ext}(r) \rho(r) dr + \frac{|q|^2}{2} \iint \frac{\rho(r_1) \rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 + E_{xc}[\rho(r)] \quad \text{Eq-II.5}$$

Le dernier terme représente l'énergie d'échange-corrélation. Cette énergie capture les interactions à plusieurs corps (ou  $N$  corps). Les trois premiers termes représentent respectivement la fonctionnelle d'énergie cinétique, les énergies externes et d'Hartree.

Cette décomposition est formellement exacte, mais les interactions d'échange-corrélation à plusieurs corps  $E_{xc}$  ne sont pas exprimables à partir de la fonctionnelle de densité. Ce problème à plusieurs électrons interagissants est réduit à un problème d'électrons non-interagissants dans un potentiel effectif par les équations de Kohn-Sham [7]. Par ailleurs, le terme cinétique doit être formulé en fonction de la densité de porteurs de charge.

Dans le cadre de la théorie DFT, les équations de Kohn-Sham sont l'ensemble des équations qui réduisent la fonction d'onde à  $N$  particules  $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n)$  en terme de densité de charge  $\rho(\vec{r})$  [7].

Tout d'abord, la densité de charge peut être écrite comme la somme de fonctions d'onde orthonormales  $\psi_i(\vec{r})$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i^N |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad \text{Eq-II.6}$$

Les  $\psi_i(\vec{r})$  sont les solutions de l'équation de Schrödinger à 1 corps:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) + v_{eff}(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad \text{Eq-II.7}$$

Eq-II.8

$$\text{où } v_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + |q|^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + \frac{\delta E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho} \quad \text{Eq-II.9}$$



Ces trois dernières équations correspondent aux équations de Kohn-Sham dans leur forme canonique. Après intégration, l'énergie du système (Eq-II.5) s'écrit finalement de la manière suivante:

$$E(\rho) = \sum_i^N \varepsilon_i + \int V_{ext}(r)\rho(r)dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 + \int \frac{\delta E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \tag{Eq-II.10}$$

L'approximation de la densité locale (LDA) permet d'estimer les interactions d'échange-corrélation en un bon compromis de précision et de temps de calcul. Dans cette approximation, l'énergie d'échange-corrélation est calculée à partir des résultats connus des interactions à plusieurs corps d'un gaz d'électron homogène. A chaque point d'une molécule ou d'un solide, il existe une densité de charge bien définie. Dans cette approximation, l'énergie d'échange-corrélation correspond à l'intégrale de toutes les contributions de chaque élément de volume du système considéré.

Le calcul autocohérent de la densité de charge, illustré en Figure II.8, est décrit par la procédure suivante :

(i) Données d'entrée: ce sont les coordonnées des atomes, le nombre atomique des éléments considérés. Des pseudo-potentiels sont utilisés pour approximer la forme des potentiels ioniques  $V_{ext}(\mathbf{r})$  induits par les électrons de coeurs (la construction des pseudo-potentiels est décrite en Figure II.9; l'exemple d'un pseudo-potential Troullier-Martin est donné en Figure II.10). La forme des pseudo-potentiels utilisés doit être donnée. La base utilisée durant cette thèse est celle des ondes planes; la précision des calculs est alors contrôlée par un ensemble de paramètres à déterminer: le nombre d'ondes planes utilisées, le nombre de points nécessaire à l'intégration sur la zone de Brillouin, etc.

(ii) Une densité d'états initiale est introduite dans le calcul.

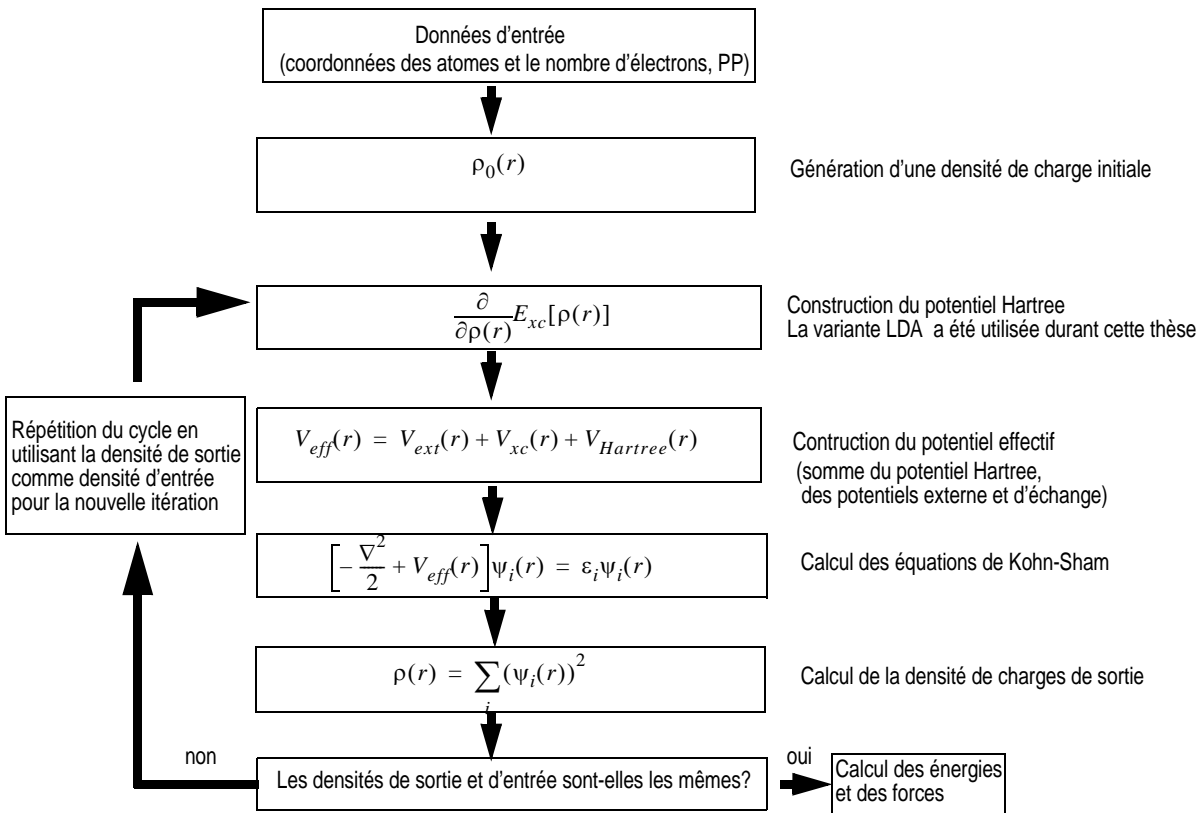
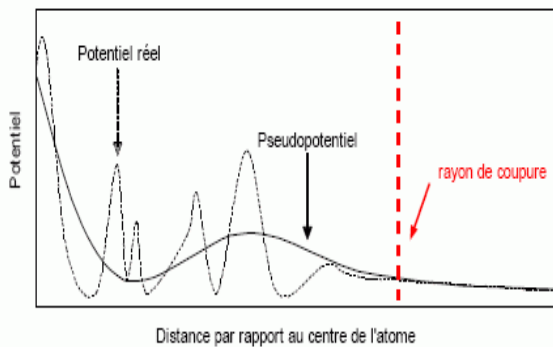
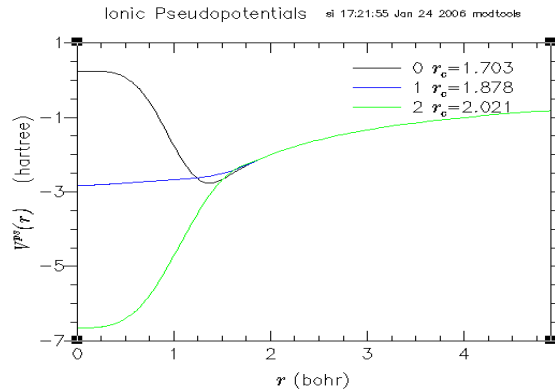


Figure II.8: Organigramme décrivant le fonctionnement d'un simulateur DFT-LDA.



**Figure II.9:** Principe de la construction d'un pseudo-potentiel. Les courbes pointillés et pleine représentent respectivement le potentiel réel et le pseudo-potentiel. Dans la région inférieure au rayon de coupure, le pseudo-potentiel est beaucoup plus lisse que le potentiel réel. Au delà du rayon de coupure, le pseudo-potentiel est idéalement identique au potentiel réel [8].



**Figure II.10:** Les pseudo-potentiels Troullier-Martins sont construits à partir de tableaux de valeurs donnant les fonctions d'ondes relatives à chaque nombre quantique angulaire pour diverses valeurs de  $r$ . Fritz-Haber-Institute (FHI98PP) code: M. Fuchs and M. Scheffler, Comput. Phys. Commun. 119, 67 (1999).

(iii) Les potentiels effectifs d'Hartree et d'échange-corrélation sont construits respectivement à l'aide de l'équation de Poisson et de l'énergie d'échange-corrélation. Ces potentiels sont construits à partir de la densité de porteurs de charge  $\rho(\mathbf{r})$ . De plus amples détails sont fournis dans la littérature [4][5]).

(iv) Le potentiel effectif est construit en assemblant ses trois composants: le potentiel externe, les potentiels d'échange-corrélation et d'Hartree.

(v) Résolution de l'équation Kohn-Sham, soit dans l'espace réciproque ou dans l'espace réel.

(vi) Détermination de la densité de porteurs de charge en sortie.

(vii) Critère de convergence vérifié: Le critère de convergence dépend du calcul de densité. Si la différence entre les densités d'entrée et de sortie est plus grande (en valeur absolue) qu'une valeur prédéterminée, la procédure sera répétée; sinon les énergies seront calculées à partir de la densité finale.

### II.2.4.2. Notions de base de la correction GW

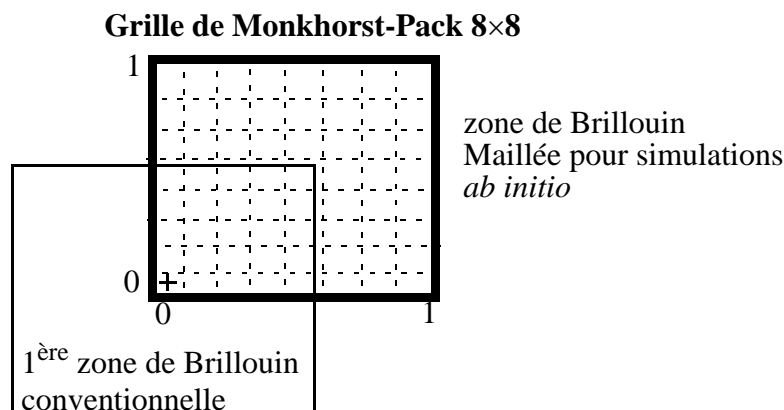
La correction  $GW$  permet de prendre en compte les effets à  $N$  corps [9]. En effet, les répulsions entre les électrons mènent à la déplétion de charges négatives autour de la particule. L'ensemble de l'électron et de son voisinage est écranté de façon à former une "quasiparticule" qui agit faiblement avec les autres "quasiparticules" par un potentiel de Coulomb écranté. La description mathématique des quasiparticules est basée sur la fonction Green  $G$ , dont la détermination requiert la connaissance de la "self-énergie"  $\Sigma$ . Celle-ci décrit les effets d'échange et corrélation au delà de l'approximation du "champ moyen". Par la méthode  $GW$ , cette énergie peut seulement être approximée à l'aide d'une interaction écrantée dynamiquement. Dans cette approximation du premier ordre, la "self-énergie" est exprimée linéairement en terme d'interaction écrantée  $W$ :

$$\Sigma \approx GW \tag{Eq-II.11}$$

En pratique, la correction  $G_0W_0$  est appliquée en post-traitement au schéma DFT [10][11][12] sans auto-cohérence.

### II.2.4.3. Intégration sur la zone de Brillouin

Les calculs de structures de bandes par les méthodes *ab initio* nécessitent l'intégration sur la zone de Brillouin. La fonction d'onde électronique à des points  $k$  proches est presque identique, de sorte qu'il est possible de représenter la fonction d'onde dans une région de l'espace réciproque par celle en un seul point- $k$ . Par conséquent, les intégrations sur toute la zone de Brillouin se réduisent à des sommes sur un nombre limité de points  $k$ . Diverses méthodes d'échantillonnage de la zone de Brillouin existent. Le simulateur Abinit utilise la méthode proposée par Monkhorst et Pack (voir Figure II.11 dans l'exemple d'une zone de Brillouin 2D carré).



**Figure II.11:** Surface d'une zone de Brillouin 2D avec une symétrie cubique maillée avec une grille Monkhorst-Pack 8×8. Le carré indique la zone de Brillouin conventionnelle. Le carré épais représente la zone de Brillouin selon les spécifications des simulations *ab initio*. La forme du maillage doit reproduire les mêmes symétries que la première zone de Brillouin. Dans ce schéma, un seul point  $k$  spécial, représenté par une croix, est introduit par élément de maillage. D'après [90].

### II.2.4.4. Paramétrage de la méthode dans l'étude de la structure de bandes du Si et Ge

Les résultats *ab initio* présentés dans ce travail ont été obtenus via la variante LDA des calculs DFT [13]. Les calculs reposent sur les approximations de la méthode des Pseudo-Potentiels (PP), au travers lesquels les états de coeurs sont éliminés des calculs. Dans ce cadre, nous avons utilisé les pseudo-potentiels de Hartwigsen-Goedecker-Hutter [13] qui utilisent la fonctionnelle échange-corrélation de Cerperley-Adler [14]. Ces pseudo-potentiels incluent des effets relativistes et fournissent une description précise des bandes de valence près du centre de zone (point  $\Gamma$ ), qui est la région critique du transport des trous dans les semi-conducteurs.

Les valeurs des paramètres de maille à l'équilibre ont été calculées en minimisant l'énergie totale d'un ensemble d'atomes constituant la maille élémentaire du matériau étudié. D'autres calculs LDA ont utilisé cette valeur théorique au lieu de la valeur expérimentale [15], produisant un ensemble cohérent de données références dans les conditions de pression nulle. Dans le Si, nous trouvons  $a = 5,387 \text{ \AA}$  et dans le Ge, nous trouvons  $a = 5,585 \text{ \AA}$ . Ces valeurs sont en bon accord avec l'expérience, respectivement  $5,431$  et  $5,685 \text{ \AA}$  [16], avec des erreurs relatives respectives de  $0,75\%$  et  $1,33\%$ .

Il est connu que les gaps calculés avec la méthode LDA sont généralement en dessous des valeurs expérimentales. Cependant, l'accord est amélioré à l'aide de la correction GW d'Hedin [17]. Dans ce travail, les corrections  $G_0W_0$  du Si et du Ge sont calculées sur 19 points de haute symétrie de la zone de Brillouin. Ces corrections sont ajoutées de manière perturbative à la structure de bandes LDA. Toutefois, malgré la correction  $G_0W_0$ , les plus basses bandes de conduction se situent entre  $0.05$  et  $0.2$  eV de la dispersion expérimentale observée [10]. La valeur du gap théorique indirect calculé après correction  $G_0W_0$  est de  $1.076$  eV pour le Si (localisé à  $84\%$  du point  $\Gamma$  sur le chemin  $\Gamma$ -X) et  $0.64$  eV pour le Ge, ce qui est respectivement sous-estimé de  $8\%$  et  $14\%$ . Nos résultats se comparent

favorablement avec d'autres résultats LDA-GW trouvés dans la littérature, notamment dans les comparaisons exhaustives de la revue de Aulburn [10]. Les résultats de  $G_0W_0$ , même correctement paramétrés, ne correspondent pas aux données expérimentales. Des travaux significatifs, sur des axes de recherche tels que les corrections GW et l'exact traitement des termes échanges-corrélations, sont actuellement en progression de manière à améliorer les résultats DFT [10]. Ces dernières approches alternatives sont éloignées du cadre de cette thèse.

La précision des calculs DFT-LDA dépend fortement de la manière dont le problème est maillé numériquement. Nous trouvons une bonne convergence des calculs LDA ( $\Delta E_k \ll 0.01$  eV) en utilisant une base d'approximativement 1300-1500 ondes planes, ce qui correspond à une énergie limite décrite de 22 Hartrees. La Première zone de Brillouin a été maillée sur une grille Monkhorst-Pack (MP) [18]  $6 \times 6 \times 6$  avec une densité de 4 points par maille (c'est à dire de 864 points  $k$ ) pour obtenir la densité de charge (un schéma d'une grille MP  $8 \times 8$  sur une zone de Brillouin 2D est montré en Figure II.11). En ce qui concerne la correction  $G_0W_0$ , un compromis satisfaisant entre convergence numérique et temps de calcul est obtenu pour un intervalle d'énergie allant jusqu'à 8 Hartrees et en utilisant un large nombre d'ondes planes ( $>100$ ) pris en compte dans le calcul de la *self-energie*.

Dans les alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , où  $x$  indique la fraction molaire du Ge, les deux éléments Si et Ge sont présents. Pour cette raison, une cellule de 32 atomes est utilisée. La zone de Brillouin est maillée à partir d'une grille Monkhorst-Pack [18]  $4 \times 4 \times 2$  pour simuler les alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quand  $x \neq \{0; 0.5; 1\}$ . Les atomes sont distribués de manière aléatoire dans une maille agrandie. Enfin, une optimisation structurelle est accomplie. Une interpolation entre les corrections GW du Si et Ge est utilisée afin de corriger le gap. Cette approximation est raisonnable puisque les corrections obtenues du Si et du Ge sont effectivement très proches [10].

Le paramètre de maille expérimental dans le  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  est bien décrit par la loi de Diskmuke [19]. Par cette loi, le paramètre de maille, décrit par la fonction<sup>2</sup>  $a^{\text{exp}} = 5,431 + 0,2x + 0,027x^2$ , est une fonction quadratique de  $x$ . Une expression similaire est obtenue de nos calculs théoriques à différentes fractions molaire  $x$  de Ge:

$$a^{\text{theo}} = 5,387 + 0,1428x + 0,0532x^2 \quad \text{Eq-II.12}$$

#### II.2.4.5. Utilisation de la méthode DFT-LDA

Les simulations *ab initio* DFT-LDA, qui incluent les corrections GW et des effets relativistes, ont été réalisées sur des systèmes de matériaux Si, Ge et SiGe relaxés ainsi que dans les systèmes contraints  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ . Ces simulations complètent les données expérimentales et établissent un ensemble de structures de bandes de référence. Cet ensemble est utilisé ultérieurement pour l'optimisation des paramètres du modèle  $k.p$ . Dans ce but, nous avons utilisé l'approximation  $G_0W_0$  pour corriger le gap, nous augmentons ainsi celui-ci de 0.09 eV pour le Silicium et 0.104 eV pour le Germanium<sup>3</sup>.

A partir de ces simulations, nous avons déterminé les paramètres de couplage du modèle  $k.p$  afin de reproduire au mieux les résultats *ab initio* et les données expérimentales. L'ajustement s'est fait sur les niveaux d'énergie mais aussi sur les masses effectives en fonction de la contrainte appliquée. De manière plus globale, un effort a de même été porté sur l'ajustement de la forme générale des structures de bandes des cristaux relaxés et contraints vis à vis des simulations *ab initio*. Une simple interpolation entre les paramètres de couplage du Si et du Ge est proposée afin de modéliser les alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ .

<sup>3</sup>Dans ce manuscrit, les données corrigées GW sont distinguées des résultats originaux  $G_0W_0$ , les indices sont retirés quand la correction est appliquée.

## II.2.5. Modèles semi-empiriques

Dans le cadre des modèles semi-empiriques (EPM,  $k.p$  et TB), l'Hamiltonien à un électron  $h_e$ , dérivé de l'équation Eq-II.3, peut s'écrire de la manière suivante:

$$h_e = T_e + V \quad \text{Eq-II.13}$$

où  $T_e = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2$  correspond à l'énergie cinétique, avec  $m_0$  la masse de l'électron libre.  $V$  est l'énergie du potentiel ionique.

Les effets des interactions électron-électron et électron-réseau cristallin (phonon) sont englobés dans l'énergie potentielle  $V$ , qui a la même périodicité que le réseau cristallin. A la différence des méthodes de calcul de structures de bandes *ab initio*, ces modèles contiennent des paramètres d'ajustement. Les valeurs de ces coefficients dépendent du matériau étudié.

Les modèles EPM et  $k.p$  développés au cours de cette thèse [20] sont respectivement exposés en Section II.2.5.1. et Section II.2.5.2.. Le modèle TB ne sera pas détaillé dans la suite [21][22][23].

### II.2.5.1. Méthode des Pseudo-potentiels Empiriques (EPM)

Sur ces trois dernières décennies, la méthode EPM avec la correction Spin-Orbite (SO) a souvent été utilisée dans le calcul de structures de bandes de semi-conducteurs relaxés et contraints avec un gap indirect. Cette méthode date de 1959 [24] et utilise des paramètres d'ajustement pour modéliser le potentiel ionique. Dans les années 70, de nombreuses publications témoignent du passage de pseudo-potentiels locaux à des pseudo-potentiels non-locaux avec correction spin-orbite [25][26][27], en particulier la référence de Chelikowski et al. [3]. Des calculs de bandes issus d'EPM locaux ont été appliqués à l'étude de matériaux contraints [28][29]. Enfin, récemment, Rieger *et al.* [30] et Fischetti *et al.* [31] ont étudié les contraintes appliquées dans les dispositifs actuels avec des EPM non-locaux. Les calculs EPM réalisés dans ce manuscrit dans le cas des matériaux semi-conducteurs non contraints se basent sur le modèle de Chelikowsky et al. [3].

Nous rappelons dans ce paragraphe les notions de base de la Méthode EPM local. La méthode résout l'Hamiltonien  $H_e$  (Eq-II.13) sur la base des ondes planes définies par:

$$\langle r|k+G\rangle = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i(k+G)\cdot r} \quad \text{Eq-II.14}$$

$\Omega$  est le volume de la cellule,  $N\Omega$  est le volume du cristal.  $\vec{G}$  est un vecteur de base de l'espace réciproque, tel que  $\vec{G}\cdot\vec{R}_B = 2\pi l$ , où  $\vec{R}_B$  est vecteur de Bravais et  $l$  est entier.

La base des ondes planes étant infinie, une énergie cinétique de coupure  $E_{coup}$  doit être définie afin de réduire le nombre d'ondes planes nécessaire à la résolution de l'Hamiltonien:

$$\frac{\hbar^2}{2m} |k+G|^2 \leq E_{coup} \quad \text{Eq-II.15}$$

La base des ondes planes est complète pour  $E_{coup} \rightarrow \infty$  et orthonormale:

$$\langle k+G|k+G'\rangle = \delta_{GG'} \quad \text{Eq-II.16}$$

Les composantes de la fonction d'onde sur la base des ondes planes correspondent aux transformées de Fourier:

$$|\psi\rangle = \sum c_{k+G} |k+G\rangle \quad \text{Eq-II.17}$$

avec,  $c_{k+G} = \langle k+G|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \int \psi(r) e^{-i(k+G)\cdot r} dr = \tilde{\psi}(k+G)$

Sur cette base d'ondes planes, l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien donne:

$$\langle k+G|T+V|k+G'\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (k+G)^2 \delta_{GG'} + \langle k+G|V|k+G'\rangle \quad \text{Eq-II.18}$$

Les effets des noyaux cristallins et des états de coeurs sur les électrons de valence sont associés au terme  $\langle k+G|V|k+G' \rangle$ . Cependant, le potentiel cristallin montre des variations rapides à courte portée à proximité des noyaux. Par conséquent, un très grand nombre d'ondes planes devrait être aussi utilisé, augmentant aussi la charge de calcul. Afin de pallier cette difficulté, la méthode EPM approxime le potentiel cristallin à un pseudo-potentiel effectif lisse. L'énergie potentielle s'exprime comme suit:

$$V(r) = \sum_{\mu} \sum_{R_B} V_{\mu}(r - R_{\mu} - R_B) \quad \text{Eq-II.19}$$

où  $\mu$  indique le type d'atome considéré dans la cellule élémentaire.  $R_{\mu}$  correspond à la distance des atomes de l'origine de la maille élémentaire.

Après quelques manipulations mathématiques et l'utilisation de la transformée de Fourier nous arrivons à l'expression des éléments de la matrice de l'énergie potentielle:

$$\langle k+G|V(r)|k+G' \rangle = \sum_{\mu} S_{\mu}(G-G') V_{\mu}(G-G') \quad \text{Eq-II.20}$$

où  $S_{\mu}(G-G')$  est le facteur de forme des atomes de type  $\mu$ :

$$S_{\mu}(G) = \sum_{R_i \in \text{cellule}}^{atome \mu} e^{iG \cdot R_i} \quad \text{Eq-II.21}$$

$R_i$  correspond à la position de l'atome  $i$  de type  $\mu$ .

$V_{\mu}(G)$  est la transformée de Fourier du potentiel atomique de l'atome de type  $\mu$ .

$$V_{\mu}(G) = \frac{1}{\Omega} \int V_{\mu}(|\vec{r}|) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad \text{Eq-II.22}$$

si le potentiel est de symétrie sphérique, l'équation Eq-II.22 devient:

$$V_{\mu}(G) = \frac{4\pi}{\Omega} \int r^2 V_{\mu}(r) e^{-iG \cdot r \frac{\sin(G \cdot r)}{G}} dr \quad \text{Eq-II.23}$$

Au final, nous obtenons les valeurs propres  $E(k)$  ainsi que les vecteurs propres du système en résolvant l'équation aux valeurs propres suivante pour chaque vecteur d'onde  $k$  considéré:

$$\sum_{G'} \left\{ -\left( \frac{\hbar^2}{2m} (k+G)^2 - E(k) \right) \delta_{GG'} + \sum_{\mu} S_{\mu}(G-G') V_{\mu}(G-G') \right\} c_{k+G'} = 0 \quad \text{Eq-II.24}$$

Les termes de potentiels  $V(G)$  sont ajustés aux données expérimentales. Pour des raisons de symétrie, seules trois formes de pseudo-potentiel subsistent dans les semi-conducteurs de structure zinc-blende  $V(\sqrt{3})$ ,  $V(\sqrt{8})$  et  $V(\sqrt{11})$ <sup>4</sup>. Les autres pseudo-potentiels s'annulent. Par ailleurs, les pseudo-potentiels des vecteurs de réseau réciproque, tels que  $|G^2| > 11 \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2$ , sont négligés. Les structures de bandes des matériaux non contraints, issues du modèle EPM non local, ont été calculées avec les paramètres de [3].

Dans le cadre de nos calculs de structures de bandes, nous avons utilisé le modèle EPM non local dont les paramètres sont issus de Chelikowsky-Bergstressen [3]. Les valeurs des pseudo-potentiels sont reportées en Tableau II.1. Dans les méthodes EPM non locales, des corrections sont ajoutées à l'Hamiltonien afin de prendre en compte les effets non-locaux ainsi que les effets relativistes (SO) [3].

<sup>4</sup>Dans ce manuscrit, nous prenons la convention de noter les pseudo-potentiels  $V(G)$ , où  $G$  correspond à la norme du vecteur du réseau réciproque en unité  $2\pi/a$ .

**Tableau II.1:** Valeurs des pseudo-potentiels non-locaux pour les semi-conducteurs Si et Ge, issues de Cohen et Bergstressen [3]. Les valeurs des pseudo-potentiels locaux du Si sont également reportées entre parenthèses.

Élément	Facteurs de Forme (Ry)		
	$V(\sqrt{3})$	$V(\sqrt{8})$	$V(\sqrt{11})$
Si	-0.257 (-0.224)	-0.04 (0.055)	0.033 (0.072)
Ge	-0,221	0.019	0.056

### II.2.5.2. Méthode $k.p$ 30 bandes

Dans cette section, nous présentons en détail la méthode  $k.p$  30 bandes qui a été développée durant cette thèse et publiée dans un article [20].

#### II.2.5.2.1. Présentation de la méthode

Dans la méthode  $k.p$ , l'énergie des structures de bandes est obtenue à partir d'un ensemble de paramètres que sont les niveaux d'énergie à  $\Gamma$ , les éléments de matrice de moments et la force du couplage de spin-orbite. La précision du calcul est liée au nombre de bandes d'énergie pris en compte. Les modèles 6 bandes [32], 8 bandes [33] et 14 bandes [34] donnent une description précise des bandes de valence les plus élevées et des bandes de conduction les plus basses, mais échouent à décrire les bandes de conduction du semi-conducteur près du centre  $\Gamma$  de la zone de Brillouin. Les méthodes  $k.p$  de plus bas ordre ont besoin d'un nombre restreint de paramètres (typiquement moins de dix), alors que les méthodes d'ordre supérieur [35][36] requièrent un large nombre de paramètres inconnus. La principale difficulté de la méthode  $k.p$  réside dans l'ajustement de ces paramètres. Une fois ces paramètres fixés, il est assez simple de calculer les structures de bandes à différents points  $k$  de la zone de Brillouin [36]. Aussi, cette méthode de calcul de structures de bandes a rarement été utilisée pour des semi-conducteurs massifs (Si, Ge [35][37][38] et  $\alpha$ -sn [36]).

En relation avec le schéma de la Figure II.7, le formalisme de la méthode  $k.p$  se développe sur la base des fonctions de Bloch  $\langle \vec{r} | u_{n, \vec{k}} \rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ . A partir de l'Hamiltonien Eq-II.13, nous obtenons l'expression suivante:

$$\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right\} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left( E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{Eq-II.25}$$

Remarquons que les fonctions  $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$  sont inconnues, l'Hamiltonien ne peut donc être calculé sur la base des fonctions de Bloch en  $\vec{k}$ . L'une des alternatives est de traiter le problème par une approche perturbative sur la base des fonctions périodiques de Bloch centrées en  $\Gamma$ , telle que:

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n c_{n\vec{k}} \cdot u_{n0}(\vec{r}) \quad \text{Eq-II.26}$$

Les états centrés en  $\Gamma$ , utilisés dans la méthode  $k.p$ , peuvent être associés aux états des électrons libres. Pour que la base des fonctions de Bloch soit complète dans la méthode  $k.p$ , il faut que la base d'ondes planes soit également complète sur chaque famille de vecteurs d'onde. Les états des électrons libres ayant des vecteurs d'onde [000], [111], [200] (en unité  $2\pi/a$ ) sont au nombre de 15, ce qui implique un modèle  $k.p$  15 bandes [35]. En prenant en compte la dégénérescence de spin dans les états et les effets de spin de spin-orbite, nous obtenons une méthode  $k.p$  30 bandes.

En développant l'Hamiltonien Eq-II.13 sur cette base, nous obtenons l'expression suivante:

$$\sum_n \left\{ \left\langle u_{n,0} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right| u_{n,0} \right\rangle + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_n(\vec{k}) \right\} \delta_{n,n'} + \frac{\hbar k}{m_0} \cdot \langle u_{n0} | p | u_{n'0} \rangle \left\} c_{n\vec{k}} = 0 \quad \text{Eq-II.27}$$

- Le premier terme de la somme est associé aux éléments de matrice de l'expression de l'Hamiltonien en  $\Gamma$  tel que:

$$H_0|u_{n,0}\rangle = \left( \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) |u_{n,0}\rangle = E_n^0 |u_{n,0}\rangle \quad \text{Eq-II.28}$$

où  $E_n^0$  sont les valeurs propres à  $\Gamma$ .  $p = -i\vec{\nabla}$  est l'opérateur associé à l'impulsion. Les 15 états  $\Gamma$  ( $|u_{n,0}\rangle$  dans l'équation Eq-II.28) du groupe  $O_h$  déterminés par Cardona et Pollak [35] ont été le point de départ du développement de la méthode  $k.p$  30 bandes. Ces états (par exemple,  $\Gamma_{15}, \Gamma_{25',l}, \dots$ ) sont localisés dans l'espace réciproque sur la Figure II.3.

- Les seconds termes non diagonaux en  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  de l'équation ne sont pas directement calculables<sup>5</sup>. Ces éléments de matrice sont ajustés dans la méthode  $k.p$ . Ceux-ci sont liés au couplage interbandes et dépendent du matériau étudié.
- Les valeurs propres de la méthodes  $k.p$  30 bandes doivent être calculées pour chaque vecteur d'onde  $k$  considéré.

Dans le cas du modèle  $k.p$  30 bandes, le nombre d'éléments non diagonaux indépendants Eq-II.27 peut être réduit à 10 dans le Si et le Ge en utilisant les règles de sélection de la théorie des groupes [35][39]. Le travail de cette thèse a consisté à introduire les termes de couplage SO [32][36] menant au formalisme du  $k.p$  30 bandes. L'approche considérée n'utilise pas de paramètres normalisés du type Luttinger, *a contrario* des modèles de plus bas ordre, tels que la méthode  $k.p$  14 bandes de la Réf. [34] et le modèle 20 bandes de la Réf.[40].

Les matrices du  $k.p$  30 bandes pour les matériaux relaxés peuvent s'écrire de la manière suivante<sup>6</sup>:

$$H_{k \cdot p}^{30} = \begin{bmatrix} H_{\Gamma_{25''}}^{2 \times 2} & P'' H_k^{2 \times 6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P'' H_k^{2 \times 6} \\ & H_{\Gamma_{25''}}^{6 \times 6} & R' H_k^{6 \times 4} & 0 & 0 & Q' H_k^{6 \times 6} & P' H_k^{6 \times 2} & H_{\Gamma_{25',l}}^{SO} \\ & & H_{\Gamma_{12'}}^{4 \times 4} & 0 & 0 & 0 & 0 & R H_k^{4 \times 6} \\ & & & H_{\Gamma_{1''}}^{2 \times 2} & 0 & T H_k^{2 \times 6} & 0 & 0 \\ & & & & H_{\Gamma_{1'l}}^{2 \times 2} & T' H_k^{2 \times 6} & 0 & 0 \\ & & & & & H_{\Gamma_{15}}^{6 \times 6} & 0 & Q H_k^{6 \times 6} \\ & & & & & & H_{\Gamma_{2'l}}^{2 \times 2} & P H_k^{2 \times 6} \\ & & & & & & & H_{\Gamma_{25',l}}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.29}$$

<sup>5</sup>Le nom du modèle provient du terme  $\vec{k} \cdot \vec{p}$ .

<sup>6</sup>Pour chaque élément  $H$  de la matrice  $H_{k \cdot p}^{30}$ , les indices se réfèrent aux états concernés en  $\Gamma$  (Eq-II.30) ou soulignent une dépendance aux composantes du vecteur d'onde  $k$  considéré (Eq-II.31), les exposants reportent les dimensions de l'élément.



où les blocs diagonaux sont:

$$\begin{aligned}
 H_{\Gamma}^{6 \times 6} &= \text{diag}\left(E_{\Gamma} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\right) + H_{\Gamma}^{SO} \\
 H_{\Gamma}^{4 \times 4} &= \text{diag}\left(E_{\Gamma} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\right) \\
 H_{\Gamma}^{2 \times 2} &= \text{diag}\left(E_{\Gamma} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\right)
 \end{aligned}
 \tag{Eq-II.30}$$

où  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  et  $\text{diag}(\dots)$  représente la matrice diagonale.  $E_{\Gamma}$  sont les valeurs propres de l'état en  $\Gamma$ , listées en Tableau II.2. Les couplages ( $P$ ,  $P'$ ,  $P''$ , etc ...) sont listés en Tableau II.3.  $H_{\Gamma}^{SO}$  est la matrice SO qui inclut les paramètres de couplages SO listés en Tableau II.3.

**Tableau II.2:** Valeurs propres et couplages spin-orbite des états centrés en  $\Gamma$ . La notation est issue de [35]. La valeur de  $\Gamma_{25'}$  est arbitrairement mise à zéro.  $\Delta$  symbolise les décalages induits par les interactions spin-orbite. Toutes les énergies sont exprimées en [eV]. Les états sont localisés dans l'espace réciproque en Figure II.3.

[eV]	Si			Ge			Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>
	Expt.	EPM <sup>a</sup>	$G_0W_0^a$	Expt.	EPM <sup>a</sup>	$G_0W_0^a$	$k.p^e$
$\Gamma_{1'}^l$	-12.4±0.6 <sup>b</sup> ; -12.5±0.6 <sup>c</sup> ; -11.2 <sup>i</sup> -11.4 <sup>i</sup>	-12.36	-11.489	-12.6±0.3 <sup>b</sup> ; -12.9±0.2 <sup>h</sup> ;	-12.624	-12.638	-12.7-0.18x
$\Delta_{25'}^l$	0.044 <sup>c</sup>	0.044	0.0499	0.296	0.297	0.312	0.044+0.2x+0.052x <sup>2</sup>
$\Gamma_{15}$	3.4 <sup>c</sup> ; 3.35 <sup>f</sup> ; 3.05 <sup>d</sup>	3.406	3.204	3.006 <sup>i</sup> ; 3.206 <sup>i</sup> ; 3.16 <sup>g</sup> ; 3.25 <sup>e</sup>	3.279	3.1	3.335-0.222x
$\Delta_{15}$	0.04 <sup>c</sup>	0.037	0.037	0.200 <sup>c</sup>	0.205	0.227	0.033+0.157x
$\Gamma_{2'}^l$	4.15 <sup>i</sup> ; 4.1 <sup>d</sup> ; 4.185 <sup>c</sup> ; 4.21 <sup>i</sup>	4.062	3.96	0.89 <sup>h</sup> ; 0.90 <sup>i</sup>	0.861	0.715	4.15-3.26x
$\Gamma_{1''}$		7.561	8.308		6.072	6.82	8.4-1.6x
$\Gamma_{12'}$		9.371	8.451		8.665	9.925	8.54+1.76x
$\Gamma_{25'}^u$		12.203	11.41		11.334	11.193	11.7-0.34x
$\Delta_{25'}^u$		0.009	0.012		0.0558	0.029	0.012+0.03x
$\Gamma_{2''}^u$		13.3	15.41		12.97	14.086	15.8-1.8x

<sup>a</sup> Calculs effectués durant cette thèse.

<sup>b</sup> Présentés en Réf.[3].

<sup>c</sup> Présentés en Réf.[16].

<sup>d</sup> Présentés en Réf.[41].

<sup>e</sup> Utilisés dans le modèle optimisé du  $k.p$  30 bandes.

<sup>f</sup> Présentés en Réf.[42]

<sup>g</sup> Présentés en Réf.[43]

<sup>h</sup> Présentés en Réf.[11]

<sup>i</sup> Présentés en Réf.[10].

**Tableau II.3:** Eléments de matrice des moments linéaires  $p$  [a.u.] utilisés dans le modèle  $k.p$  proposé. Les symboles du groupe  $O^h$  sont pris de la référence [35]. Les autres symboles pour le  $Si_{1-x}Ge_x$  ( $0 < x < 1$ ) appartiennent au groupe  $T^d$ .

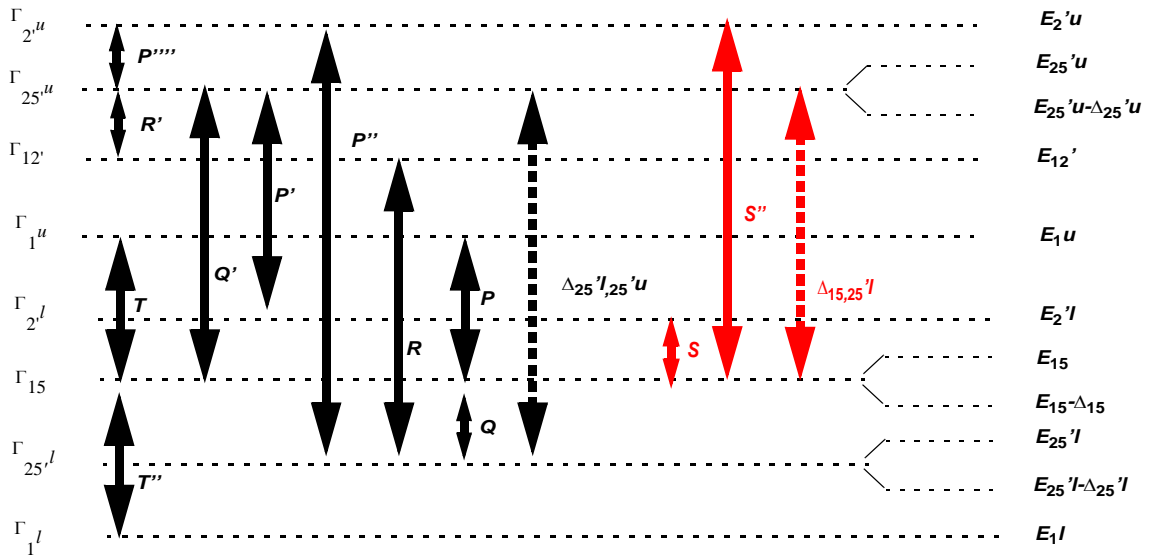
Eléments de matrice [a.u.]	$Si_{1-x}Ge_x$
$P \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'}   p   \Gamma_{2'} \rangle$	1.22-0.034x
$Q \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'}   p   \Gamma_{15} \rangle$	1.0679+0.0068x
$R \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'}   p   \Gamma_{12'} \rangle$	0.5427+0.0884x
$P'' \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'}   p   \Gamma_{2'} u \rangle$	0.156-0.0081x
$P' \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'} u   p   \Gamma_{2'} \rangle$	-0.008+0.078x-0.05x <sup>2</sup>
$Q' \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'} u   p   \Gamma_{15} \rangle$	-0.6555-0.1052x
$R' \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'} u   p   \Gamma_{12'} \rangle$	0.8342-0.0126x
$P''' \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{25'} u   p   \Gamma_{2'} u \rangle$	1.425-0.0263x
$T \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{1'} u   p   \Gamma_{15} \rangle$	1.166-0.0247x-0.04x <sup>2</sup>
$T' \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{1'}   p   \Gamma_{15} \rangle$	0.29+0.08x
$S \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{15}   p   \Gamma_{2'} \rangle$	-i0.1x(1-x)
$S' \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle \Gamma_{15}   p   \Gamma_{2'} u \rangle$	i0.3x(1-x)
<b>Couplage SO [eV]</b>	<b><math>Si_{1-x}Ge_x</math></b>
$\Delta_{\Gamma_{25'} \Gamma_{25'} u}$	0.022+0.198x
$\Delta_{\Gamma_{15} \Gamma_{25'} l}$	0.04x-0.04x <sup>2</sup>

Les blocs  $k.p$  différents de zéro s'écrivent de la manière suivante:

$$\begin{aligned}
 H_{\Gamma}^{SO} &= \frac{\Delta_{\Gamma}}{3} \begin{bmatrix} -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & -1 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -1 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & -1 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\
 H_k^{6 \times 6} &= \begin{bmatrix} 0 & k_z & k_y & 0 & 0 & 0 \\ k_z & 0 & k_x & 0 & 0 & 0 \\ k_y & k_x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k_z & k_y \\ 0 & 0 & 0 & k_z & 0 & k_x \\ 0 & 0 & 0 & k_y & k_x & 0 \end{bmatrix} \\
 H_k^{4 \times 6} &= \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}k_y & -\sqrt{3}k_z & 0 & 0 & 0 \\ 2k_x & -k_y & -k_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}k_y & -\sqrt{3}k_z \\ 0 & 0 & 0 & 2k_x & -k_y & -k_z \end{bmatrix} \\
 H_k^{2 \times 6} &= \begin{bmatrix} k_x & k_y & k_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_x & k_y & k_z \end{bmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{Eq-II.31}$$

Les termes de couplage sont pris en compte entre les états  $\Gamma_{25''u}$  et  $\Gamma_{12'}$ . Ces couplages ont été ajustés de façon à conserver la symétrie par renversement du temps au point de haute symétrie X.

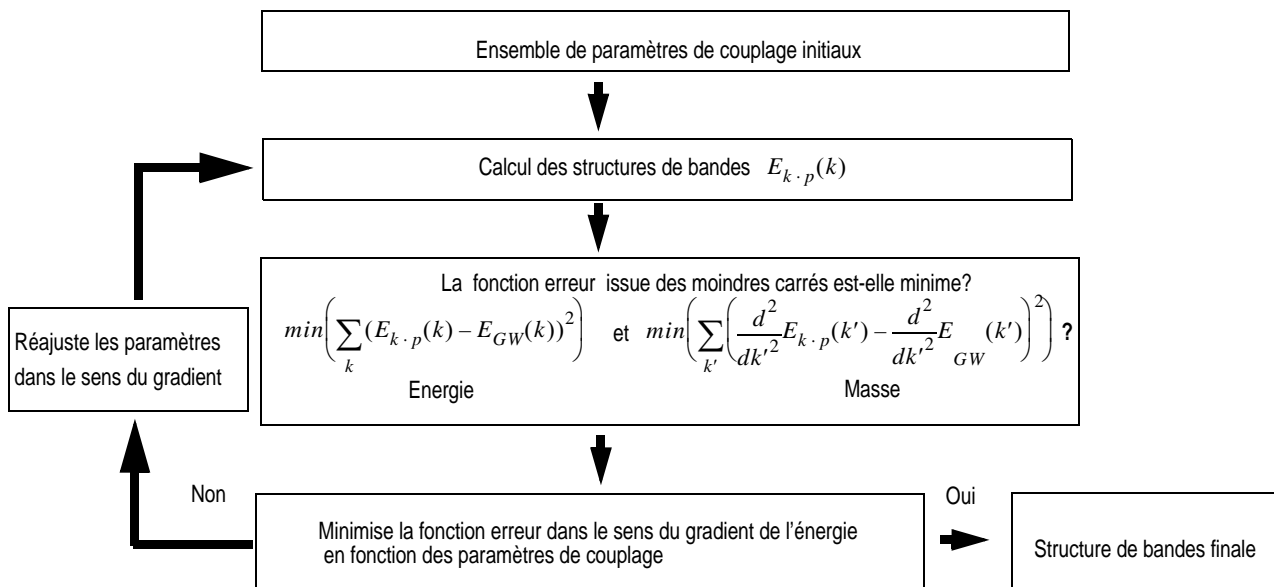
Dans les matériaux Si et Ge, le modèle  $k.p$  30 bandes dépend donc de sept valeurs propres centrées en  $\Gamma$ , quatre coefficients de couplage SO, et de dix éléments de matrice. Ces variables sont synthétisées en Figure II.12. Nous avons également reportés dans cette figure, les coefficients de couplages supplémentaires des alliages SiGe.



**Figure II.12:** Les termes d'interaction  $k.p$  et Spin-Orbite entre les états du groupe  $O^h$  pris en compte dans l'Hamiltonien du  $k.p$  30 bandes dans les matériaux relaxés sont représentés par des flèches noires. Les termes d'interaction supplémentaires  $k.p$  et Spin-Orbite entre les états du groupe  $T^d$  des alliages relaxés SiGe en comparaison du groupe  $O^h$  sont symbolisés par des flèches rouges. Les énergies résultantes sont notées à droite.

### II.2.5.2.2. Procédure d'ajustement des paramètres du modèle $k.p$

Le développement du modèle  $k.p$  proposé, s'établit sur l'ajustement de ces coefficients sur les données expérimentales électroniques du Si, Ge et des alliages SiGe. Cependant, les informations expérimentales sont insuffisantes sur les énergies de la structure de bandes pour déterminer précisément tous les paramètres  $k.p$ , particulièrement à haute énergie ( $> 5\text{eV}$ ). Pour cette raison, une approche mixte a été utilisée tenant compte d'une part, des données expérimentales disponibles et d'autre part, des résultats *ab initio*. Ces coefficients sont ajustés en utilisant une optimisation gradient-conjugué. Une convergence satisfaisante est déterminée à l'aide d'une fonction erreur des moindres carrés (voir Figure II.13) entre les valeurs propres des méthodes  $k.p$  et  $GW$ . Cette optimisation s'est faite sur un ensemble dense de points  $k$  dans la zone de Brillouin. Une attention particulière a été portée près de la région du point  $\Gamma$  et des minima des bandes de conduction afin d'obtenir une description précise des masses effectives de courbure et des paramètres de Luttinger. L'optimisation de la méthode  $k.p$  a également été réalisée sur les bandes de haute énergie en comparaison des simulations *ab initio*. En effet, l'intégralité de la structure de bandes des matériaux non contraints doit être correctement reproduite dans la perspective du développement de la méthode  $k.p$  incluant la contrainte (Section II.4.)<sup>7</sup>. Par cette optimisation sur l'ensemble de la structure, nous tentons aussi d'améliorer l'ajustement effectué par Cardona et Pollak [35].



**Figure II.13:** Organigramme décrivant le fonctionnement d'un gradient-conjugué dans l'optimisation de la méthode  $k.p$  sur un ensemble d'énergies et de masses effectives en comparaison des structures de bandes  $GW$ .

Suivant Pollak *et al.* [36], la valeur du couplage entre les bandes  $\Gamma_{25''}$  et  $\Gamma_{25'}$  est déterminée en imposant une dégénérescence sur les plus basses bandes de valence en  $X$ , liée à la symétrie par renversement du temps<sup>8</sup>. Les décalages  $\Delta_{25'} = 44 \text{ meV}$  pour le Si et  $\Delta_{25'} = 290 \text{ meV}$  pour le Ge sont connus expérimentalement, tandis que  $\Delta_{25''}$  et  $\Delta_{15}$  sont obtenus à partir des simulations *ab initio* Tableau II.2. Les valeurs propres centrées en  $\Gamma$  et les paramètres de couplage, ainsi obtenus, sont listés en Tableau II.2 et Tableau II.3. Deux ensembles de paramètres sont actuellement publiés pour du Si

<sup>7</sup>L'ajustement des potentiels de déformation, qui sont des paramètres introduits dans le modèle  $k.p$  dépendant de la déformation, nécessite une description correcte de la structure de bandes du matériau non contraint dans son intégralité (Section II.4.).

<sup>8</sup>En plus des opérations de symétrie des groupes d'espace, l'Hamiltonien d'un cristal centrosymétrique isolé montre une symétrie par renversement du temps.

(Réf. [37] et Réf. [38]) et du Ge (Réf. [37]), basés sur le travail de Cardona et Pollak [35]. Bien que l'ensemble des paramètres de Cardona et Pollak fournisse une description précise des principaux minima de bandes de conduction et des maxima des bandes de valence, leur travail ne prend pas en compte les couplages spin-orbite (SO). Ce couplage a été introduit dans le Si et le Ge avec un nouvel ensemble de paramètres par Richard et al. [37]. Malheureusement, dans le Ge, ce nouvel ensemble n'améliore pas sensiblement les paramètres de Cardona et Pollak puisque les bandes de valence ne rejoignent pas les bords de zone avec une dérivée (moyenne) nulle comme requis par la symétrie du cristal. D'autre part, les minima des vallées L sont éloignés des bords de zone. Ces inconvénients rendent ce modèle inapproprié à l'étude des propriétés de transport dans les nanostructures. Ceci n'est pas le cas avec les paramètres de Cardona et Pollak [35], de même avec le modèle proposé durant cette thèse. En comparaison avec les paramètres publiés ultérieurement, notre stratégie d'optimisation basée sur une référence *ab initio* apporte de nouvelles informations, notamment à haute énergie. De plus, cette procédure améliore les vitesses de groupe des premiers et seconds minima des bandes de conduction. Ainsi, les éléments de matrice, listés en Tableau II.3, sont différents de ceux de Cardona et Pollak [35]. Les principales différences<sup>9</sup> proviennent du fait que les valeurs propres à  $\Gamma$ , utilisées dans le modèle  $k.p$ , diffèrent à haute énergie (sur la base des simulations *ab initio* GW) et que les effets non-locaux ont été pris en compte dans le modèle proposé. Comme décrit dans l'Eq-II.27, l'Hamiltonien  $k.p$  ne prend pas en compte les effets non-locaux de l'opérateur  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ <sup>10</sup>. Dans ce travail, les effets non locaux ont été "renormalisés" dans les paramètres  $k.p$ . Dans le Ge, où ces effets sont prédominants [3], certains coefficients (par exemple  $p = 1,186$  a.u.) sont plus petits que ceux de Cardona et Pollak ( $p = 1,36$  a.u.)[35].

Dans le cadre des simulations des alliages SiGe, l'approximation du cristal virtuel a été étendue aux résultats du modèle  $k.p$  30 bandes<sup>11</sup>. Une interpolation quadratique entre les paramètres Si et Ge est proposée en Tableau II.2 et Tableau II.3. En raison de la brisure de la centrosymétrie de la maille élémentaire des alliages SiGe, ces derniers n'appartiennent plus au groupe  $O^h$ . Un couplage supplémentaire SO [44] et deux couplages purement imaginaires du groupe  $T^d$  ont été introduits (voir Figure II.12). Les éléments de matrice associés à ces couplages sont reportés en Tableau II.3. Les coefficients ont été ajustés afin de reproduire les structures de bandes  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  des méthodes *ab initio* GW pour différentes fractions molaires  $x$  de Ge. Le modèle  $k.p$  prédit un croisement entre les minima des vallées  $\Delta$  et  $L$  à  $x=0.84$ , ce qui est cohérent avec les données expérimentales [45].

### II.2.5.3. Avantages et inconvénients des méthodes EPM et $k.p$

En terme de calculs numériques, chacune des méthodes EPM et  $k.p$  présente des avantages (+) et des inconvénients (-) que nous mentionnons dans cette section:

Méthode EPM:

- Convergence lente au regard de la taille de la matrice à diagonaliser. Un grand nombre d'ondes planes est nécessaires dans la description de la structure de bandes. Pour une précision satisfaisante sur la base des ondes planes (000), (111), (200), (220), (311), (222), (400), (311) et (224) la matrice est de taille (274,274) en tenant compte de la dégénérescence de spin.

<sup>9</sup>Pour l'état  $\Gamma_{12}$ , nous utilisons, dans la méthode  $k.p$  développée, les fonctions  $v_{1-}$  et  $v_{2-}$  comme dans la Réf. [32], tandis que Cardona et al. [35] utilisent  $\frac{1}{\sqrt{2}}(v_{1-} - v_{2-})$  et  $\frac{1}{\sqrt{2}}(v_{1-} + v_{2-})$ . Les coefficients  $R$  et  $R'$  restent plus petits de  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ .

<sup>10</sup>Contrairement à la méthode EPM non-local (voir Section II.2.5.1.).

<sup>11</sup>Généralement, la symétrie d'un potentiel ionique d'un alliage ne présente pas d'invariance par translation. L'approximation du cristal virtuel remplace le potentiel réel par un potentiel périodique. Cette approximation revient à modéliser l'alliage par un cristal virtuel d'atomes dont le potentiel est calculé par combinaison des potentiels ioniques des éléments chimiques constituant l'alliage (potentiel estimé dans un cristal pur de l'élément chimique considéré).

+ La précision peut être améliorée en augmentant le nombre d'ondes planes nécessaire à la description de la structure de bandes.

+ Implémentation et utilisation relativement simples de la méthode EPM. Les principales opérations sont réalisées à l'aide de transformées de Fourier.

- La méthode EPM non local [3], demande un effort de calcul considérable afin d'évaluer des fonctions transcendantes (par exemple, les fonctions de Bessel).

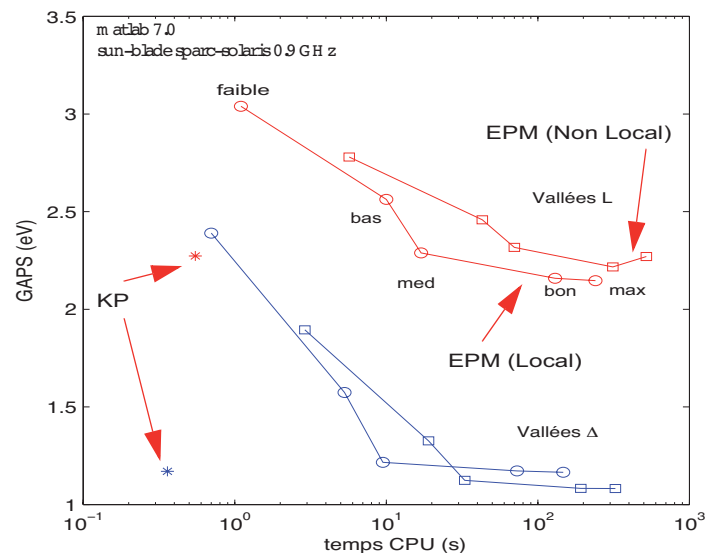
Méthode  $k.p$ :

+ La convergence est atteinte rapidement en rapport avec la taille de la matrice à diagonaliser. Dans le cas du modèle  $k.p$  30 bandes, la matrice à diagonaliser est de taille (30, 30).

+ Les termes du modèle  $k.p$  sont des sommes algébriques de termes quadratiques en  $k$ . A partir d'un modèle  $k.p$  de bas ordre, des formules analytiques résolubles peuvent être trouvées pour calculer la masse effective des porteurs de charge ou encore calculer les premières bandes de valence (dans le cadre du modèle  $k.p$  6 bandes).

- Pour intégrer des bandes supplémentaires dans le calcul de la matrice, des couplages interbandes supplémentaires  $k.p$  doivent être analysés par la théorie des groupes et ajustés.

Afin d'illustrer ces propos, nous montrons en Figure II.14 le temps de calcul mis par les modèles semi-empiriques, EPM (local [3] et non local [20]) et  $k.p$  30 bandes [20], pour calculer les gaps entre la bande hh et les vallées de conduction  $\Delta$  et  $L$  du Si. Plusieurs conditions de convergence ont été prises en compte dans les simulations EPM, en variant le nombre d'ondes planes. Notons que la solution EPM la moins aboutie (15 ondes planes prises en compte) donne un gap  $\Gamma-\Delta$ , loin de la valeur expérimentale (2.4 au lieu de 1.17). Par ailleurs, nous observons que la méthode  $k.p$  30 bandes est plus rapide d'un ordre de grandeur que les méthodes EPM, pour une précision équivalente aux résultats les plus aboutis des méthodes EPM<sup>12</sup>.



**Figure II.14:** Valeurs des gaps du Si entre la vallée hh et les vallées  $\Delta$  et  $L$ , en fonction du temps de calcul requis pour le calcul de structures de bandes. Ces valeurs ont été calculées à l'aide des modèles semi-empiriques EPM (local [3] et non-local [20]) et  $k.p$  30 bandes [20]. Les calculs de gap par les méthodes EPM ont été effectués en variant le nombre d'ondes planes pris en compte dans la base (le nombre est de 137 pour la précision médium).

Ceci a pour effet de varier la précision des calculs. Le modèle  $k.p$  30 bandes est plus rapide d'un ordre de grandeur par rapport aux modèles EPM. La principale cause de cette différence provient de la taille de la matrice à diagonaliser dans chaque méthode.

## II.2.6. Modèle de l'approximation de la masse effective

Considérons une bande  $n$  comportant un extremum de bande au point  $\vec{k}_0$ . Si on effectue un développement de  $E_n(\vec{k})$  autour du point  $\vec{k}_0$ , sachant que  $E_n$  présente un extremum en  $\vec{k}_0$ , on obtient:

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \quad \text{Eq-II.32}$$

où  $m^*$  est correspond au tenseur de la masse effective. Cette notion apparaît par identification après le développement.

L'expression Eq-II.32 est analogue à celle des particules libres. A l'extremum de bande, la particule peut donc être traitée comme une particule libre mais de masse effective  $m^*$ . Toutefois, cette description ne concerne que les particules proches de l'extremum.

Remarquons que l'approche du modèle  $\mathbf{k}, \mathbf{p}$  permet de clarifier le concept de masse effective. L'Hamiltonien de la méthode peut se décomposer en deux parties:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) \text{ et } H_1 = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \quad \text{Eq-II.33}$$

où  $P = -i\vec{\nabla}$  est l'opérateur impulsion et  $m_0$  est la masse des électrons libres.

Notons que  $H_1$  devient progressivement petit à mesure que  $k$  diminue. Par conséquent, cette partie peut être traitée en perturbation sur la base des fonctions de Bloch en  $\vec{k} = 0$ .  $H_0$  est l'Hamiltonien non perturbé, dont les valeurs propres en  $\vec{k} = 0$  sont connues (voir Eq-II.28). En développant jusqu'au second ordre, nous obtenons l'expression de l'énergie suivante:

$$E_{n\vec{k}} = \langle u_{n\vec{k}} | \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k})^2 | u_{n\vec{k}} \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n\vec{k}} | \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'\vec{k}} \rangle|^2}{E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}}} \quad \text{Eq-II.34}$$

nous trouvons finalement que:

$$E_{n\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m_0} k^2 \delta_{\alpha\beta} + \left( \frac{\hbar^2}{m_0} \right)^2 \sum_{\alpha} \sum_{\beta} k_{\alpha} k_{\beta} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n\vec{k}} | p_{\alpha} | u_{n'\vec{k}} \rangle \langle u_{n'\vec{k}} | p_{\beta} | u_{n\vec{k}} \rangle}{E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}}} \quad \text{Eq-II.35}$$

avec  $\alpha \beta$  associés à  $x y$  et  $z$ .  $E_{n\vec{k}}$  est l'énergie propre.

Ce qui nous permet, en faisant le lien avec la masse effective, de trouver un *tenseur de masse effective*  $m^*$  en fonction de la structure de bandes, tel que:

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{m_0} \left\{ \delta_{\alpha\beta} + \left( \frac{2}{m_0} \right) \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n\vec{k}} | p_{\alpha} | u_{n'\vec{k}} \rangle \langle u_{n'\vec{k}} | p_{\beta} | u_{n\vec{k}} \rangle}{E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}}} \right\} \quad \text{Eq-II.36}$$

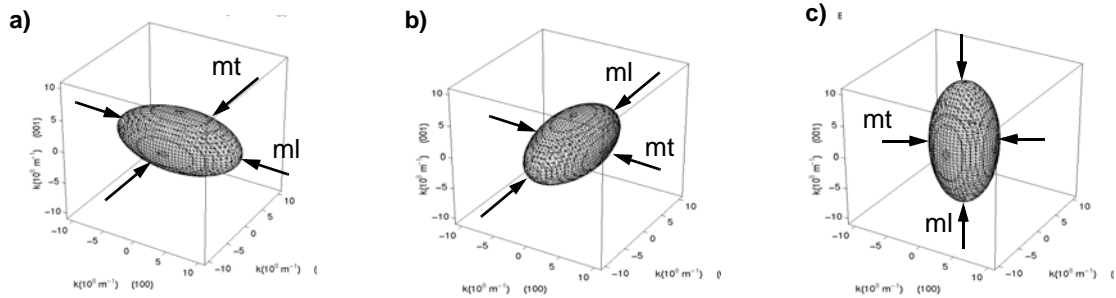
La masse effective est une notion essentielle du transport des porteurs. En effet, plus la masse effective des porteurs de charge est lourde plus la valeur de leur mobilité sera faible selon le modèle de Drude [1] (voir chapitre I, Section I.1.3.).

D'un point de vue pratique les masses, appelée masses de courbure, sont généralement calculées à partir de la relation de dispersion. Les surfaces isoénergies des vallées  $\Delta$  sont représentées en Figure II.15 pour le Silicium relaxé. De fait, dans les semi-conducteurs de type IV, la forme des

<sup>12</sup>Il est également notable que les temps de simulations *ab initio* sont incommensurablement plus longs que les temps de calcul des méthodes semi-empiriques. Un ratio respectif de 1:10:30 est trouvé entre les temps de calculs des méthodes  $k.p$ , EPM et *ab initio*.

vallées de conduction peut être décrite par une ellipsoïde dont l'équation est la suivante:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{k_l^2}{m_l} + \frac{k_t^2}{m_t} \right]$$



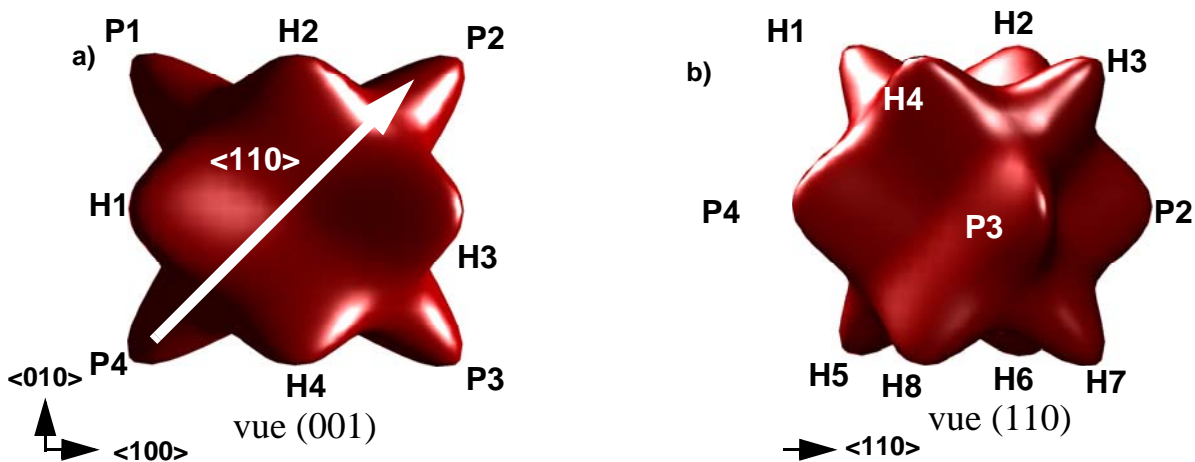
**Figure II.15:** Surfaces isoénergies ( $E-E_0=38\text{meV}$ ) autour des minima de la bande de conduction dans les directions **a)** X, **b)** Y et **c)** Z représentées dans l'espace réciproque pour le Silicium.

Les masses effectives transverses  $m_t$  et longitudinales  $m_l$  des électrons dans les vallées  $\Delta$  et  $L$  sont obtenues de la dérivée seconde de la bande de conduction à partir des minima de bandes. Ces dérivées se font le long de l'axe de révolution et dans le plan perpendiculaire à l'ellipsoïde:

$$\frac{1}{m_l(k)} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k_l^2} E(k_l) \tag{Eq-II.37}$$

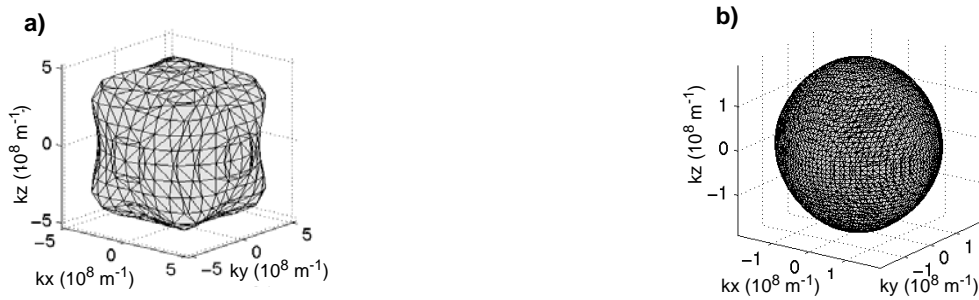
$$\frac{1}{m_t(k)} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k_t^2} E(k_t) \tag{Eq-II.38}$$

La Figure II.16 montre la surface isoénergétique à 25 meV de la bande des trous lourds hh sans contrainte (vue de dessus a) et vue de côté b)). Ces contours sont caractérisés par 12 branches de basse énergie. La direction cristallographique  $\langle 110 \rangle$  est indiquée par des flèches. Sans contrainte, les huit branches dans le plan (001) P1...P4 et les quatre branches hors-plan H1...H8 sont peuplées de manière équivalente. La Figure II.17 montre les surfaces isoénergétiques des bandes de valence lh et so. Les formes des bandes de valence sont fortement anisotropes, notamment pour la bande des trous lourds (nous verrons que cette bande est particulièrement importante dans l'étude des propriétés de transport des trous puisque c'est la plus élevée en énergie, donc la plus occupée).



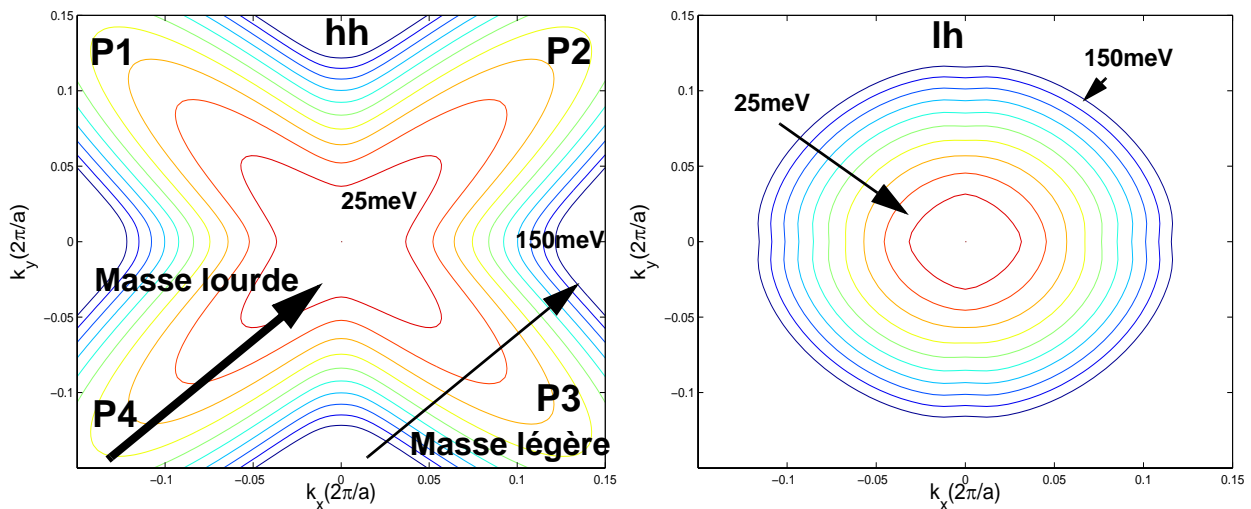
**Figure II.16:** surface isoénergétique à 25 meV de la première bande de valence hh dans le cadre du Silicium non contraint: **a)** vue de dessus, plan (001). La flèche indique la direction cristallographique  $\langle 110 \rangle$ ; **b)** vue de côté, plan (110). La première bande de valence présente une large anisotropie même à basse énergie.





**Figure II.17:** Surfaces isoénergies ( $E-E_0=50\text{meV}$ ) autour du maximum de la bande de valence, représentées dans l'espace réciproque pour le Silicium: **a)** trous légers, **b)** trous spin-orbite.

Cependant, comme observé sur la Figure II.18, les branches de la bande hh ne sont pas équivalentes d'un point de vue du transport. Cette figure montre les contours isoénergies 2D espacés de  $25\text{meV}$  dans le plan du transport  $k_z = 0 \text{ m}^{-1}$ . Il est clair que les branches P1 et P3 ont des courbures plus fortes le long de la direction  $\langle 110 \rangle$ . Ainsi, les porteurs de charge localisés dans les branches P1 et P3 ont une masse de courbure (obtenue de la dérivée seconde de la relation de dispersion en  $\Gamma$ ) plus légère que ceux des branches P2 et P4. Les porteurs de charge situés dans les branches hors-plan ont une masse effective intermédiaire.



**Figure II.18:** Contours isoénergies, séparés de  $25\text{meV}$  dans le plan (001) à  $k_z=0 \text{ m}^{-1}$ , des bandes de valence les plus basses en énergie dans le Silicium relaxé: **a)** bande des trous lourds hh; **b)** bande des trous légers lh. Pour la bande hh, la séparation des isocontours montre nettement la haute courbure dans les branches P1, P3 ( faible masse effective) et la faible courbure dans les branches P2, P4 (haute masse effective). En ce qui concerne la bande lh, les courbes sont isotropes et circulaires. La courbure de cette bande est forte, témoignant d'une masse légère des trous sur cette bande.

Par ailleurs, les courbures de bande dans les bandes de valence sont usuellement analysées par le biais de 3 paramètres Luttinger  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  et  $\gamma_3$ . Ceux-ci sont déduits de l'Hamiltonien  $k.p$  6 bandes Luttinger-Kohn  $H_{lutt}$  [46][47]:

$$H_{lutt} = \begin{bmatrix} P_k + Q_k & -S_k & R_k & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_k & \sqrt{2}R_k \\ -S_k & P_k - Q_k & 0 & R_k & -\sqrt{2}Q_k & \sqrt{\frac{3}{2}}S_k \\ R_k & 0 & P_k - Q_k & S_k & \sqrt{\frac{3}{2}}S_k & \sqrt{2}Q_k \\ 0 & R_k & S_k & P_k + Q_k & -\sqrt{2}R_k & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_k \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S_k & -\sqrt{2}Q_k & \sqrt{\frac{3}{2}}S_k & -\sqrt{2}R_k & P_k + \Delta & 0 \\ \sqrt{2}R_k & \sqrt{\frac{3}{2}}S_k & \sqrt{2}Q_k & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_k & 0 & P_k + \Delta \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.39}$$

$$\begin{aligned} P_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\sqrt{3}\left[-\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3k_xk_y\right] \\ S_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)k_z \end{aligned} \quad \text{Eq-II.40}$$

Les masses effectives<sup>13</sup> sont liées aux paramètres de Luttinger. Par exemple, dans le plan (001), nous avons les relations suivantes [48]:

$$\begin{aligned} \frac{m_{hh}^*}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1 + \gamma_2} \\ \frac{m_{lh}^*}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1 - \gamma_2} \\ \frac{m_{so}^*}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1} \end{aligned} \quad \text{Eq-II.41}$$

### II.3. Structures de bandes de matériaux non contraints

Nous comparons dans cette section les structures de bandes des matériaux Si, Ge et SiGe relaxés obtenues à partir des modèles semi-empiriques EPM non locaux et  $k.p$  30 bandes à celles des simulations *ab initio*. Nous montrons que les grandeurs physiques calculées de ces structures de bandes sont non seulement en bon accord entre elles, mais le sont aussi en comparaison des données expérimentales. Les grandeurs physiques étudiées sont les extréma de bandes, la densité d'états ainsi que les masses effectives de courbure des électrons et les paramètres de Luttinger des trous.

<sup>13</sup>Remarquons que les masses effectives calculées en fonction des paramètres de Luttinger ne sont pas directement reliées aux courbures des bandes dans une direction donnée.

### II.3.1. Comparaison des structures de bandes

Les structures de bandes du Si et Ge, obtenues en utilisant la méthode  $k.p$  optimisée, sont comparées à des simulations *ab initio* GW en Figure II.19 et Figure II.20. La qualité globale de l’ajustement est bonne: les différences dans les bandes d’énergie entre les simulations semi-empiriques et celles utilisées en référence sont inférieures à 0.01eV pour les principaux gaps et sous 0.3eV aux autres points de haute symétrie. D’autres comparaisons sont montrées avec la méthode EPM non locale de Cohen et Chelikowsky [3]. Comme il peut être vu, l’application directe de la méthode EPM produit une structure de bandes en très bon accord avec les résultats bien plus complexes des calculs *ab initio* GW. Par cet excellent accord, L’EPM pourrait aussi servir de structure de bandes de référence pour l’optimisation du modèle  $k.p$ .

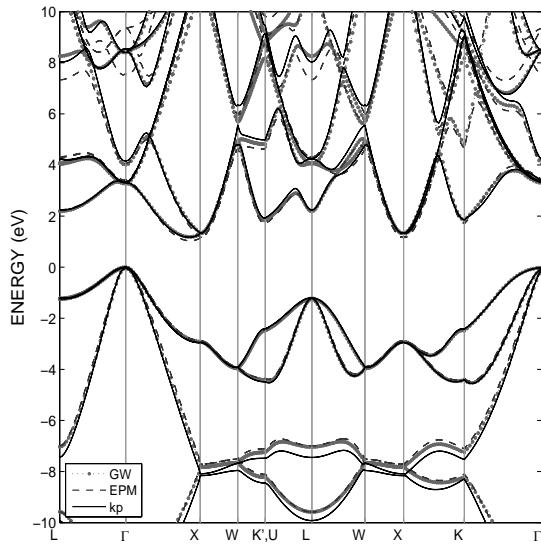


Figure II.19: Structures de bandes du Si obtenues des calculs  $k.p$  30 bandes, EPM et GW.

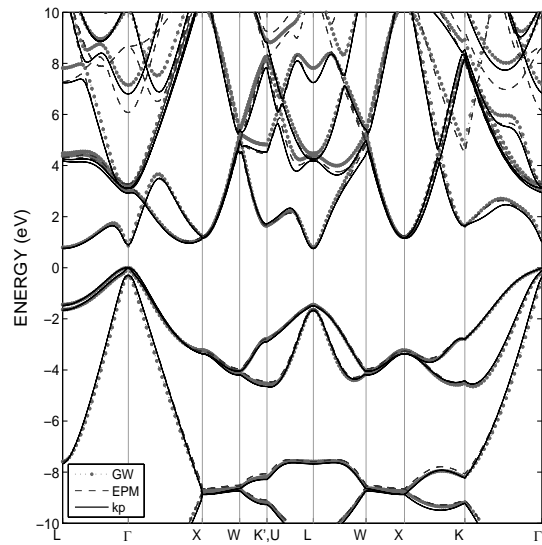
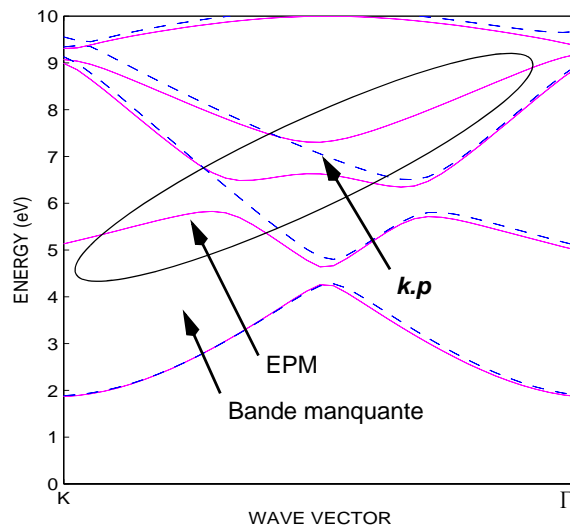


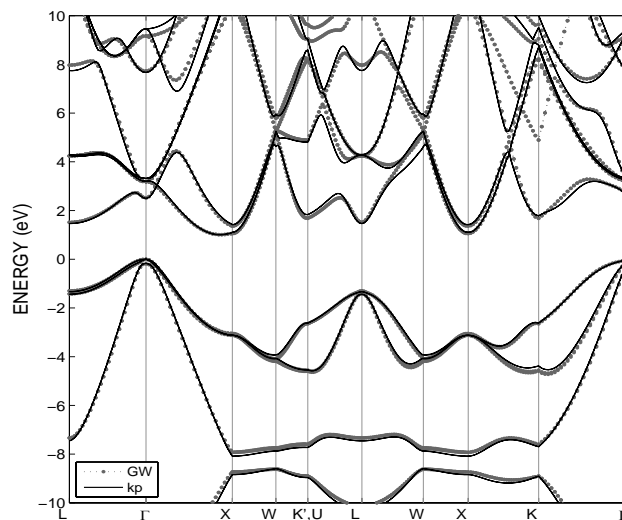
Figure II.20 Structures de bandes du Ge obtenues des calculs  $k.p$  30 bandes, EPM et GW.

Une discontinuité en énergie est intrinsèquement présente entre les points équivalents  $K$  et  $U$  [36]. De fait, les bandes d’énergie sur la base des ondes planes (220) sont manquantes dans la méthode  $k.p$ , comme observé en Figure II.21, où des bandes calculées par la méthode EPM ne sont pas reproduites par la méthode  $k.p$ . Or, ce couplage entre ces bandes manquantes et les autres niveaux de plus basse énergie est naturellement plus prononcé près du point  $K$ , où les bandes (220) de plus basse énergie sont de l’ordre de  $\sim 4,5$  eV. Ainsi, les valeurs propres aux points  $K$  et  $U$  diffèrent de quelques meV ( $\sim 7$  meV). Pour comparaison, les valeurs propres des états (220) sont  $\geq 26$  eV à  $\Gamma$ , sont  $\geq 12,5$  eV à  $X$ , et sont  $\geq 12$  eV à  $L$ . Cette discontinuité n’a pas pu être lissée par une optimisation des paramètres dans la perspective d’un compromis entre précision des calculs et la continuité des bandes en  $K$  et  $U$ . Toutefois, dans l’optique d’une description continue des points  $K$  et  $U$ , comme requise dans les simulations Monte Carlo [49], nous avons trouvé une solution satisfaisante en utilisant une fonction de lissage sur les paramètres  $P'''$ , réduisant localement (près de la région de point  $K$ ) sa valeur à 1.3 a.u. Toutes les figures produites le long de ce chapitre, et comportant la méthode  $k.p$  proposée, sont obtenues avec cette fonction de lissage.



**Figure II.21:** Bande manquante de type (220) dans les solutions du modèle  $k.p$  30 bandes en comparaison des résultats de la méthode EPM.

Dans le cadre des simulations des alliages SiGe, la Figure II.22 présente la structure de bandes du  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$  obtenue avec le modèle  $k.p$  dont les paramètres ont été interpolés à  $x = 0,5$ . Cette structure de bandes est comparée avec celle obtenue de la simulation *ab initio* GW. Le modèle  $k.p$  proposé prédit un croisement entre les minima des vallées  $\Delta$  et  $L$  à  $x=0.84$ , en cohérence avec les données expérimentales.



**Figure II.22:** Structure de bandes électronique  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$  obtenue en utilisant le modèle  $k.p$  30 bandes et GW.

### II.3.2. Extrema de bandes

Les tableaux II.2, II.4 et II.5 montrent une comparaison des niveaux d'énergie issus des calculs EPM,  $k.p$  et *ab initio* avec les données expérimentales les mieux établies aux points de haute symétrie.

**Tableau II.4:** Valeurs propres et énergies de gap du Silicium aux points de haute symétrie dans la zone de Brillouin, issues de calculs EPM,  $k.p$  et méthode *ab initio*. Les états du couplage spin-orbite sont montrés entre parenthèses. Les valeurs moyennes sur les transitions entre les bandes spin-orbites sont notées avec une barre. Les états sont localisés dans l'espace réciproque en Figure II.3. Toutes les énergies sont en [eV].

[eV]	Si			
Etats <sup>a</sup>	Expt.	EPM	$G_0W_0$	$k.p$
$L_1$	-6.8±0.2 <sup>b</sup> ; -6.4 <sup>g</sup> ; -6.7±0.2 <sup>d</sup>	-6.991	-7.019	-7.448
$L_{3'}$	-1.5 <sup>c</sup> ; -1.2±0.2 <sup>b</sup>	-1.228 (0.034)	-1.216 (0.033)	-1.198 (0.026)
$L_1$	2.06 <sup>g</sup> ; 2.1 <sup>f</sup> ; 2.4±0.15 <sup>f</sup>	2.247	2.095	2.234
$L_3$	3.9 <sup>g</sup> ; 4.15±0.1 <sup>f</sup>	4.324 (0.016)	3.962 (0.015)	4.245 (0.007)
$L_{2'}$		7.334	8.161	8.031
$X_1$		-7.711	-7.823	-8.087
$X_4$	-2.5±0.3 <sup>h</sup> ; -2.9 <sup>f</sup> ; -3.3±0.2 <sup>f</sup>	-2.889	-2.92	-2.95
$X_1$	1.13 <sup>g</sup> ; 1.25 <sup>c</sup> ; 1.3 <sup>f</sup>	1.163	1.221	1.321
$W_1$	-8.1±0.3 <sup>d</sup>	-7.512 (0.006)	-7.653 (0.005)	-7.662 (0.295)
$W_2$	-3.9±0.2 <sup>d</sup>	-3.886 (0.014)	-3.95 (0.013)	-3.922 (0.008)
$\Sigma_1^{min}$	-4.7±0.2 <sup>b</sup>	-4.466	-4.527	-4.553
$E_g(\Delta)$	1.17 <sup>d</sup>	1.031	1.076	1.17
$\overline{E_1(L)}$	3.45 <sup>f</sup> ; 3.46 <sup>e</sup>	3.492	3.311	3.432
$\overline{E_1(L)}$	5.38 <sup>c</sup> ; 5.50 <sup>f</sup>	5.577	5.178	5.443
$E_2(X)$	4.32 <sup>e</sup>	4.052	4.141	4.271

<sup>a</sup> Symboles de la Réf. [50].

<sup>b</sup> Présentés en Réf. [3].

<sup>c</sup> Présentés en Réf. [51].

<sup>d</sup> Présentés en Réf. [16].

<sup>e</sup> Présentés en Réf. [42].

<sup>f</sup> Présentés en Réf.[11].

<sup>g</sup> Présentés en Réf.[10].

<sup>h</sup> Présentés en Réf.[52].

**Tableau II.5:** Valeurs propres et énergies de gap du Germanium aux points de haute symétrie dans la zone de Brillouin, issues de calculs EPM,  $k.p$ , et méthode *ab initio*. Les états du couplage spin-orbite sont montrés entre parenthèses. Les valeurs moyennes sur les transitions entre les bandes spin-orbites sont notées avec une barre. Les états sont localisés dans l'espace réciproque en Figure II.3. Toutes les énergies sont en [eV].

[eV]	Ge			
Etats <sup>a</sup>	Expt.	EPM	$G_0W_0$	$k.p$
$L_1$	-7.7±0.2 <sup>b</sup> ;	-7.588	-7.801	-7.678
$L_{3'}$	-1.4±0.2 <sup>b</sup>	-1.433(0.187)	-1.459(0.197)	-1.490(0.188)
$L_1$	0.744 <sup>d</sup>	0.776	0.64	0.747
$L_3$	4.2±0.1 <sup>f</sup> ; 4.4 <sup>c</sup> ; 4.3±0.2 <sup>d</sup> ;	4.319(0.087)	4.227(0.103)	4.250(0.077)
$L_{2'}$	7.8 <sup>c</sup> ; 7.8±0.1 <sup>f</sup> ; 7.9 <sup>g</sup>	7.285	7.495	7.242
$X_1$	-9.3±0.2 <sup>f</sup>	-8.646	-8.995	-8.875
$X_4$	-3.66 <sup>c</sup> ; -3.15±0.2 <sup>d</sup> ; -3.5±0.2 <sup>f</sup>	-3.267	-3.28	-3.375
$X_1$	1.3±0.2 <sup>d</sup>	1.254	1.045	1.169
$W_1$	-8.7±0.3 <sup>d</sup>	-8.512(0.029)	-8.88(0.025)	-8.638(0.103)
$W_2$	-3.9±0.2 <sup>d</sup>	-3.956(0.042)	-4.151(0.075)	-4.038(0.154)
$\Sigma_1^{min}$	-4.5±0.2 <sup>b</sup>	-4.548	-4.748	-4.555
$E_g(\Delta)$		1.04	0.855	0.961
$\overline{E_1(L)}$	2.05 <sup>d</sup> ; 2.22 <sup>e</sup>	2.302	2.099	2.239
$\overline{E_{1'}(L)}$	5.65 <sup>d</sup>	5.889	5.686	5.750
$E_2(X)$	4.42 <sup>e</sup>	4.521	4.325	4.544

<sup>a</sup> Symboles de la Réf. [50].

<sup>b</sup> Présentés en Réf. [3]

<sup>c</sup> Présentés en Réf. [51].

<sup>d</sup> Présentés en Réf. [16].

<sup>e</sup> Présentés en Réf. [43].

<sup>f</sup> Présentés en Réf. [11].

<sup>g</sup> Présentés en Réf. [10].

Nous avons utilisé une large gamme de données expérimentales synthétisées sur un ensemble d'articles par Chelikowsky et Cohen [3], Landolt-Börnstein [16], Hybertsen and Louie [11] et Aulbur *et al.* [10]. Les plus récentes mesures optiques dans du Si [42] et Ge [43] ont également été intégrées. Il est à noter que l'interprétation des pics et des points critiques expérimentaux provenant des transitions proches en énergie est difficile, comme par exemple, dans le cas des couplages spin-orbite. De plus, les points critiques peuvent provenir de transitions proches, mais pas nécessairement exactement des points de haute symétrie de la PZB. En dehors des récentes expériences de

photoémission et de photoémission inverse, qui ont déterminé les bandes de haute énergie dans le Si et le Ge [51], les bandes d'énergie différentes ne peuvent être facilement mesurées dans leur globalité.

Des tableaux II.2, II.4 et II.5, il est démontré qu'un accord global est trouvé entre les gaps théoriques et expérimentaux. En particulier, la méthode présentée de  $k.p$  30 bandes prédit un gap indirect à 1.17 eV pour le Si et 0.747 pour le Ge.

### II.3.3. Masses de courbure et paramètres de Luttinger

Les valeurs des masses de courbure<sup>14</sup> et des paramètres de Luttinger ont été optimisées à l'aide d'un algorithme gradient-conjugué (voir Figure II.13). Cette optimisation est basée sur la méthode des moindres carrés.

Dans le cas des bandes de valence, l'optimisation s'est effectuée par la minimisation des différences calculées entre les courbures de bande issues du  $k.p$  6 bandes (voir Section II.2.6.) et celles obtenues des méthodes étudiées (les modèles EPM,  $k.p$  30 bandes, ou encore la méthode  $GW$ ). L'optimisation des paramètres de Luttinger pour chaque méthode est effectuée à partir du calcul des masses de courbure le long des axes  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Il est vérifié que la technique, ici présentée, d'extraction des masses de courbure de bande et des paramètres de Luttinger donne des résultats similaires aux calculs directs basés sur les lois des sommes et de la théorie  $k.p$  [30][32][53]. Les valeurs de l'EPM Chelikowsky-Cohen obtenues par Rieger et Vogl [30] dans le Ge,  $\gamma_1 = 9,563$ ,  $\gamma_2 = 2,77$  et  $\gamma_3 = 3,91$ , peuvent être comparées à nos résultats listés en tableau II.6. Les masses effectives théoriques sont, de même, listées en tableau II.6.

Nous pouvons voir que toutes les méthodes fournissent un bon accord avec les valeurs expérimentales. Toutefois, le modèle  $k.p$  30 bandes présenté, ainsi que le modèle EPM non local donnent des résultats insatisfaisants pour les paramètres de Luttinger pour les bandes de valence du Ge. Bien que l'optimisation du modèle  $k.p$  30 bandes améliore la précision de ces paramètres, il sous-estime leurs valeurs de 20%. Effectivement, lorsque les paramètres de Luttinger sont développés en terme d'éléments de matrice [30][32][53], le terme  $P/E_F$  est présent. Or, ce terme est relativement petit dans notre étude. De fait, l'Hamiltonien  $k.p$  ne prend pas explicitement en compte les effets non-locaux du potentiel cristallin, contrairement à l'opérateur  $V(\mathbf{r})$  [3] de l'EPM non local de Chelikowsky et Cohen. Dans ce travail, les effets non locaux ont été renormalisés dans les paramètres du  $k.p$  30 bandes. Dans le Germanium, ces effets sont importants [3]. Certains paramètres présentés dans cette thèse (par exemple,  $P = 1,186$  a.u.) sont plus petits que ceux de Cardona et Pollak ( $P = 1,36$  a.u.)[35].

<sup>14</sup>Rappelons que la masse des bandes de conduction est calculée à partir de la dérivée seconde de la relation de dispersion en son minimum (voir Section II.2.6.).

Tableau II.6: Masses effectives et paramètres de Luttinger.

	Si			
	Expt.	$G_0W_0$	EPM	$k.p^d$
$m_l^\Delta$	0.9163 <sup>a</sup>	0.925	0.89	0.928
$m_t^\Delta$	0.1905 <sup>a</sup>	0.189	0.198	0.192
$m_l^L$		1.8083	1.855	1.704
$m_t^L$		0.1235	0.1535	0.131
$\gamma_1$	4.26 <sup>a</sup> ; 4.285 <sup>a</sup> ; 4.23 <sup>b</sup> ; 4.22 <sup>c</sup>	4.54	4.01	4.338
$\gamma_2$	0.38 <sup>a</sup> ; 0.339 <sup>a</sup> ; 0.31 <sup>b</sup> ; 0.39 <sup>c</sup>	0.33	0.38	0.3468
$\gamma_3$	1.56 <sup>a</sup> ; 1.446 <sup>a</sup> ; 1.46 <sup>b</sup> ; 1.44 <sup>c</sup>	1.54	1.401	1.4451
	Ge			
	Expt.	$G_0W_0$	EPM	$k.p^d$
$m_l^\Delta$		0.881	0.964	0.874
$m_t^\Delta$		0.176	0.205	0.200
$m_l^L$	1.588±0.005 <sup>f</sup> ; 1.74 <sup>g</sup>	1.626	1.763	1.59
$m_t^L$	0.08152±0.00008 <sup>f</sup> ; 0.079 <sup>g</sup>	0.074	0.099	0.099
$\gamma_1$	13.0 <sup>h</sup> ; 12.8±2.9 <sup>e</sup> 13.25 <sup>a</sup>	13.54	9.54	10.41
$\gamma_2$	4.4 <sup>h</sup> ; 4.0±0.3 <sup>c</sup> ; 4.20 <sup>a</sup>	4.32	2.75	3.045
$\gamma_3$	5.3 <sup>h</sup> ; 5.5±0.3 <sup>c</sup> ; 5.56 <sup>a</sup>	5.77	3.93	4.313

<sup>a</sup> Présentés en Réf. [16].

<sup>b</sup> Balslev et Lawaetz, comme présentés en Réf. [38].

<sup>c</sup> Présentés en Réf. [54].

<sup>d</sup> Modèle présenté.

<sup>e</sup> Présentés en Réf.[55].

<sup>f</sup> Présentés en Réf. [56].

<sup>g</sup> Présentés en Réf. [57].

<sup>h</sup> Présentés en Réf. [32].



### II.3.4. Densité d'états

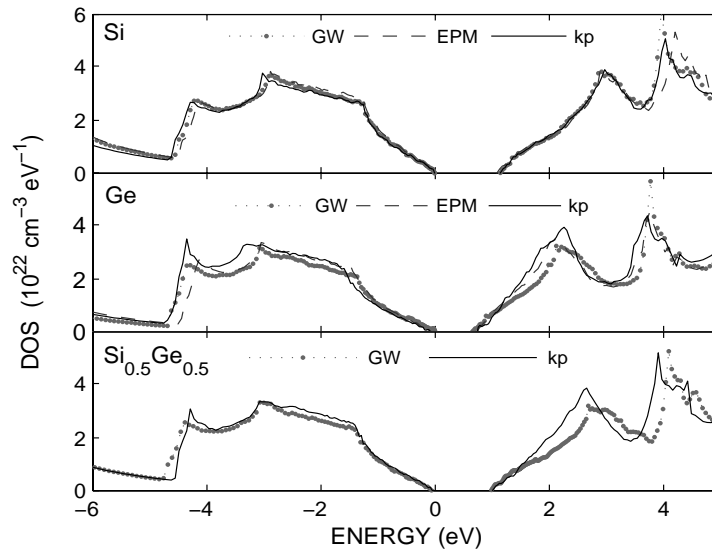
La densité d'états (DOS) correspond au nombre d'états disponibles pour une énergie donnée dans l'espace réciproque. Son calcul est donc un donnée clé pour obtenir une modélisation précise de la densité de porteurs dans le Silicium. La densité d'états est aussi un moyen de vérifier la qualité d'ajustement du modèle  $k.p$  présenté durant cette thèse, sachant qu'elle ne dépend pas seulement des niveaux d'énergie mais également du gradient de ceux-ci par rapport à  $k$  (vitesse de groupe).

La densité d'états est en effet obtenue de la manière suivante [1][58]:

$$g(E) = \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{k} \in BZ} \delta[E - E_{\nu}(\mathbf{k})] = \sum_{\nu} \frac{1}{(2\pi)^3} \oint_{S_{\mathbf{k}}(E)} \frac{dS_{\mathbf{k}}(E)}{|\nabla_{\mathbf{k}} E_{\nu}(\mathbf{k})|} \quad \text{Eq-II.42}$$

où  $\delta$  est la distribution de Dirac. La somme et l'intégrale se font sur une surface d'énergie constante  $E_{\nu}(\mathbf{k}) = E$  de la bande indexée par  $\nu$  dans la PZB.  $S_{\mathbf{k}}(E)$  est l'ensemble de ces surfaces isoénergies.

Pour effectuer cette intégration, il est nécessaire d'échantillonner la zone de Brillouin de manière adéquate, dans le but d'éviter des calculs trop consommateurs en ressources informatiques. La densité d'états est obtenue en utilisant la procédure de Gilat et Raubenheimer [59]. Le même algorithme a été appliqué sur les méthodes EPM,  $k.p$  et  $GW$ . Comme on peut le voir sur la Figure II.23, l'accord est excellent pour les bandes de valence. Comme nous le constaterons, la densité d'états (DOS) est une donnée cruciale prise en compte dans le cadre de simulations réalistes du transport de charge [49][60].



**Figure II.23:** La densité d'états du Si, Ge et de l'alliage  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ : Comparaison entre les modèles  $k.p$  30 bandes (lignes), EPM (tirets) et la méthode  $GW$  (pointillés).

Généralement, dans le cadre de la simulation des dispositifs, on émet l'hypothèse que les porteurs de charge restent dans les niveaux énergétiques les plus bas (à proximité de l'extrema de bande  $E_0$ ). On peut donc utiliser l'approximation parabolique de la masse effective, valide dans cette zone. La densité d'états en fonction de l'énergie s'écrit alors:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_0 m^{DOS}}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{|E - E_0|} \quad \text{Eq-II.43}$$

où  $m_0$  est la masse de l'électron libre et  $m^{DOS}$  définie comme étant la masse de densité d'états.

De l'équation Eq-II.43, nous pouvons donc définir  $m^{DOS}$  à partir de la densité d'états d'électrons dans un potentiel périodique calculé par les méthodes *ab initio*, EPM et *k.p.*

$$m^{DOS}(E) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (2\pi^2 g(E))^{\frac{3}{2}} (E - E_0)^{-\frac{1}{3}} \quad \text{Eq-II.44}$$

L'équation Eq-II.44 permet de calculer une masse DOS dépendante de l'énergie qui reflète l'effet de non parabolicité des bandes sur la densité d'états.

## II.4. Introduction de la contrainte dans le calcul de la structure de Bandes

Afin d'améliorer les performances des dispositifs électroniques, des procédés de mise sous contraintes biaxiales et uniaxiales sont actuellement en usage dans les procédés de fabrication. Les propriétés de transport des dispositifs électroniques étant fortement corrélées aux propriétés électroniques des porteurs de charge, il est donc essentiel de modéliser correctement les effets de contrainte dans le calcul de structure de bandes.

### II.4.1. Problématique des calculs de structures de bandes sous contrainte

Les notions élémentaires de la description des effets de contrainte sur la maille cristalline à partir de la mécanique continue sont introduites en ANNEXE II.A. Les tenseurs de contrainte et de déformation de contraintes typiques uniaxiales et biaxiales sont exprimés dans cette annexe. Les calculs de structures de bandes effectués par la suite sont basés sur ces expressions de tenseur.

Nous détaillerons particulièrement l'introduction des effets de contrainte dans le modèle *k.p* 30 bandes et EPM non local à l'aide des composantes des tenseurs de déformation. De nouveaux termes de couplage interbandes dans le modèle *k.p*, induits par la contrainte, sont ajustés à l'aide des données expérimentales et des simulations *ab initio*. Une nouvelle fonction d'interpolation dans la méthode de calcul de structure EPM sera introduite. Par ailleurs, nous observerons que dans le cadre des simulations *ab initio* et EPM, le placement exact des atomes de la maille cristalline est capital dans la description de la structure de bandes.

### II.4.2. Introduction de la contrainte dans le calcul des structures de bandes

Comme précédemment décrit en Section II.1., les structures cristallines relaxées des matériaux semi-conducteurs étudiés (Si et Ge) sont de type cubique CFC. L'application d'une contrainte va déformer la structure cristalline de la maille élémentaire. Comme nous le verrons, les déformations engendrées seront dépendantes du type de contrainte considérée. Toutefois, quelques lois de comportement peuvent être déduites et résumées brièvement ici:

- Les paramètres de maille du réseau cubique se déforment selon les lois d'élasticité de la mécanique des milieux continus.
- Les contraintes de cisaillement peuvent induire des déplacements des atomes internes à la maille. Ce déplacement n'est pas prédit par la théorie de l'élasticité linéaire de la mécanique des milieux continus. Pour étudier ce phénomène, des études *ab initio* ont été effectuées.

En accord avec le principe de Curie, il est donc constaté une diminution de la symétrie du cristal en relation avec les caractéristiques des contraintes appliquées. Des brisures de symétrie sont par conséquent induites autant dans la structure atomique cristalline que dans l'espace réciproque. En effet, l'espace réciproque et la PZB ont la même symétrie que l'espace réel. La contrainte induit donc des modifications dans la description des structures de bandes.

L'impact de la contrainte dans les calculs de structures de bandes est introduit par la notion de tenseur de déformation. Nous verrons que ces déformations sont intégrées de manières différentes selon la méthode de calcul de structures de bandes considérée. L'introduction de la contrainte dans les méthodes *ab initio* et EPM s'effectue en partie sur la localisation des atomes dans la maille cristalline contrainte. L'introduction de la contrainte dans la méthode *k.p* s'effectue sur la base des brisures de symétrie.

Dans le cadre de ce chapitre, les structures de bandes seront abordées dans l'exemple de couches contraintes de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ . Celles-ci sont déposées sur des matériaux massifs  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  sur une large distribution de contraintes biaxiales (nous appliquons une déformation parallèle  $\varepsilon_{||}$  jusqu'à 4%) appliquées dans les plans (100), (111) et (110).

#### II.4.2.1. Méthode *ab initio*

La densité de charge, calculée de manière auto-cohérente par la simulation, est directement reliée à la structure cristalline et aux espèces atomiques du matériau considéré. Dans cette thèse, une série de structures de bandes a été réalisée dans le but d'étudier les potentiels de déformation. L'estimation de ces grandeurs macroscopiques permet l'ajustement des modèles *k.p* 30 bandes et EPM non local sous contrainte. Cette contrainte est introduite en tenant compte du déplacement adéquat des atomes au sein de la maille atomique simulée.

Alors que les atomes situés aux noeuds du réseau de Bravais se déplacent selon la théorie d'élasticité de la mécanique des milieux continus, ce n'est pas le cas de l'atome situé dans le site interstitiel [61]. Or, le déplacement de cet atome influence fortement les propriétés structurale et électronique du cristal contraint. Un degré supplémentaire de liberté (qui apparait pour les cas de contraintes de cisaillement qui sont, par exemple, présentes dans les cas de croissance selon  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$  des matériaux massifs relaxés) doit être ajouté au déplacement des atomes interstitiels [61]. Le paramètre de déplacement interne  $\xi$  mesure la variation de la distance parcourue par l'atome interstitiel vis à vis des noeuds du réseau de Bravais, en réponse à la brisure de symétrie provoquée par la contrainte. Finalement, la position des atomes dans la cellule élémentaire d'une structure zinc-blende est donnée par:

$$\vec{R}'_1 = (\vec{I} - \vec{\varepsilon}^{SCC}) \vec{R}_1 \quad \text{Eq-II.45}$$

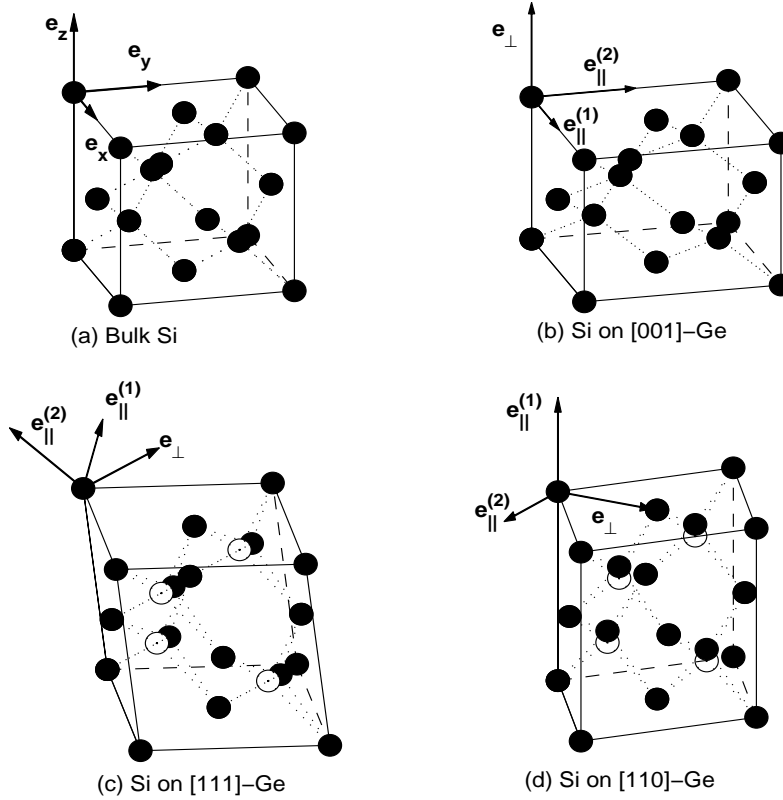
$$\vec{R}'_2 = (\vec{I} - \vec{\varepsilon}^{SCC}) \vec{R}_2 - \vec{R}_{dep} \quad \text{Eq-II.46}$$

Où  $\vec{R}'_1$  et  $\vec{R}'_2$  sont respectivement les positions des atomes aux noeuds et aux sites interstitiels dans le cas relaxé. Le "prime" se rapporte à la position des atomes après déformation.  $\vec{\varepsilon}$  correspond au tenseur de déformation dans le Système de Coordonnées Cristallographiques (SCC).  $\vec{R}_{dep}$  correspond au vecteur du déplacement interne de l'atome interstitiel, tel que:

$$\vec{R}_{dep} = -\frac{1}{2} a \xi \begin{bmatrix} \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.47}$$

Les déformations  $\varepsilon_{yz}$ ,  $\varepsilon_{xz}$  et  $\varepsilon_{xy}$  proviennent du cisaillement.  $a$  est le paramètre de maille de la structure cubique.  $\xi$  est le paramètre de déplacement interne.

Il est donc important de placer correctement cet atome (voir Figure II.24). Afin de déterminer  $\xi$ , les calculs *ab initio*, présentés dans ce chapitre, prennent en compte une optimisation structurale de la cellule élémentaire du cristal pour trois orientations de contraintes biaxiales dans les plans (001), (111) et (110).



**Figure II.24:** Structure diamant déformée déposée de manière homogène sur divers substrats orientés: **a)** structure cubique non contrainte, **b)** Si contraint déposé sur substrat relaxé de Ge orienté en  $\langle 001 \rangle$ ; **c)** Si contraint déposé sur substrat relaxé de Ge orienté en  $\langle 111 \rangle$ ; et **d)** Si contraint déposé sur substrat relaxé de Ge orienté en  $\langle 110 \rangle$ . Le déplacement interne des atomes interstitiels dans la cellule déformée est montré pour  $\xi = 0$  (atomes blancs) et  $\xi = 1$  (atomes noirs). Les vecteurs de base pour lesquels le tenseur de contrainte est biaxial (voir ANNEXE II.A) sont également montrés. Dans un souci de clarté, l'amplitude de la déformation a été arbitrairement augmentée.

La procédure appliquée dans les simulations *ab initio* est la suivante:

(i) La contrainte longitudinale  $\varepsilon_{||} = a(y)/a_0 - 1$  est calculée à partir de la différence entre le paramètre de maille du Si et du Ge relaxé  $a_0$  et celui du  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  dans le matériau massif  $a(y)$  (voir Eq-II.12). La forme de la cellule déformée et la position des atomes dans la cellule sont obtenues par minimisation de l'énergie totale des cristaux contraints biaxialement.

(ii) La cellule optimisée est utilisée ultérieurement dans les calculs de structures de bandes DFT-LDA.

(iii) Les corrections *GW* du Si et Ge massifs sont utilisées afin de rectifier le problème du gap. Ce choix a été motivé par les travaux de Zhu *et al.* [41] qui démontrent que la dépendance en pression est qualitativement similaire que l'on applique ou pas la correction *GW* aux calculs LDA.

Dans le cas de la contrainte biaxiale dans le plan (110), le déplacement interne de l'atome interstitiel s'effectue selon la direction  $\langle 001 \rangle$  ( $\vec{R}_{dep} = [0 \ 0 \ \varepsilon_{xy}]$ ). Dans le cas de la contrainte biaxiale dans le plan (111), ce déplacement s'opère selon la direction  $\langle 111 \rangle$  ( $\vec{R}_{dep} = [\varepsilon_{yz} \ \varepsilon_{xz} \ \varepsilon_{xy}]$ ). En revanche, aucun déplacement interne n'est observé dans le cas des contraintes biaxiales dans le plan (001).

Le paramètre de déplacement interne  $\xi$  est connu expérimentalement dans le Si et le Ge uniaxialement contraints le long de la direction  $\langle 111 \rangle$  [62], comme reporté en Tableau II.7. Les valeurs expérimentales de  $\xi$  appartiennent à l'intervalle  $[0, 1]$ . Cependant, comme signalé par Levine *et al.* [64], la plupart des calculs du paramètre de déplacement interne utilise une définition non-standard de  $\xi$ , c'est à dire  $\xi' = \frac{2}{3}\xi$ . Ce qui implique que  $\xi'$  appartient à  $[\frac{0}{3}, \frac{2}{3}]$ . Les valeurs reportées dans ce travail correspondent à  $\xi'$ . Par simplification, nous avons supprimé le "prime" du symbole tout au long de ce manuscrit.

**Tableau II.7:** Coefficients élastiques et paramètre de déplacement interne.

	Si		Ge	
	Expt.	LDA <sup>a</sup>	Expt.	LDA <sup>a</sup>
$D_{001}$ [GPa]	0.776	0.795	0.7513	0.711
$D_{110}$ [GPa]	0.515	0.527	0.4498	0.42
$D_{111}$ [GPa]	0.444	0.461	0.3711	0.343
$C_{11}$ [GPa]	167.5 <sup>d</sup>	168.3 <sup>b</sup>	131.5 <sup>d</sup>	132.8 <sup>b</sup>
$C_{12}$ [GPa]	65 <sup>d</sup>	66.8 <sup>b</sup>	49.4 <sup>d</sup>	46.8 <sup>b</sup>
$C_{44}$ [GPa]	80.1 <sup>d</sup>	79.9 <sup>b</sup>	68.4 <sup>d</sup>	66.57 <sup>b</sup>
$\xi$	0.54±0.04 <sup>c</sup>	0.536	0.54±0.04 <sup>c</sup>	0.495

<sup>a</sup> Travail de thèse.

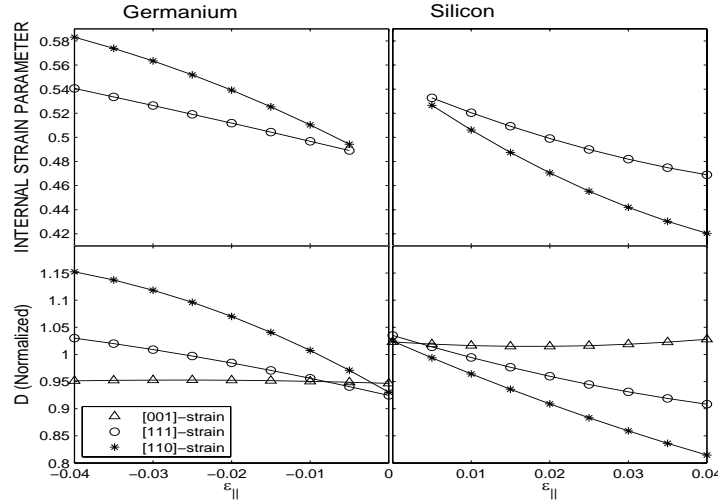
<sup>b</sup> Constante élastique calculée des valeurs  $D$ .

<sup>c</sup> Référence [62].

<sup>d</sup> Référence [63].

Dans les simulations *ab initio* présentées, le paramètre de déplacement interne  $\xi$  et les coefficients de Poisson  $D$  sont calculés en minimisant l'énergie totale des cristaux biaxialement contraints. Afin de trouver l'équilibre structurel pour une déformation appliquée  $\varepsilon_{||}$ , l'énergie totale est minimisée en variant les proportions de la cellule élémentaire le long de la direction de la déformation. La position atomique interne à la cellule est de même optimisée. Les ratios de Poisson extraits  $D_{001}$ ,  $D_{111}$  et  $D_{110}$ , et les paramètres de déplacement interne extraits des optimisations structurelles sont reportés en Tableau II.7 pour  $\varepsilon_{||} \rightarrow 0$ . Comme observé en Tableau II.7, les constantes élastiques obtenues de  $D_{001}$ ,  $D_{111}$  et  $D_{110}$  des expressions précédentes sont en bon accord avec les valeurs expérimentales du Si et Ge [63].

En Figure II.25, le coefficient de Poisson théorique et le paramètre de déplacement interne  $\xi$  sont reportés en fonction de la déformation  $\varepsilon_{||}$ . Les simulations ont été effectuées en tension et compression dans du Si (droite) et du Ge (gauche) pour les trois cas de croissance mentionnés précédemment. Comme il peut être vu, pour le cas de croissance  $\langle 001 \rangle$ ,  $D$  ne dépend pratiquement pas de la déformation  $\varepsilon_{||}$ , tandis que dans les cas de croissance  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ ,  $D$  et  $\xi$  changent tout les deux dès lors qu'une contrainte biaxiale est appliquée (jusqu'à 15%). Ce cas est cohérent avec les résultats de la Réf. [65] concernant la couche contrainte de Ge déposée sur du Si massif cubique orienté selon  $\langle 001 \rangle$ . Des variations en  $\xi$  sont reportées en Réfs. [67][64][66], de même que la variation des constantes élastiques [68]. Le déplacement des niveaux d'énergie dépend du type de



**Figure II.25:** Paramètre de déplacement interne  $\xi$  et coefficients de déformation normale  $D$  en fonction de contraintes biaxiales appliquées perpendiculairement aux directions  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Les coefficients  $D$  sont renormalisés par rapport aux valeurs expérimentales listées en Tableau II.7.

contrainte appliquée. Ainsi, les résultats montrés en Figure II.25 ont été pris en compte dans les calculs de structures de bandes. Par exemple, le déplacement des niveaux d'énergie dans le Si déposé sur du Ge massif orienté selon  $\langle 111 \rangle$  est surestimé de 10% lorsque  $\xi$  et  $D$  sont gardés constants. Ce comportement est inversé dans le cas du Ge déposé sur du Si massif orienté selon  $\langle 111 \rangle$ .

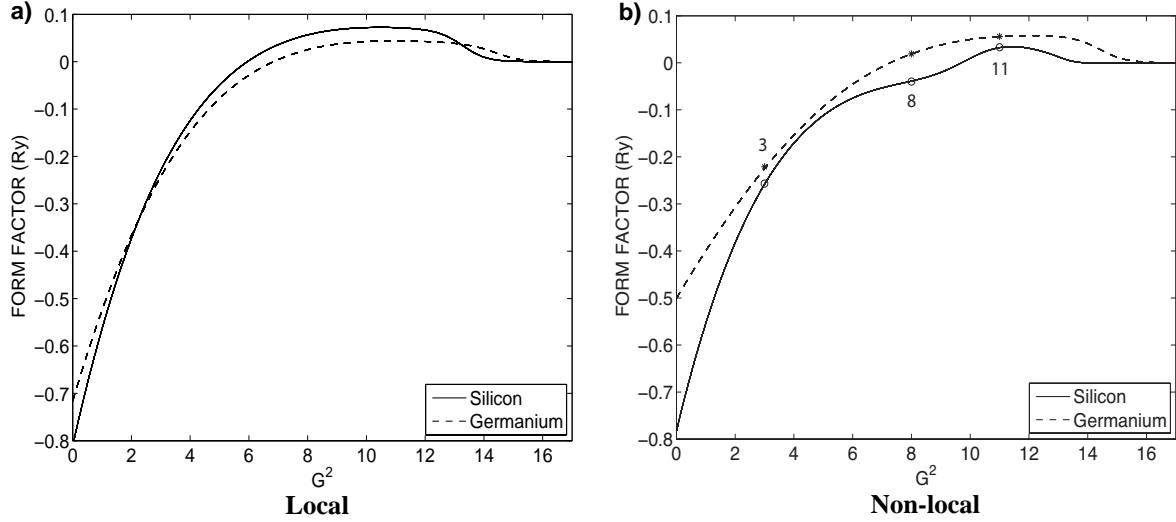
#### II.4.2.2. Méthode EPM: Développement d'une fonction d'interpolation nouvelle

Les vecteurs du réseau de Bravais sont modifiés par l'application d'une contrainte (voir Eq-II.45). Par conséquent, les vecteurs du réseau réciproque sont également modifiés. Le calcul de la structure de bandes des matériaux contraints Si et Ge et des alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  requiert donc la connaissance des termes du pseudo-potential à des vecteurs d'onde autres que les points  $\Gamma$  de l'espace réciproque relaxé en interpolant les valeurs à  $G = \sqrt{3}$ ,  $\sqrt{8}$ , et  $\sqrt{11}(2\pi/a_0)$  (par exemple, par une fonction spline cubique, comme proposé par Rieger et Vogl [30]). Nos études ont confirmé que la fonction spline cubique donnait de bons résultats avec les potentiels ioniques  $v(G)$  de l'EPM local [29]. Cependant, cette fonction d'interpolation, appliquée sur les potentiels  $v(G)$  non locaux de Chelikowsky et Cohen [3]<sup>15</sup>, ne donne pas de potentiels de déformation satisfaisants (étude non détaillée dans ce manuscrit).

Pour cette raison, nous avons ajusté des fonctions d'interpolation polynomiales, qui passent par les valeurs discrètes des potentiels du matériau relaxé, de telle manière que les potentiels de déformation obtenus soient conformes aux valeurs expérimentales (voir Tableau II.9). Ces fonctions d'interpolation, tracées en Figure II.26 b) dans le cas des matériaux Si et Ge, consistent en un polynôme d'ordre 16. Dans le cas du Silicium, elle s'exprime de la manière suivante:

$$\begin{aligned}
 V_{\text{Si}}(G) = & -3,48387617 \cdot 10^{-15} G^{16} + 5,21326628 \cdot 10^{-13} G^{15} - 3,50301545 \cdot 10^{-11} G^{14} + 1,39566955 \cdot 10^{-9} G^{13} - 3,66755703 \cdot 10^{-8} G^{12} \\
 & + 6,69109257 \cdot 10^{-7} G^{11} - 8,69076103 \cdot 10^{-6} G^{10} + 8,11208665 \cdot 10^{-5} G^9 - 5,42919366 \cdot 10^{-4} G^8 + 2,57208749 \cdot 10^{-3} G^7 - 8,41571231 \cdot 10^{-3} G^6 \\
 & + 1,82696927 \cdot 10^{-2} G^5 - 0,0247645264 G^4 + 0,0210367157 G^3 - 0,0420466925 G^2 + 0,263093891 G - 0,783094206
 \end{aligned} \quad \text{Eq-II.48}$$

<sup>15</sup>Rieger et Vogl [30] utilisent des fonctions splines sur des potentiels  $V(G)$ . Mais, force est de constater que les corrections non locales fournies par les auteurs sont très faibles dans le cadre du Si. Ainsi, les coefficients  $V(G)$  de l'EPM non local sont quasiment identiques à ceux dans un EPM local: non local [30] ( $V(\sqrt{3}) = -0,2241$ ,  $V(\sqrt{8}) = 0,052$ ,  $V(\sqrt{11}) = 0,0742$ ) vs. local [29] ( $V(\sqrt{3}) = -0,2241$ ,  $V(\sqrt{8}) = 0,0551$ ,  $V(\sqrt{11}) = 0,0742$ ) à comparer avec nos valeurs en Tableau II.1.



**Figure II.26:** Interpolation des transformées de Fourier du potentiel ionique des matériaux Si et Ge en fonction du module au carré du vecteur du réseau réciproque  $|\mathbf{G}|^2$ . **a)** Interpolation des pseudo-potentiels locaux de Friedel et al. [29], **b)** interpolation des pseudo-potentiels non-locaux élaborée durant cette thèse (les symboles représentent les valeurs discrètes des pseudo-potentiels de Chelikowsky et al. [3]).

Dans le cadre du Germanium, la fonction d'interpolation s'écrit de la manière suivante:

$$\begin{aligned}
 V_{Ge}(G) = & 3,285609699 \cdot 10^{-15} G^{16} - 5,064728368 \cdot 10^{-13} G^{15} + 3,524258080 \cdot 10^{-11} G^{14} - 1,463585365 \cdot 10^{-9} G^{13} + 4,041263231 \cdot 10^{-8} G^{12} \\
 & - 7,824167542 \cdot 10^{-7} G^{11} + 1,091557275 \cdot 10^{-5} G^{10} - 1,110530941 \cdot 10^{-4} G^9 + 8,245507796 \cdot 10^{-4} G^8 - 4,427283284 \cdot 10^{-3} G^7 - 1,685601084 \cdot 10^{-2} G^6 \\
 & - 4,403689165 \cdot 10^{-2} G^5 + 7,497961776 \cdot 10^{-2} G^4 - 7,688715792 \cdot 10^{-2} G^3 + 3,735114536 \cdot 10^{-2} G^2 + 9,607481478 \cdot 10^{-2} G - 0,5002653184
 \end{aligned}
 \quad \text{Eq-II.49}$$

Nous avons également tracé en Figure II.26 a) l'interpolation de Friedel et al. des transformées de Fourier des pseudo-potentiels locaux [29].

Notons les caractéristiques suivantes:

- le potentiel est positif à grand  $\mathbf{G}$  reproduisant la répulsion des électrons de coeur sur les électrons de valence.
- la fonction d'interpolation s'annule à grand  $\mathbf{G}$  en négligeant les effets du potentiel à faible distance (induits par les électrons de coeur).

En ce qui concerne les corrections non-locales (NL) et la correction SO dans le cas contraint, nous avons conservé les mêmes équations que celles fournies par Chelikowsky et Cohen [3]. Ces formules ont également été utilisées dans les configurations relaxées mentionnées en Section II.2.5.1.. Finalement, le déplacement des atomes sous contrainte est considéré via les expressions Eq-II.45 et Eq-II.46, et par la suite intégré dans l'équation Eq-II.19.

### II.4.2.3. Méthode $k.p$ 30 bandes optimisée

L'analyse de la structure électronique des semi-conducteurs contraints en utilisant l'Hamiltonien de la méthode  $k.p$  a été initialement proposée par Pikus et Bir [69]. Ces auteurs ont dérivé les termes perturbatifs du  $k.p$  provenant de la contrainte au premier ordre. Depuis, cette expression est couramment utilisée dans l'Hamiltonien  $k.p$  6 bandes pour analyser les effets de déformation sur le spectre des énergies des trous.

Durant cette thèse, le formalisme de Pikus et Bir [69] a été étendu au  $k.p$  30 bandes. La contrainte est aisément introduite dans la méthode  $k.p$  dans la mesure où le terme perturbatif  $w$ , dépendant de la contrainte, est ajouté à l'Hamiltonien du matériau relaxé:

$$h_{e,\varepsilon} = h_e + w \quad \text{Eq-II.50}$$

Les éléments de l'Hamiltonien perturbatif à ajouter à l'Hamiltonien relaxé sont les suivants [69]:

$$W_{n',n} = -\sum_{i,j} \frac{\hbar}{m_0} \varepsilon_{ij} k_i \langle u_{n'0} | p_j | u_{n0} \rangle + \varepsilon_{ij} \langle u_{n'0} | \Xi_{ij} | u_{n0} \rangle \quad \text{Eq-II.51}$$

où  $i, j$  représentent  $x, y$  et  $z$ . Le premier terme de l'Eq-II.51 prend en compte les interactions entre la contrainte et les moments des charges. L'opérateur potentiel de déformation  $\Xi_{ij} = -\frac{p_i p_j}{m_0} + V_{ij}(\mathbf{r})$  décrit les modifications dans l'énergie potentielle et cinétique des charges dues aux contraintes. Les potentiels initialement inconnus à  $\Gamma$ ,  $\langle u_{n'0} | \Xi_{ij} | u_{n0} \rangle$ , listés dans le Tableau II.9, sont déterminés par des lois de sélection de la théorie des groupes en tenant seulement compte des contributions  $p_i p_j$ . Ce choix est motivé par le fait qu'en utilisant l'approximation des ions déformés, les termes  $V_{ij}$  de symétrie trigonale ou rhomboédrique disparaissent [69].

La matrice de perturbation symétrique pour des matériaux contraints de l'Eq-II.51 s'écrit comme suit:

$$W_{k \cdot p}^{30} = \begin{bmatrix} W_{\Gamma_{2,u}}^{2 \times 2} & P'' W_k^{2 \times 6} & W_{\Gamma_{2,u} \Gamma_{12'}}^{2 \times 4} & 0 & 0 & W_{\Gamma_{2,u} \Gamma_{15}}^{2 \times 6} & W_{\Gamma_{2,u} \Gamma_{2,l}}^{2 \times 2} & P'' W_k^{2 \times 6} \\ & W_{\Gamma_{25,u}}^{6 \times 6} & R' W_k^{6 \times 4} & W_{\Gamma_{25,u} \Gamma_{1^u}}^{6 \times 2} & W_{\Gamma_{25,u} \Gamma_{1^l}}^{6 \times 2} & Q' W_k^{6 \times 6} & P' W_k^{6 \times 2} & W_{\Gamma_{25,u} \Gamma_{25^l}}^{6 \times 2} \\ & & W_{\Gamma_{12'}}^{4 \times 4} & 0 & 0 & W_{\Gamma_{12'} \Gamma_{15}}^{4 \times 6} & W_{\Gamma_{12'} \Gamma_{2,l}}^{4 \times 2} & R W_k^{4 \times 6} \\ & & & W_{\Gamma_{1^u}}^{2 \times 2} & W_{\Gamma_{1^u} \Gamma_{1^l}}^{2 \times 2} & T W_k^{2 \times 6} & 0 & W_{\Gamma_{1^u} \Gamma_{25^l}}^{2 \times 6} \\ & & & & W_{\Gamma_{1^l}}^{2 \times 2} & T' W_k^{2 \times 6} & 0 & W_{\Gamma_{1^l} \Gamma_{25^l}}^{2 \times 6} \\ & & & & & W_{\Gamma_{15}}^{6 \times 6} & W_{\Gamma_{15} \Gamma_{2,l}}^{6 \times 2} & Q W_k^{6 \times 6} \\ & & & & & & W_{\Gamma_{2,l}}^{2 \times 2} & P W_k^{2 \times 6} \\ & & & & & & & W_{\Gamma_{25^l}}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.52}$$

Il y a deux catégories de termes de couplage présents dans l'Hamiltonien; les termes indépendants de  $\mathbf{k}$ , représentés par  $w_{\Gamma}$ , venant du second terme de l'Eq-II.51 et les termes linéaires en  $\mathbf{k}$  venant du premier terme de l'Eq-II.51.

Les termes indépendants de  $\mathbf{k}$  s'expriment de la manière suivante:

$$W_{\Gamma}^{6 \times 6} = \begin{bmatrix} W_{\Gamma}^{3 \times 3} & 0 \\ 0 & W_{\Gamma}^{3 \times 3} \end{bmatrix}$$

$$W_{\Gamma}^{3 \times 3} = \begin{bmatrix} l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{xy} & n\varepsilon_{xz} \\ n\varepsilon_{xy} & l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{yz} \\ n\varepsilon_{xz} & n\varepsilon_{yz} & l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.53}$$

$$W_{\Gamma}^{4 \times 4} = \begin{bmatrix} A\varepsilon_{xx} + B(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & E(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) & 0 & 0 \\ E(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) & C\varepsilon_{xx} + D(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A\varepsilon_{xx} + B(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & E(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) \\ 0 & 0 & E(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) & C\varepsilon_{xx} + D(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \end{bmatrix}$$



$$\begin{aligned}
 W_{\Gamma}^{2 \times 2} &= a_{\Gamma} \sum_i \begin{bmatrix} \varepsilon_{ii} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{ii} \end{bmatrix} \\
 W_{\Gamma}^{2 \times 6} &= f_{\Gamma} \begin{bmatrix} \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{xy} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \\
 W_{\Gamma}^{4 \times 2} &= g_{\Gamma} \begin{bmatrix} \sqrt{3}(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) & 0 \\ 2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} & 0 \\ 0 & \sqrt{3}(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}) \\ 0 & 2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \\
 W_{\Gamma}^{4 \times 6} &= h_{\Gamma} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}\varepsilon_{xz} & -\sqrt{3}\varepsilon_{xy} & 0 & 0 & 0 \\ 2\varepsilon_{yz} & -\varepsilon_{xz} & -\varepsilon_{xy} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}\varepsilon_{xz} & -\sqrt{3}\varepsilon_{xy} \\ 0 & 0 & 0 & 2\varepsilon_{yz} & -\varepsilon_{xz} & -\varepsilon_{xy} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Les potentiels de déformation ( $l, m, n$ , etc.) sont listés en Tableau II.8 (les coefficients non mentionnés dans le Tableau sont nuls). Il est à noter que ces potentiels de déformation contribuent au déplacement des bandes seulement au point  $\Gamma$ . Les considérations de la théorie des groupes nous permettent d'identifier cinq variables  $A, B, C, D$  et  $E$  qui sont les combinaisons linéaires de quatre coefficients  $a_{12}, b_{12}, c_{12}$  et  $d_{12}$ , listés en Tableau II.8:

$$A = 6(b_{12} - d_{12})$$

$$B = 3(a_{12} + b_{12} - 2c_{12})$$

$$C = 2(2a_{12} - 4c_{12} + b_{12} + d_{12})$$

$$D = 5b_{12} - 2c_{12} - 4d_{12} + a_{12}$$

$$E = \sqrt{3}(2c_{12} - 2d_{12} - a_{12} + b_{12})$$

Provenant du second terme de l'Eq-II.51, des couplages additionnels non diagonaux apparaissent entre les états de même polarité. Ces couplages sont indépendants de  $\mathbf{k}$ . Ces blocs et les potentiels de déformation ont été représentés en utilisant une notation en double indice (par exemple,  $w_{\Gamma_{12}, \Gamma}$ ). Par simplicité, les termes de couplages entre états identiques sont représentés par une notation en simple indice (par exemple,  $w_{\Gamma_{12}}$ ).

Finalement, les termes de couplage obtenus à partir du premier terme de l'Eq-II.51 s'écrivent de la manière suivante:

$$\begin{aligned}
 W_k^{6 \times 6} &= -\sum_i \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{iz}k_i & \varepsilon_{iy}k_i & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon_{iz}k_i & 0 & \varepsilon_{ix}k_i & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon_{iy}k_i & \varepsilon_{ix}k_i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{iz}k_i & \varepsilon_{iy}k_i \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{iz}k_i & 0 & \varepsilon_{ix}k_i \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{iy}k_i & \varepsilon_{ix}k_i & 0 \end{bmatrix} \\
 W_k^{4 \times 6} &= -\sum_i \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}\varepsilon_{iy}k_i & -\sqrt{3}\varepsilon_{iz}k_i & 0 & 0 & 0 \\ 2\varepsilon_{ix}k_i & -\varepsilon_{iy}k_i & -\varepsilon_{iz}k_i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}\varepsilon_{iy}k_i & -\sqrt{3}\varepsilon_{iz}k_i \\ 0 & 0 & 0 & 2\varepsilon_{ix}k_i & -\varepsilon_{iy}k_i & -\varepsilon_{iz}k_i \end{bmatrix} \\
 W_k^{4 \times 6} &= -\sum_i \begin{bmatrix} \varepsilon_{ix}k_i & \varepsilon_{iy}k_i & \varepsilon_{iz}k_i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{ix}k_i & \varepsilon_{iy}k_i & \varepsilon_{iz}k_i \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Eq-II.54

où  $i$  dénote  $x, y$  et  $z$ .

**Tableau II.8:** Coefficients de la matrice de perturbation exprimés en [eV].

Symboles	Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>	Symboles	Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>	Symboles	Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>	Symboles	Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>
$l_{\Gamma_{25'}^l}$	-2.7-1.1x	$a_{12}$	7.7-0.885x	$l_{\Gamma_{25'}^l, \Gamma_{25''}^u}$	-19.8-4.339x	$a_{\Gamma_{2'}^l, \Gamma_{2''}^u}$	0.3-1.511x
$m_{\Gamma_{25'}^l}$	4.2+0.7x	$b_{12}$	5.47+1.328x	$lm_{\Gamma_{25'}^l, \Gamma_{25''}^u}$	3.9-4.024x	$a_{\Gamma_1^l, \Gamma_1^u}$	-2-3.927x
$n_{\Gamma_{25'}^l}$	-7.379-2.148x	$c_{12}$	7.3+0.445x	$n_{\Gamma_{25'}^l, \Gamma_{25''}^u}$	-0.112x	$g_{\Gamma_{12'}^l, \Gamma_{2''}^u}$	-10.5+5.5x
$l'_{\Gamma_{15}}$	3.4+2.626x	$d_{12}$	3.65+1.208x	$f_{\Gamma_1^u, \Gamma_{25''}^u}$	6+5.22x	$g_{\Gamma_{12'}^l, \Gamma_{2'}^l}$	-4.5-0.854x
$m'_{\Gamma_{15}}$	-0.5+1.262x	$a_{\Gamma_{2'}^l}$	-9+1.819x	$f_{\Gamma_1^l, \Gamma_{25'}^l}$	-5-2.666x		
$n'_{\Gamma_{15}}$	-10.392+0.258x	$a_{\Gamma_{2''}^u}$	5-0.51x	$f_{\Gamma_1^u, \Gamma_{25'}^l}$	-10-2.21x		
$l''_{\Gamma_{25''}^u}$	-19-1.692x	$a_{\Gamma_1^l}$	10+4.171x	$f_{\Gamma_{15}^l, \Gamma_{2'}^l}$	-19-3.242x		
$m''_{\Gamma_{25''}^u}$	8+1.119x	$a_{\Gamma_1^u}$	0.5-0.992x	$f_{\Gamma_{15}^l, \Gamma_{2''}^u}$	-2+21.925x		
$n''_{\Gamma_{25''}^u}$	-1.732+2.213x						

La connaissance précise des potentiels de déformation à  $\Gamma$  pour les 30 bandes est nécessaire à la construction du modèle  $k,p$  dans les matériaux contraints. Cependant, seuls les potentiels de déformation  $\Gamma_{25'}^l$  sont connus expérimentalement dans le Si et Ge. Les potentiels de déformation, nécessaires à l'Eq-II.51, listés en Tableau II.8, sont ajustés en utilisant une procédure similaire aux matériaux massifs. Nous avons utilisé la procédure d'optimisation des moindres carrés sur les niveaux d'énergie  $GW$  calculés pour les différents matériaux déformés. Un effort particulier a été porté à la dégénérescence aux bords de la PZB liée à la symétrie par renversement du temps. Les dégénérescences additionnelles, parmi les valeurs propres, peuvent être déterminées en utilisant le théorème de Kramer et les règles de Wigner [70]. En utilisant cette règle, Ma *et al.* [23] ont obtenu des informations sur les dégénérescences dans les matériaux Si et Ge pour les directions de croissance  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . L'ensemble de ces considérations a été pris en compte dans le modèle  $k,p$  proposé.

Nous utiliserons cette méthode numérique dans l'analyse des structures de bandes sous contrainte biaxiale (Section II.5).

## II.5. Structures de bandes de matériaux sous contrainte biaxiale

Les solutions numériques des méthodes semi-empiriques EPM et  $k.p$  30 bandes sont comparées aux données expérimentales mais également aux résultats des simulations *ab initio* (Section II.5.1.). La comparaison entre les méthodes de calcul de structures de bandes s'effectue sur l'estimation de valeurs physiques propres aux effets de contrainte, tels que les potentiels de déformation (Section II.5.2.). Par ailleurs, nous estimons dans cette section l'évolution des masses effectives de courbure des électrons et des trous en fonction de la valeur de contrainte biaxiale (Section II.5.3.).

### II.5.1. Comparaison des structures de bandes

Des résultats typiques de notre ajustement sont montrés en Figure II.27 (a) (et Figure II.27 (b)) pour la couche biaxialement contrainte de Si (Ge) qui a été déposée sur du Ge massif cubique orienté en  $\langle 001 \rangle$  (du Si massif cubique orienté  $\langle 001 \rangle$ , respectivement). Des résultats complémentaires sont montrés en Figure II.28(a) (et Figure II.28(b)) pour une couche contrainte de Si (Ge) sur du Ge massif cubique orienté  $\langle 111 \rangle$  (sur du Si massif cubique orienté  $\langle 111 \rangle$ , respectivement). Les structures de bandes du  $k.p$  30 bandes calculées le long des diverses directions dans l'espace réciproque sont comparées aux résultats des méthodes EPM et *GW*.

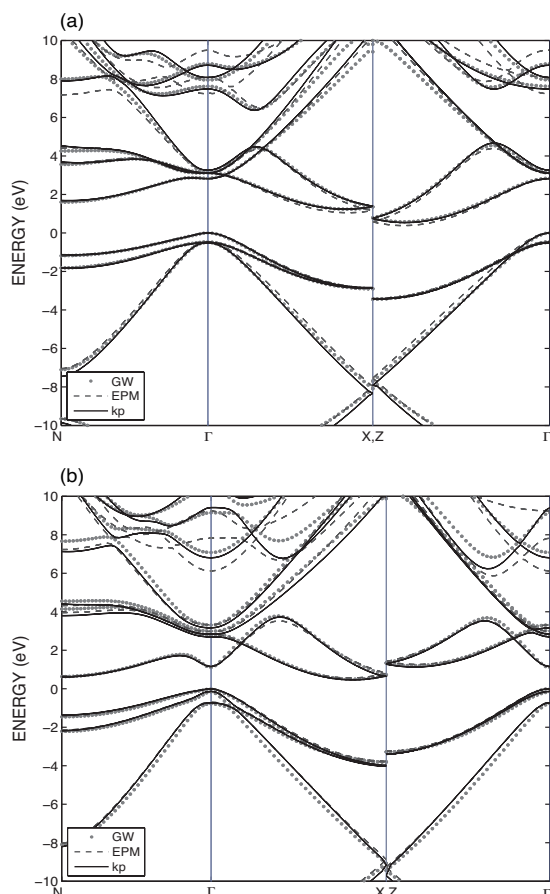
Pour une contrainte purement biaxiale de Si (Figure II.27 (a)), les minima des vallées  $L$  restent équivalentes. Cependant, en relation avec la baisse de symétrie, l'équivalence des vallées  $\Delta$  est supprimée. Les vallées  $\Delta$  se séparent en quatre vallées  $\Delta_4$  et deux vallées  $\Delta_2$  (comme illustré en ANNEXE II.B, Figure II.B.2). Un autre effet important de la contrainte est observable près de la région proche du point  $\Gamma$  en Figure II.27; Dans le cas du Si contraint (contrainte biaxiale tensile), la bande des trous lourds "croise" la bande spin-orbite, tandis que dans le cas de la couche de Ge contraint (contrainte biaxiale compressive), la bande des trous spin-orbite "croise" la bande des trous lourds.

En revanche, les contraintes le long de la direction  $\langle 111 \rangle$  laissent les vallées  $\Delta$  équivalentes tandis que les vallées  $L$  des minima seconds sont séparées (une paire le long de la direction  $\langle 111 \rangle$  et trois paires le long des directions  $\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ ,  $\langle 1\bar{1}\bar{1} \rangle$  et  $\langle 11\bar{1} \rangle$ ). Par ailleurs, il est à noter que les deux bandes de conduction les plus basses le long de la direction  $\Gamma$ - $X$  deviennent non dégénérées en  $X$ . La séparation est due à la perte du centre d'inversion dans la cellule élémentaire sous contrainte de cisaillement.

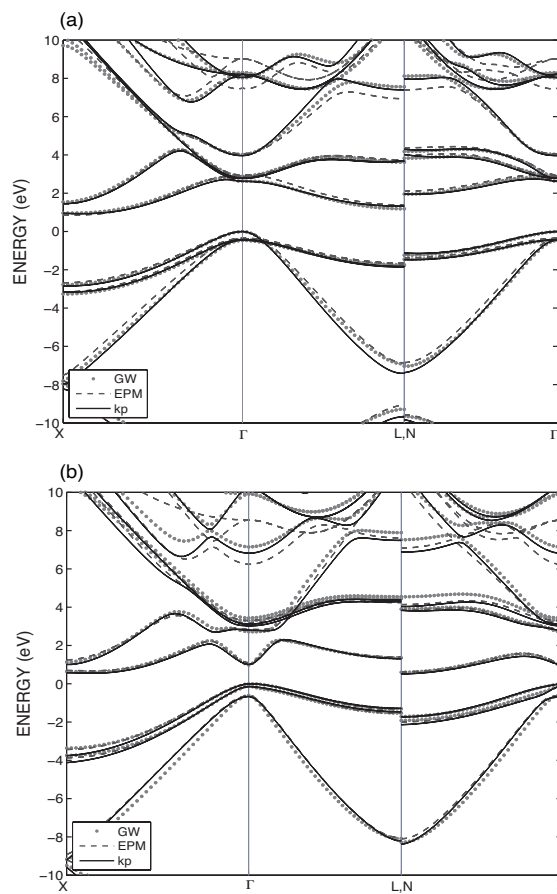
### II.5.2. Déplacement des bandes d'énergie dans les systèmes contraints $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$

Comme nous l'avons observé sur l'ensemble des Figure II.27 et Figure II.28, les minima des vallées  $\Delta$  et  $L$  se déplacent les unes par rapport aux autres dès qu'une contrainte est appliquée dans le matériau. Ce déplacement des bandes est intrinsèquement relié à la perte de symétrie dans le cristal et donc au type de contrainte appliquée.

Ce déplacement peut-être quantifié en utilisant la théorie semi-empirique des *potentiels de déformation* [65] pour les électrons et les trous. Les notions de cette théorie sont exposées en ANNEXE II.B. Ces potentiels de déformation sont estimés à partir du déplacement des bandes obtenu par chacune des méthodes de calcul de structure de bandes. Les potentiels de déformation calculés à l'aide de chaque méthode sont comparés dans cette section.

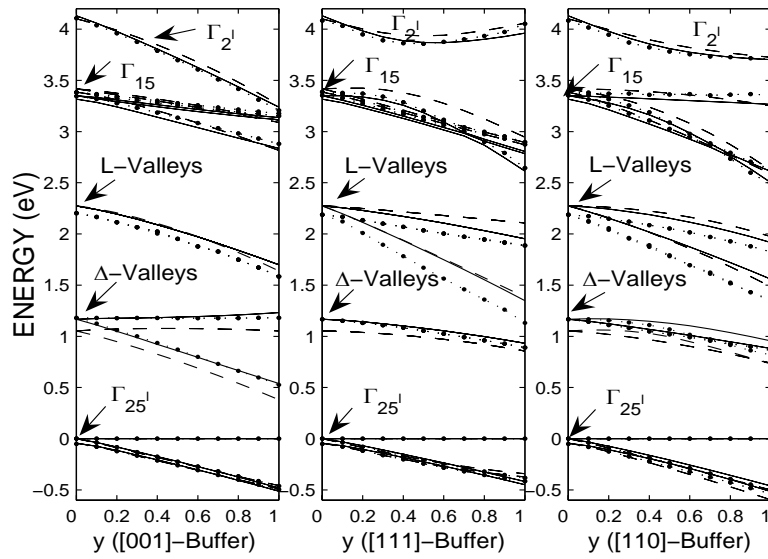


**Figure II.27:** (a) Structures de bandes d'une couche de Si contrainte déposée par épitaxie sur du Ge massif orienté en  $\langle 001 \rangle$ . (b) Structures de bandes d'une couche de Ge contrainte déposée sur du Si massif orienté en  $\langle 001 \rangle$ . La couche de Si est biaxialement contrainte en tension, tandis que la couche de Ge est biaxialement contrainte en compression. Les simulations sont faites avec les modèles  $k.p$  30 bandes (lignes), EPM (tirets) et la méthode GW (pointillés) le long de diverses directions connectant les points de haute symétrie de la zone de Brillouin déformée.

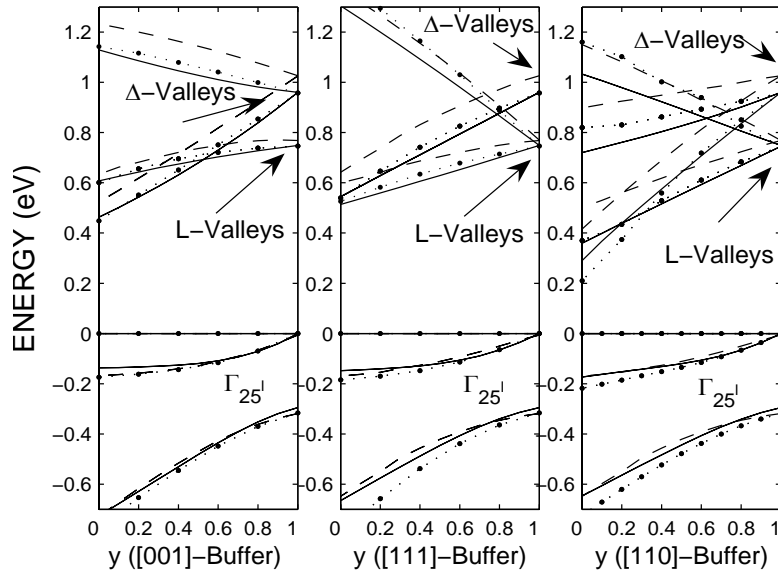


**Figure II.28:** (a) Structures de bandes d'une couche de Si contrainte déposée par épitaxie sur du Ge massif orienté en  $\langle 111 \rangle$ . (b) Structures de bandes d'une couche de Ge contrainte déposée sur du Si massif orienté en  $\langle 111 \rangle$ . La couche de Si est biaxialement contrainte en tension, tandis que la couche de Ge est biaxialement contrainte en compression. Les simulations sont faites avec les modèles  $k.p$  30 bandes (lignes), EPM (tirets) et la méthode GW (pointillés) le long de diverses directions connectant les points de haute symétrie de la zone de Brillouin déformée.

Les déplacements en énergie des principales bandes de valence et de conduction dans les matériaux Si, Ge contraints sont montrés en Figure II.29 et Figure II.30 pour des couches qui ont été déposées sur des matériaux relaxés  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  orientés selon les directions  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Ces mêmes déplacements sont également montrés en Figure II.31 pour des couches contraintes d'alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  déposées sur du matériau massif relaxé Si orienté selon les directions  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Dans ces figures, un bon accord est trouvé entre les simulations *ab initio* et celles des modèles EPM et  $k.p$  proposés. Un effet important de la contrainte peut également être souligné dans le déplacement des valeurs propres en  $\Gamma$ . Ces déplacements montrent une forte non-linéarité en fonction de la fraction molaire  $y$ . Ceci implique une variation non-linéaire des énergies de gap en fonction de la contrainte. Cela a également été reporté pour le Ge et l'AsGa [71]. Ce résultat typique est induit par un couplage entre les états, dû à la diminution des symétries de la cellule élémentaire [53]. En effet, plusieurs termes de couplage indépendants de  $k$  apparaissent (les termes  $w_\Gamma$  dans les matrices de perturbation  $w_{30 \times 30}$ ) dans les matériaux contraints (par exemple dans les cristaux sous contrainte de cisaillement, le couplage entre les états  $\Gamma_{15}$  et  $\Gamma_{2'}$  sont à l'origine non couplés dans l'Hamiltonien relaxé). A partir du déplacement des bandes d'énergie, nous avons calculé les potentiels de

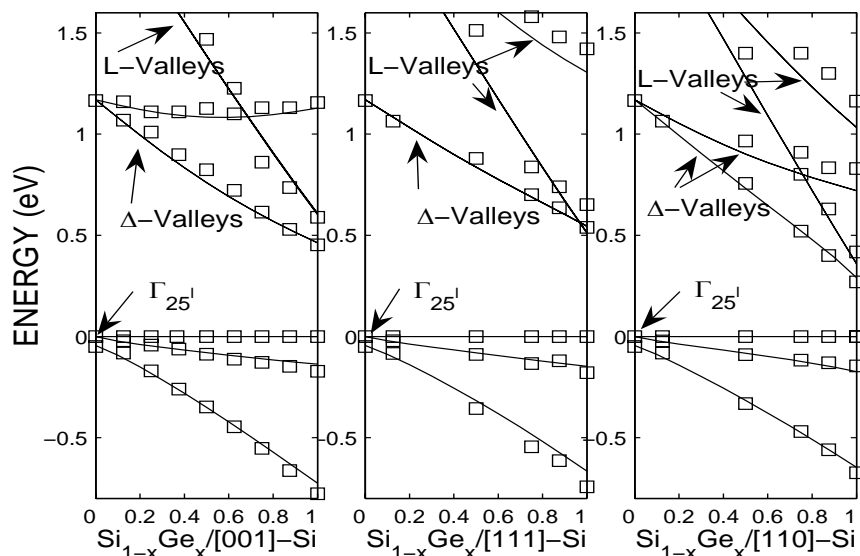


**Figure II.29:** Déplacements calculés des bandes de valence et de conduction d'une couche contrainte de Si en fonction de la fraction molaire  $y$  de Ge contenue dans le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ : les simulations  $k.p$  (lignes), EPM (tirets) et GW (pointillés) ont été effectuées sur différentes orientations de matériau massif.



**Figure II.30:** Déplacements calculés des bandes de valence et de conduction d'une couche contrainte de Ge en fonction de la fraction molaire  $y$  de Ge contenue dans le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ : les simulations  $k.p$  (lignes), EPM (tirets) et GW (pointillés) ont été effectuées sur différentes orientations de matériau massif.

déformation qui reflètent les variations individuelles des bandes d'énergie en fonction de la contrainte (voir ANNEXE II.B). En reprenant les notations de Van de Walle [65], les valeurs expérimentales, trouvées dans le Si et le Ge contraints pour la séparation des bandes de valence, sont notées en Tableau II.9.  $a_v$ ,  $b_v$  et  $d_v$  correspondent aux potentiels de déformation décrivant la variation des bandes de valence au point  $\Gamma$ . Les potentiels de déformations théoriques sont cohérents avec les expériences, excepté le potentiel de déformation de cisaillement  $d_v$  qui est surestimé d'environ 8%. Ce résultat peut être déduit de la surestimation du paramètre théorique de déplacement interne  $\xi$ , montré en Tableau II.7. En complément des potentiels de déformation en  $\Gamma$ , d'autres potentiels de déformation sont déterminés à partir des minima des bandes de conduction, typiquement le long de la direction  $L$  pour le Germanium et  $X$  pour le Silicium. les potentiels de déformation  $\Xi_d^\Delta$ ,  $\Xi_d^L$ ,  $\Xi_u^\Delta$  et  $\Xi_u^L$  sont reportés Tableau II.9.



**Figure II.31:** Déplacements calculés des bandes de valence et de conduction d'une couche contrainte de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  dans le matériau massif Si en fonction de la fraction molaire  $x$  de Ge contenue dans la couche contrainte: les simulations  $k.p$  (lignes) et GW (symboles) ont été effectuées sur différentes orientations de matériau massif.

Par ailleurs, remarquons que la détermination de la fonction d'interpolation du modèle EPM non local (équations Eq-II.48 et Eq-II.49) n'a pas été chose facile. En effet, les potentiels de déformation obtenus avec l'EPM dépendent très fortement du choix de la fonction d'interpolation. Les potentiels de déformation obtenus avec la nouvelle fonction d'interpolation ont également été reportés en Tableau II.9.

Il doit être mentionné que certaines quantités listées en Tableau II.9 dépendent du potentiel absolu de déformation hydrostatique  $a_v$  des bandes de valence. Les quantités individuelles des potentiels sont difficiles à mesurer puisqu'elles se réfèrent à une énergie absolue qui est déterminée en utilisant des règles empiriques (par exemple, à partir des niveaux de défauts profonds par la méthode *Deep defect level pinning* [72][73]). Théoriquement, la relation à la valeur absolue est bien définie seulement quand les conditions aux limites spécifiques sont introduites. Des conditions aux limites, le potentiel peut être relié à une énergie commune zéro. La plupart des méthodes de calcul de structures de bandes modernes appliquent généralement des conditions aux limites périodiques. Ainsi, les états électroniques sont définis vis à vis d'une constante inconnue [74]. Nous n'avons pas calculé ce potentiel  $a_v$ ; les échelles d'énergie ont été fixées en maintenant arbitrairement la plus haute bande de valence à zéro et en utilisant les potentiels de déformation déterminés par la mobilité des charges de Fischetti et Laux [31] ( $a_v = 2$  eV pour Si,  $a_v = 2,1$  eV pour Ge). Ces valeurs sont cohérentes avec les récents calculs *ab initio* [74], desquels en résulte l'estimation du potentiel de déformation  $a_v$  sous forme d'interpolation dans les alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ :  $a_v = 2 + 0,1x$ .

**Tableau II.9:** Potentiels de déformation [eV].

	Si			
	Expt. <sup>a</sup>	EPM <sup>b</sup>	LDA <sup>c</sup>	$k.p^c$
$b_v$	-2.10±0.10	-2.12	-2.27	-2.27
$d_v$	-4.85±0.15	-4.56	-4.36	-4.36
$\Xi_d^\Delta + \frac{1}{3}\Xi_u^\Delta - a_v$	1.50±0.30	2.24	1.67	1.94
$\Xi_d^L + \frac{1}{3}\Xi_u^L - a_v$		-1.4	-3.14	-3.03
$\Xi_u^\Delta$	8.6±0.4	9	8.79	9.01
$\Xi_u^L$		15.9	13.85	15.1
	Ge			
	Expt. <sup>a</sup>	EPM <sup>b</sup>	LDA <sup>c</sup>	$k.p^c$
$b_v$	-2.86±0.15	-2.81	-2.9	-2.8
$d_v$	-5.28±0.50	-5.31	-6	-5.5
$\Xi_d^\Delta + \frac{1}{3}\Xi_u^\Delta - a_v$		3.12	1.43	1.83
$\Xi_d^L + \frac{1}{3}\Xi_u^L - a_v$	-2.0±0.5	-2.26	-2.86	-1.97
$\Xi_u^\Delta$		9.91	10	10
$\Xi_u^L$	16.2±0.4	16.3	17	16.3

<sup>a</sup> Cité en Réf. [65].

<sup>b</sup> Travail de thèse. Calculs EPM sur la base de la méthode de Chelikowsky et Cohen [3].

<sup>c</sup> Travail de Thèse.

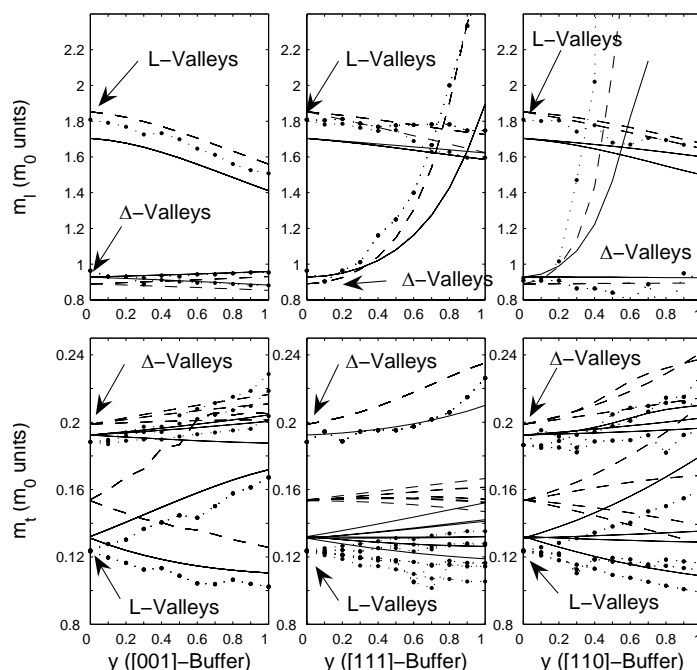
### II.5.3. Masses effectives dans les systèmes contraints $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x / \text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$

Les propriétés du transport électronique dans les dispositifs électriques dépendent non seulement de la variation du gap en fonction de la contrainte, mais également en fonction de celle des masses effectives [31]. Une description précise des grandeurs physiques sous contrainte est donc nécessaire.

Des calculs théoriques EPM, pour des cas de contraintes purement biaxiales, reportent des modifications des masses effectives sous contrainte [28][30][31][53]. Cependant, peu de résultats sur ces modifications sont reportés pour les contraintes de cisaillement [53]. Par ailleurs, peu de mesures directes de masses effectives sont disponibles sur les matériaux Si et Ge contraints [75][76]. Les calculs proposés ici montrent un comportement similaire pour les contraintes purement biaxiales et étendent les résultats théoriques dans les cas de contraintes de cisaillement.

### II.5.3.1. Masses de courbure des électrons

Les Figure II.32 et Figure II.33 montrent les masses de courbure de bande des électrons dans du Si et Ge contraints en fonction de la fraction molaire du Ge  $y$  dans le matériau massif  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  pour différentes orientations.



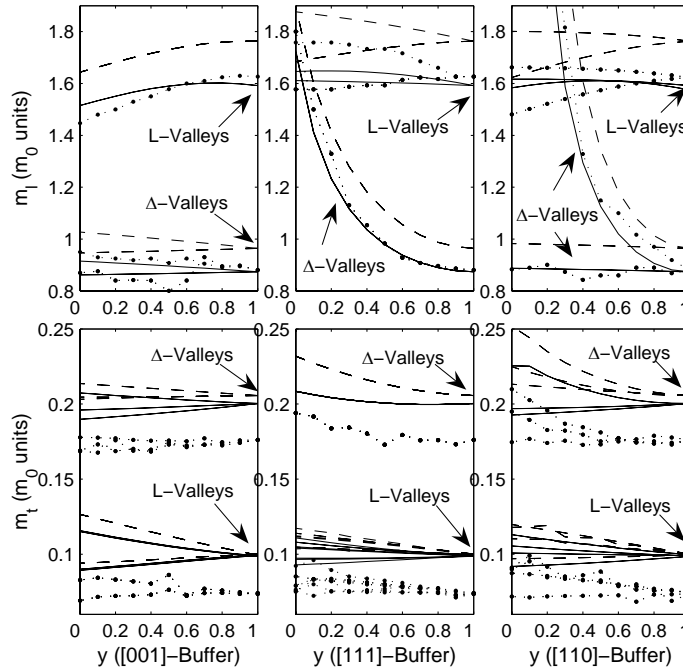
**Figure II.32:** Masses de courbure transverses et longitudinales des électrons dans le Si contraint en fonction de la fraction molaire  $y$  de Ge contenue dans le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ : les simulations  $k.p$  (lignes), EPM (tirets) et GW (pointillés) ont été effectuées sur différentes orientations de matériau massif.

Si nous nous focalisons sur le cas des couches de Si sous contraintes purement biaxiales (matériaux massifs orientés en  $\langle 001 \rangle$ , Figure II.32), le changement de masse de courbure observé dépend de la vallée  $\Delta$  considérée. La variation reste cependant faible ( $< 10\%$ ), ce est qui en bon accord avec les données expérimentales du cyclotron pour le Si sur du  $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$  orienté en  $\langle 001 \rangle$  [76]. Au contraire, pour le cas de croissance  $\langle 111 \rangle$ , chaque vallée  $\Delta$  montrent les mêmes masses transverses et longitudinales, mais leurs valeurs sont largement supérieures aux valeurs du Si massif (jusqu'à 100%). Finalement, le cas de croissance  $\langle 110 \rangle$  est un "mélange" des deux cas précédents [65]: Les vallées  $\Delta$  présentent différentes masses de courbure transverses et longitudinales dont les variations en fonction de la contrainte sont supérieures à celles du cas de croissance  $\langle 111 \rangle$ <sup>16</sup>.

Concernant les masses effectives du second minimum de bandes de conduction (c'est à dire les vallées L pour le Si et les vallées  $\Delta$  pour le Ge), des accords satisfaisants ont été trouvés entre les méthodes semi-empiriques (EPM et  $k.p$ ) et la méthode *ab initio* GW. Notons que la large augmentation des masses de courbure avec de la contrainte de cisaillement est beaucoup plus

<sup>16</sup> Une évolution similaire des masses des vallées  $\Delta$  sous contrainte de cisaillement a également été observée par la littérature [77][78] pour des cas de contraintes uniaxiales (voir Section II.6.1.).

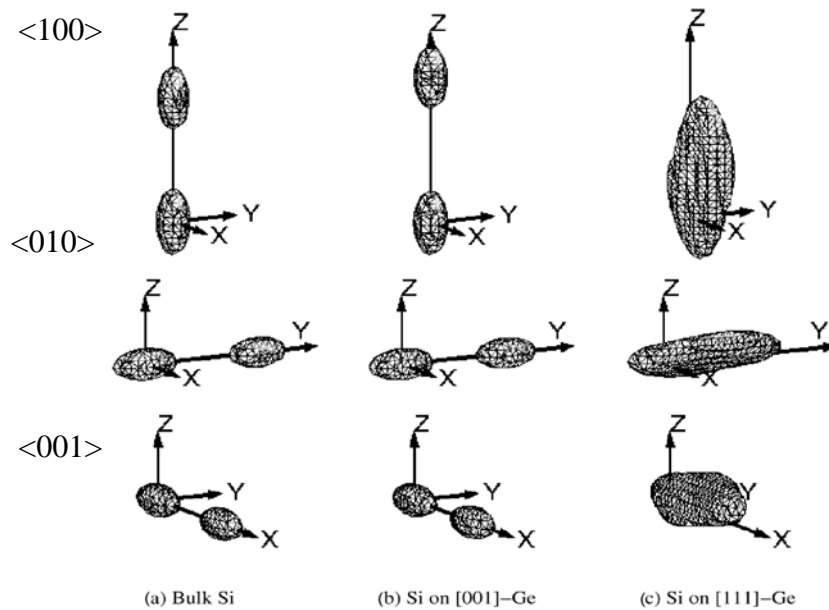




**Figure II.33:** Masses de courbure transverses et longitudinales des électrons dans le Ge contraint en fonction de la fraction molaire  $y$  de Ge contenue dans le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ : les simulations  $k.p$  (lignes), EPM (tirets) et GW (pointillés) ont été effectuées sur différentes orientations de matériau massif.

prononcée pour les vallées  $\Delta$  que pour les vallées  $L$ . Il convient de noter que ces vallées pourraient jouer un rôle significatif dans les propriétés de transport dans les semi-conducteurs contraints, particulièrement pour le Ge, dans lequel les vallées  $\Delta$  et  $L$  sont seulement séparées par 200meV. En effet, dans le cas d'une couche de Ge biaxialement contrainte par du  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  massif orienté en  $\langle 001 \rangle$ , les niveaux énergétiques des minima des vallées  $\Delta$  sont inférieurs à ceux des vallées  $L$  pour  $y \leq 0,5$  (voir Figure II.30). Par conséquent, ces vallées contribuent de manière significative au courant.

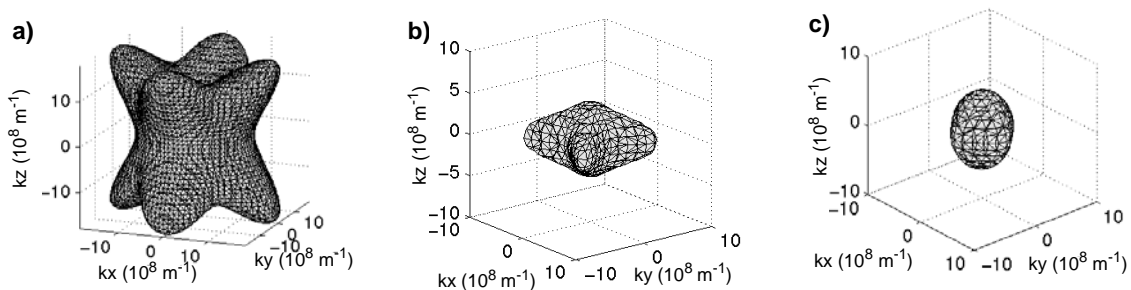
Par ailleurs, nous trouvons qu'en conjonction avec l'augmentation des masses des électrons  $\Delta$  sous contrainte de cisaillement, la position des minima des vallées  $\Delta$  le long de la direction  $X$  change significativement avec la valeur de la contrainte appliquée. La position relative des minima sur la direction  $\Gamma$ - $X$  passe de 84% à 97% dans le Si contraint par du Ge massif orienté en  $\langle 111 \rangle$ . Cette modification de la position des vallées  $\Delta$  est montrée en Figure II.34 par des surfaces 3D tracées à l'énergie thermique ( $\frac{3}{2}kT$ ,  $T = 300K$ ). Les vallées  $\Delta$  sont tracées le long des directions  $\Gamma$ - $X$ ,  $\Gamma$ - $Y$  et  $\Gamma$ - $Z$  pour respectivement du Si massif et pour les cas de couches de Si contraintes sur du Ge orienté selon  $\langle 001 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . Les surfaces 3D des vallées  $\Delta$  dans la première et la seconde zone de Brillouin sont clairement séparées dans le cadre du Si massif et dans le cas d'une contrainte purement biaxiale (croissance orientée selon  $\langle 001 \rangle$ ). Cependant, ces vallées fusionnent en une surface 3D pour la couche contrainte de Si sur du Ge orienté en  $\langle 111 \rangle$ .



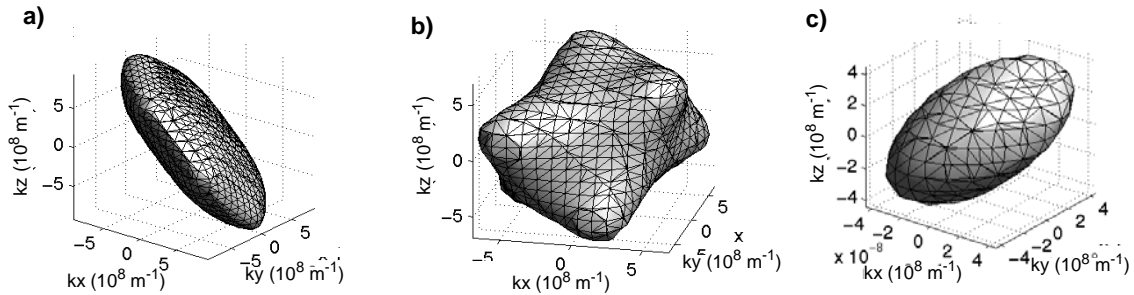
**Figure II.34:** Surfaces 3D à l'énergie thermique des vallées  $\Delta$  situées de part et d'autre du bord de la première zone de Brillouin, le long des directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 010 \rangle$  et  $\langle 001 \rangle$ . Les simulations ont été effectuées pour **a)** du Si massif, **b)** une couche contrainte de Si déposée sur du matériau Ge cubique massif orienté selon la direction  $\langle 001 \rangle$ , et **c)** une couche contrainte de Si déposée sur du matériau Ge cubique massif orienté selon la direction  $\langle 111 \rangle$ .

### II.5.3.2. Masses effectives de densité d'états des trous

La Figure II.35 montre les surfaces isoénergies de chaque bande de valence dans le cas d'une contrainte biaxiale dans le plan (001). La Figure II.36 montre les surfaces isoénergies de chaque bande de valence dans le cas d'une contrainte biaxiale dans le plan (111). La déformation de cisaillement de la maille est présente dans ce dernier cas de contrainte. Pour les deux cas de contraintes, on voit que les formes des surfaces 3D des bandes de valence des matériaux contraints ont radicalement changé comparée à celles du Silicium relaxé (Figure II.15). Les symétries imposées à la structure de bandes sont pleinement visibles sur les surfaces isoénergies. Comme les masses effectives sont reliées à l'inverse des courbures de bandes d'énergie, elles sont donc modifiées par l'application d'une contrainte.

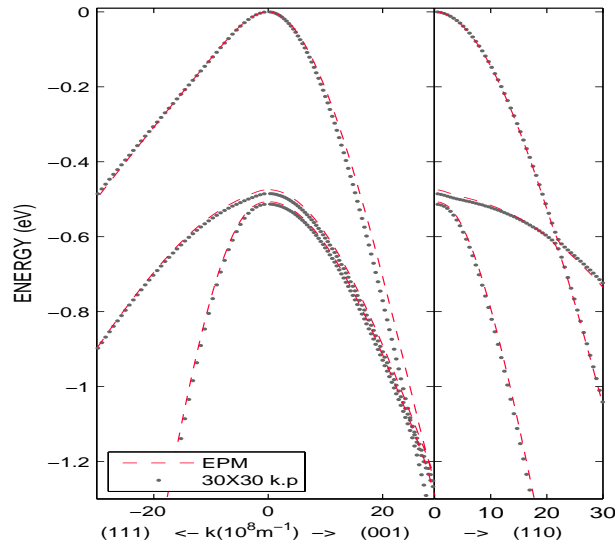


**Figure II.35:** Surfaces isoénergies ( $E-E_0=50\text{meV}$ ) autour du maximum de la bande de valence, représentées dans l'espace réciproque pour le Si sous contrainte biaxiale dans le plan (001). **a)** trous lourds, **b)** trous légers, **c)** trous spin-orbite.



**Figure II.36:** Surfaces isoénergies ( $E-E_0=50\text{meV}$ ) autour du maximum de la bande de valence, représentées dans l'espace réciproque pour le Si sous contrainte biaxiale dans le plan (111). **a)** trous lourds, **b)** trous légers, **c)** trous spin-orbite.

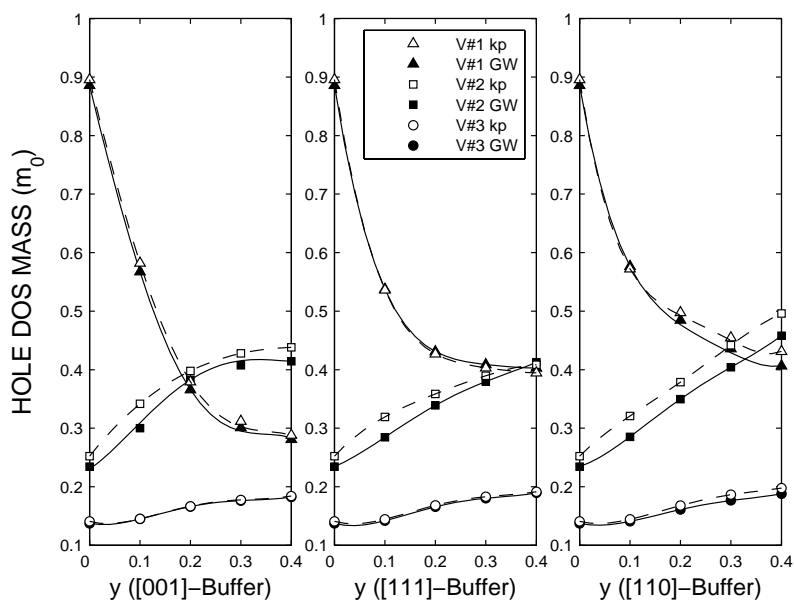
En Figure II.37, la structure de bandes est tracée autour du maximum des bandes de valence dans les directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . Les bandes hh et lh dont les maxima sont dégénérés dans le cas relaxé, se séparent sous l'effet de la contrainte appliquée. Une bande monte en énergie et les deux autres descendent. Selon la direction  $\langle 110 \rangle$ : un "mélange" de bandes est observé. En effet, la bande hh (celle qui monte) a une courbure de type lh dans sa zone de plus basse énergie, puis redevient de type hh à basse énergie. Le phénomène inverse se produit pour la bande lh (celle qui descend).



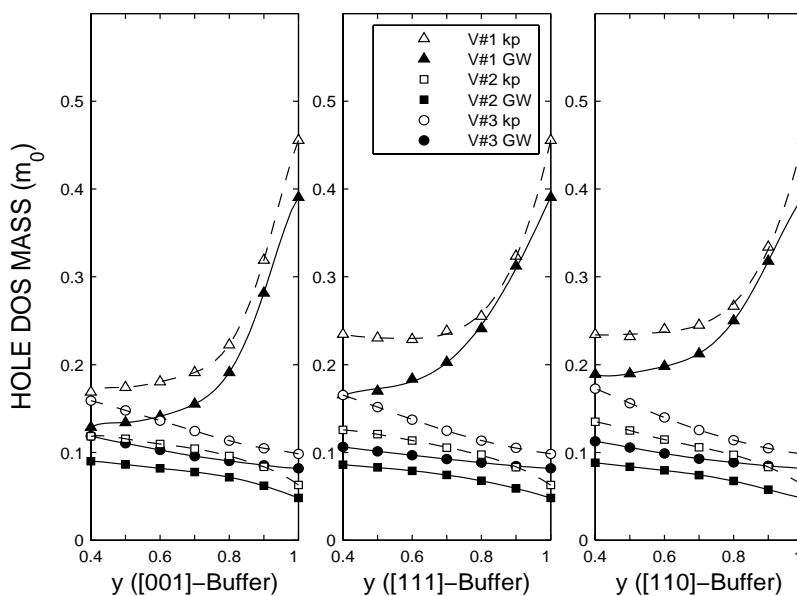
**Figure II.37:** Bandes de valence dans les directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$  du Si sous une tension biaxiale: couche contrainte de Si déposée sur du matériau massif Ge orienté selon  $\langle 001 \rangle$ ;  $k.p$  30 bandes (pointillés) et EPM (tirets).

Les variations des masses de densité d'états (masses DOS) dans les couches contraintes de Si et Ge sont montrées en Figure II.38 et Figure II.39 en fonction de la fraction molaire  $y$  du Ge dans le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ . Dans le cristal relaxé, les masses DOS des trous lourds sont approximativement trois fois supérieures aux masses des trous légers. Cette différence décroît dès que la dégénérescence en  $\Gamma$  entre les trous lourds et légers est levée et que le "mélange" de bandes devient significatif.

En accord avec la loi des sommes [53], les changements induits par la contrainte sur les paramètres de Luttinger sont inclus dans les résultats montrés en Figure II.38 et Figure II.39. Ces résultats sont également en accord avec les expériences [75].



**Figure II.38:** Masses DOS d'une couche contrainte de Si en fonction de la fraction molaire  $y$  du Ge contenue dans le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ; les simulations  $k.p$  (symboles ouverts) et GW (symboles fermés) ont été effectuées sur différentes orientations du matériau relaxé. Les lignes et les tirets servent de guides pour les yeux ;  $T=300\text{K}$ .



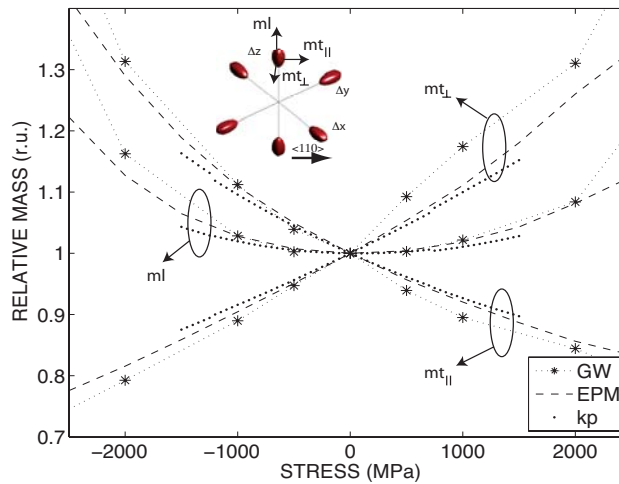
**Figure II.39:** Masses DOS d'une couche contrainte de Ge en fonction de la fraction molaire  $y$  du Ge contenue dans le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ; les simulations  $k.p$  (symboles ouverts) et GW (symboles fermés) ont été effectuées sur différentes orientations du matériau relaxé. Les lignes et les tirets servent de guides pour les yeux ;  $T=300\text{K}$ .

## II.6. Structures de bandes de matériaux sous contrainte uniaxiale

Nous montrons dans cette section, les principales caractéristiques bandes de conduction (Section II.6.1.) et de valence (Section II.6.2.) du matériau Si sous contraintes uniaxiales. Une attention particulière sera portée sur les caractéristiques qui perturbent fortement les propriétés de transport. Ces considérations seront particulièrement utiles lors de l'analyse des propriétés de transport dans des gaz 3D de porteurs de charge sous contrainte uniaxiale (chapitres III, IV et V).

### II.6.1. Bandes de conduction

Les contraintes de cisaillement induisent un déplacement des vallées des bandes de conduction  $\Delta$  le long du chemin  $\Gamma$ -Z (comme mentionné en Section II.5.2. dans le cas d'une couche contrainte Si déposée sur du matériau Ge massif orienté  $\langle 111 \rangle$ ). A de fortes valeurs de contrainte, les vallées "fusionnent", impliquant une modification notable de leurs courbures. La Figure II.40 présente la variation relative des masses de courbure longitudinale  $m_l$  et transverses  $m_t$  des vallées hors-plan  $z$  en fonction de la contrainte  $\langle 110 \rangle$ . Notons le bon accord entre les résultats des méthodes de calcul de structures de bandes GW, EPM et  $k.p$  30 bandes<sup>17</sup>. Les masses de courbures transverses parallèle  $m_{t\parallel}$  et perpendiculaire  $m_{t\perp}$  à la direction  $\langle 110 \rangle$  présentent des variations opposées en fonction de la contrainte. Soulignons que ces masses divergent à de forte valeurs de contrainte. Nous nous attendons à ce que la diminution de la masse de courbure  $m_{t\parallel}$  améliore la mobilité des électrons dans le Si sous contrainte tensile  $\langle 110 \rangle$ .



**Figure II.40:** Variations relatives des masses de courbure longitudinale et transverses des vallées  $\Delta_z$  en fonction de l'intensité d'une contrainte uniaxiale selon la direction  $\langle 110 \rangle$ . Les masses transverses ont été calculées pour des directions parallèle et perpendiculaire à la direction  $\langle 110 \rangle$ . Modèles EPM (tirets) et  $k.p$  (pointillés) et méthode GW.

### II.6.2. Bandes de valence

Comme décrit en Section II.5., les couplages entre les bandes de valence conduisent à une large anisotropie de la structure de bandes autour du point  $\Gamma$  de la PBZ. L'introduction de la contrainte a pour conséquence l'ajout de couplages supplémentaires entre les bandes de valence. Les relations

<sup>17</sup>Les calculs des modèles semi-empiriques  $k.p$  et EPM produisent des résultats qualitativement corrects pour des valeurs de contrainte modérée (jusqu'à 1,5 GPa). Toutefois, la méthode  $k.p$  peut être améliorée dans le calcul des masses à de plus fortes intensités de contrainte.

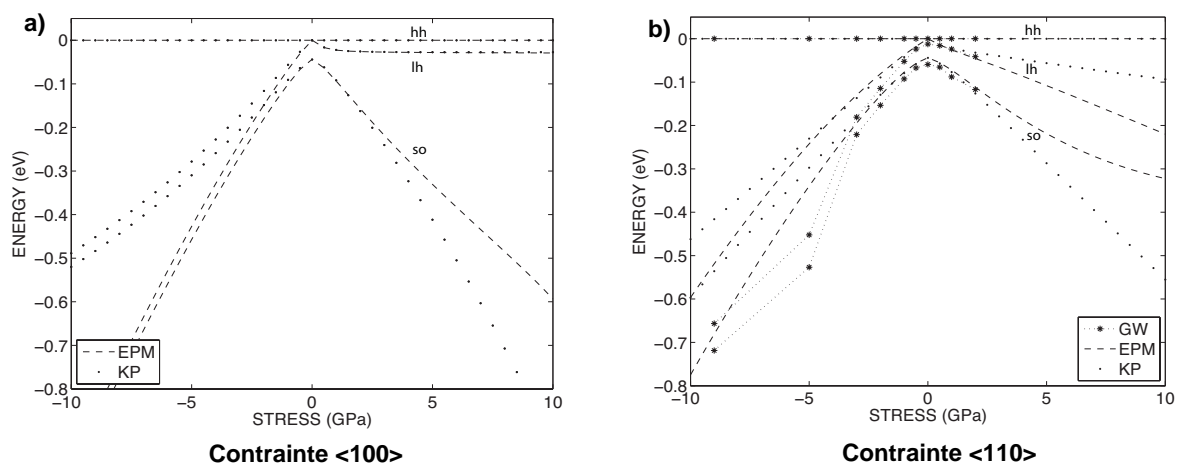
de dispersion sont ainsi fortement modifiées.

Comme démontré par Wang et al. [79], le comportement de la mobilité est fortement influencé par la modification de la structure de bandes sur une zone autour du point  $\Gamma$ . Le déplacement relatif des bandes combiné à la modification des masses de courbure sous contrainte vont amplement modifier le transport des porteurs de charge. En raison de toutes ces caractéristiques, la modélisation des propriétés de transport des trous sous contrainte se trouve être relativement complexe [79][80][81][82].

Nous détaillons ci-dessous, l'influence du déplacement des bandes de valence et des variations de masses de courbures dans les propriétés de transport des matériaux sous contrainte uniaxiale. Les variations des masses de courbures seront considérées sur une zone centrée autour du point  $\Gamma$ .

### II.6.2.1. Déplacement des bandes de valence

La Figure II.41 montre le déplacement relatif des bandes de valence au point  $\Gamma$  en fonction de contraintes uniaxiales  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Ces déplacements sont calculés à partir des structures de bandes 3D du Si, issues des méthodes de calculs  $k.p$ , EPM et GW. L'une des caractéristiques importantes du transport des trous est la dégénérescence des bandes hh et lh au point de relaxation. Les mêmes déplacements sont observés pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Comme nous verrons par la suite, le déplacement similaire des bandes pour ces contraintes ne permet pas de comprendre les différences sur les variations des courants observées pour ces contraintes.

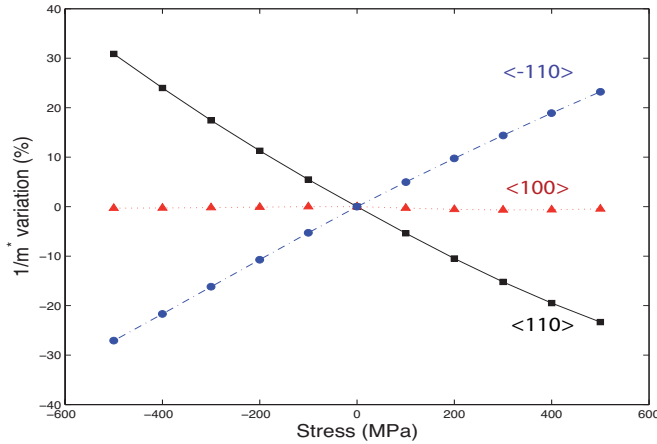


**Figure II.41:** Déplacement relatif  $\Delta_{E_V}$  des bandes de valence en fonction de l'intensité de contraintes uniaxiales **a)**  $\langle 100 \rangle$  et **b)**  $\langle 110 \rangle$ . Les déplacements des bandes sont tracés en maintenant le maximum de la bande de valence hh à une valeur nulle. Les mêmes déplacements de vallées sont observés pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  (non montré). Modèles  $k.p$  30 bandes (pointillés), EPM (tirets) et simulations *ab initio* (symboles).

### II.6.2.2. Courbures de bande selon $\langle 110 \rangle$ : analyse à partir de la variation de l'inverse de la masse

Notamment présente dans l'expression du modèle de Drude (voir chapitre I, Eq-I.5), l'inverse de la masse de courbure est une donnée importante dans le calcul des propriétés de transport. Nous nous proposons dans cette section d'analyser les variations de courbure des bandes de valence sur une zone autour du point  $\Gamma$ .

La variation de la moyenne thermique des masses de courbure le long de la direction  $\langle 110 \rangle$  est représentée en Figure II.42 pour les trois premières bandes de valence en fonction de la valeur des contraintes  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Les structures de bandes 3D des matériaux massifs nécessaires



**Figure II.42:** Variation de la moyenne thermique de l'inverse de la masse de courbure des trois premières bandes de valence selon la direction de transport  $\langle 110 \rangle$  pour les trois directions de contrainte  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . La moyenne thermique est effectuée à partir de la structure de bandes 3D du Si massif. Dans le cas du matériau Si relaxé, l'inverse de la moyenne thermique de la masse vaut 2.77 fois la valeur de la masse inverse de l'électron libre. L'inverse de la moyenne thermique dans les directions de transport  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  sont équivalentes. Afin d'accélérer les calculs dans le cas de la structure de bandes 3D, la méthode  $k.p$  6 bandes analytique a été utilisée. Un ratio de 13: 3:1 sur le temps de calcul est respectivement trouvé entre les méthodes  $k.p$  30 bandes (numérique),  $k.p$  6 bandes (numérique) et  $k.p$  6 bandes (analytique).

au calculs sont issues du modèle  $k.p$  6 bandes analytique (modèle détaillé en Section II.7.1.1.). La variation de l'inverse de la masse moyenne thermique en fonction de la direction de transport  $\hat{n}$ , calculée à partir de la structure de bandes, s'exprime de la manière suivante:

$$\frac{\hbar^2}{m^*_{\hat{n}}} = \frac{\sum_{\alpha} \int \frac{\partial^2}{\partial k_{\hat{n}}^2} E_{\alpha}(k) \exp\left(-\frac{E_{\alpha}(k)}{k_B T}\right) dk^3}{\sum_{\alpha} \int \exp\left(-\frac{E_{\alpha}(k)}{k_B T}\right) dk^3} \tag{Eq-II.55}$$

$E_{\alpha}(k)$  est l'énergie au point  $k$  de la bande d'indice  $\alpha$ .  $T$  est la température du réseau cristallin.

Tout d'abord, après évaluation de l'Eq-II.55, il est notable que la moyenne thermique de la masse de courbure dans la direction  $\langle 110 \rangle$  vaut 2.77 fois la valeur de l'inverse de la masse de l'électron libre (en accord avec la valeur 2.79 de la littérature [81]). Pour une direction  $\langle 100 \rangle$ , cette valeur est identique. Dans le Si non contraint, la masse moyenne est donc isotrope en fonction de la direction de transport. Ceci contraste avec l'anisotropie des masses effectives de courbure au point  $\Gamma$ .

Lorsqu'une contrainte tensile  $\langle 110 \rangle$  ( $\langle \bar{1}10 \rangle$ ) est appliquée, l'inverse de la moyenne thermique des masses de courbure en fonction de la contrainte diminue (augmente). Les tendances inverses sont observées lorsque des contraintes compressives sont appliquées. Dans le cas de la contrainte  $\langle 100 \rangle$ , la variation de la masse est faible.

La variation de la masse des charges sur cette bande en fonction de la contrainte est donc une donnée importante dans la modélisation des propriétés de transport des trous dans les MOSFETs sous contrainte. Ainsi, pour une contrainte tensile  $\langle 110 \rangle$  (contrainte tensile  $\langle \bar{1}10 \rangle$ ), nous attendons donc à une diminution (augmentation) de la mobilité des trous<sup>18</sup>. Les tendances inverses doivent être observées dans le cas des contraintes compressives.

Finalement, nous nous attendons à ce que la variation de la courbure des bandes dans une

<sup>18</sup>Les variations observées sur l'inverse de la masse moyenne dans les cas de contrainte  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  présentent des similitudes avec les variations de courant sous contrainte des simulations Monte Carlo de la littérature [79][80][81]. D'autre part, une asymétrie dans la variation de l'inverse de la masse moyenne est observable pour toutes les directions de contrainte. En effet, la variation est plus faible sous tension que sous compression. Cette asymétrie est, de même, trouvée dans la littérature [79][80][81].

zone autour du point  $\Gamma$  contribue fortement à la mobilité. Une analyse complémentaire sur la base de courbes isoénergies des bandes de valence est effectuée en ANNEXE II.C.

Toutefois, les propriétés de transport ne dépendent pas uniquement des variations de masse de courbure dans une zone proche du point  $\Gamma$ . En effet, la densité d'états est une donnée essentielle qu'il faut prendre en compte dans l'étude des propriétés de transport [79][80][81]. Nous nous attendons à ce que son impact soit particulièrement notable dans la variation de mobilité dans le cas de contraintes  $\langle 100 \rangle$ , dont la moyenne thermique de l'inverse de la masse de courbure est quasiment constante.

## II.7. Calcul analytique du Gap sous contrainte uniaxiale

Le gap est une donnée essentielle dans la modélisation des dispositifs. Il est donc d'un grand intérêt de calculer ce gap de manière analytique tout en étant le plus précis possible. Dans cette section, nous calculons le gap en fonction de la contrainte de manière entièrement analytique. Nous nous focalisons notre étude dans le cas du matériau Si.

Dans un premier paragraphe, nous développons la méthode analytique de calcul de gap. Nous aborderons par ailleurs les spécificités liées à cette méthode. Dans un second paragraphe, nous appliquons cette méthode au calcul du gap sous contrainte uniaxiale.

### II.7.1. Méthode de calcul analytique du gap

La valeur du gap est dépendante du déplacement des bandes de valence et de conduction sous contrainte. Afin de calculer le déplacement des bandes, le développement de cette méthode s'appuie sur deux approches différentes suivant le type de bande considéré:

- Le déplacement des bandes de conduction est modélisé sur la base de la théorie des potentiels de déformation (Section II.2.5.2.1.).
- Le déplacement des bandes de valence est modélisé par un modèle analytique  $k.p$  6 bandes, développé durant cette thèse sur la base des travaux de Chao et Chuang [48].

#### II.7.1.1. Déplacement des bandes de conduction

Comme mentionné en Section II.5.1., L'équivalence en énergie entre les vallées  $\Delta$  est levée lorsqu'une contrainte de cisaillement est appliquée. En effet, le déplacement interne de l'atome interstitiel induit une brisure de symétrie par renversement du temps.

Le déplacement de la vallée  $\Delta_i$  tient compte de cet effet par l'ajout d'un terme quadratique en fonction de la composante de cisaillement du tenseur de déformation,  $\varepsilon_{kl}$  où  $k, l \neq i$ , dans les équations de la théorie des potentiels de déformation (Eq-II.B.4, Eq-II.B.7 de l'ANNEXE II.B). Le déplacement de la vallée s'écrit finalement comme suit:

$$\Delta E_c^{\Delta_i} = \left( \Xi_d^{\Delta} \right) \cdot tr(\bar{\varepsilon}) + \Xi_u^{\Delta} \varepsilon_{ii} + \beta \varepsilon_{kl}^2 \quad \text{Eq-II.56}$$

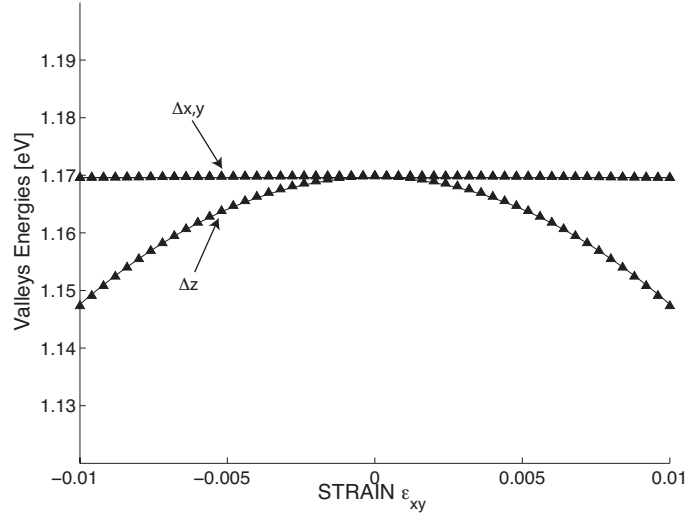
$\bar{\varepsilon}$  correspond au tenseur de déformation dont les composantes de déformation uniaxiale et de cisaillement sont respectivement  $\varepsilon_{ii}$  et  $\varepsilon_{ij}$ .  $\beta$  correspond au potentiel de déformation associé au déplacement interne sous contrainte de cisaillement.

Finalement, les énergies des bandes  $\Delta_i$  sous contraintes s'expriment en fonction de la valeur du gap du matériau relaxé  $E_g$  par:

$$E_c^{\Delta_i} = E_g + \Delta E_c^{\Delta_i} \quad \text{Eq-II.57}$$



Le potentiel de déformation du “déplacement interne” a été ajusté aux calculs du modèle  $k.p$  30 bandes. Dans le cas du Si, la valeur de potentiel de  $\beta = 220$  eV. Nous montrons en Figure II.43 l’impact de la seule composante de cisaillement  $\varepsilon_{xy}$  du tenseur de déformation (voire Eq-II.A.1 de l’annexe ANNEXE II.A) sur le déplacement des bandes de conduction, calculé par le modèle analytique et  $k.p$  30 bandes. L’abaissement de la vallée  $z$  sous l’effet de la contrainte de cisaillement, montré par le modèle  $k.p$  30 bandes, est bien reproduit par le modèle analytique.



**Figure II.43:** Déplacements des vallées  $\Delta$  en fonction de la composante de cisaillement  $\varepsilon_{xy}$ . Modèles numérique  $k.p$  30 bandes (tirets) et analytique du potentiel de déformation “modifié” (lignes continues).

La modélisation assez simple du déplacement des vallées  $\Delta$  par les effets de cisaillement a été confortée par la publication ultérieure du modèle analytique  $k.p$  2 bandes de [83]. Les deux approches aboutissent à la présence d’un terme quadratique en  $k$  en fonction de la composante de cisaillement du tenseur de déformation<sup>19</sup>.

### II.7.1.2. Déplacement des bandes de valence

L’Hamiltonien du modèle  $k.p$  6 bandes peut être résolu de manière analytique du fait de la faible dimension de sa matrice. A l’instar de l’Hamiltonien du  $k.p$  30 bandes, la contrainte dans le  $k.p$  6 bandes de Luttinger (Eq-II.39) s’effectue en ajoutant un terme perturbatif de Pikus-Bir, de telle façon que les termes de couplage de l’Eq-II.39 deviennent:

$$\begin{aligned}
 P &= P_k + P_\varepsilon \\
 Q &= Q_k + Q_\varepsilon \\
 R &= R_k + R_\varepsilon \\
 S &= S_k + S_\varepsilon
 \end{aligned}
 \tag{Eq-II.58}$$

où les termes  $P_k$ ,  $Q_k$ ,  $R_k$  et  $S_k$  de l’Hamiltonien, dépendants de  $k$ , sont exprimés par les relations Eq-II.40.

<sup>19</sup>Le modèle proposé de potentiel de déformation modifié ne tient uniquement compte que du déplacement des bandes de conduction sous contrainte. Les variations de masse sous contrainte de cisaillement, observées en Figure II.40, ne sont, quant à elles, pas prises en compte. Remarquons que la release 2007.12 de Synopsys [84] présente un modèle analytique de variation de masse, sur la base des travaux de la Ref. [77]. Des études menées durant cette thèse (non détaillées dans ce manuscrit) montrent un accord parfait entre les résultats de ce modèle analytique et ceux obtenus de nos solutions numériques EPM non local [20].

Les termes  $P_\varepsilon$ ,  $Q_\varepsilon$ ,  $R_\varepsilon$  et  $S_\varepsilon$  dépendants de la contrainte sont tels que:

$$\begin{aligned} P_\varepsilon &= -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\ Q_\varepsilon &= -\frac{b_v}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \\ R_\varepsilon &= \frac{\sqrt{3}}{2}b_v(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy} \\ S_\varepsilon &= -d_v(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) \end{aligned} \quad \text{Eq-II.59}$$

$\varepsilon_{ij}$  correspond aux composantes du tenseur de déformation.  $a_v$ ,  $b_v$  et  $d_v$  sont respectivement les potentiels de déformation hydrostatique, uniaxiale et de cisaillement de Pikus et Bir, listés en Tableau II.9.

La résolution analytique de l'Hamiltonien s'effectue suivant deux principales étapes:

(i) A partir des travaux de Chao et Chuang [48], l'Hamiltonien de Luttinger-Kohn (Eq-II.39) est transformé en utilisant une combinaison linéaire appropriée de fonctions de Bloch. Il s'exprime alors comme suit:

$$H_{Chao} = \begin{bmatrix} P+Q & -\sqrt{3}R & \frac{\sqrt{3}}{2}S & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}R & P+Q+\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{3}}{2}S & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3}\Delta \\ \frac{\sqrt{3}}{2}S & \frac{\sqrt{3}}{2}S & P-2Q+\frac{\Delta}{3} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P+Q-\sqrt{3}R & \frac{\sqrt{3}}{2}S & \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & -\sqrt{3}R & P+Q+\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{3}}{2}S \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}S & \frac{\sqrt{3}}{2}S & P-2Q+\frac{\Delta}{3} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.60}$$

A l'aide de l'identité mathématique [48] ci-dessous,

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & x \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & 0 & -x & a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 0 & x & 0 & a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \left( \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{11}x^2 \right)^2, \quad \text{Eq-II.61}$$

nous obtenons le polynôme caractéristique:

$$\det(H_{ij} - \delta_{ij}E) = \left\{ \varepsilon^3 - 3\lambda\varepsilon - \mu + \Delta[\varepsilon^2 - \lambda] \right\}^2 \quad \text{Eq-II.62}$$

avec

$$\begin{cases} \varepsilon = E + P \\ \lambda = Q^2 + |S|^2 + |R|^2 \\ \mu = 2Q^3 + 3Q|S|^2 - 6Q|R|^2 + \frac{3\sqrt{3}}{2} \left( S^2 R + \left\{ S + \right\}^2 R \right) \end{cases}$$

$\Delta$  correspond à énergie du décalage spin-orbite des états  $\Gamma_{25'}^l$ .

(ii) La résolution de l'équation du troisième ordre du déterminant,  $\det(H_{ij} - \delta_{ij}E) = 0$ , s'effectue avec la méthode de Cardan [85]. Finalement, nous obtenons les expressions des énergies des premières bandes de valence<sup>20</sup>:

$$E_{v,1} = 2\sqrt{\lambda + \frac{\Delta^2}{9}} \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right), E_{v,2} = 2\sqrt{\lambda + \frac{\Delta^2}{9}} \cos\left(\frac{\varphi + 2\pi}{3}\right) \text{ et } E_{v,3} = 2\sqrt{\lambda + \frac{\Delta^2}{9}} \cos\left(\frac{\varphi + 4\pi}{3}\right) \quad \text{Eq-II.63}$$

$$\text{avec } \varphi = 2 \cdot \arccos\left(\frac{3\mu - \frac{2\Delta^3}{9}}{6\lambda - \frac{2\Delta^2}{3}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\lambda + \frac{\Delta^2}{9}}}\right)$$

Un modèle analytique équivalent a été publié [86], basé sur les travaux de Manku et al. [87]. Notons que le modèle proposé requiert moins d'efforts de programmation que ce dernier modèle.

Les résultats obtenus par les modèles  $k.p$  6 bandes analytique et numérique sont identiques<sup>21</sup>. La méthode analytique est appliquée dans le calcul des relations de dispersion des bandes de valence de matériaux sous contraintes uniaxiales (Section II.7.2.).

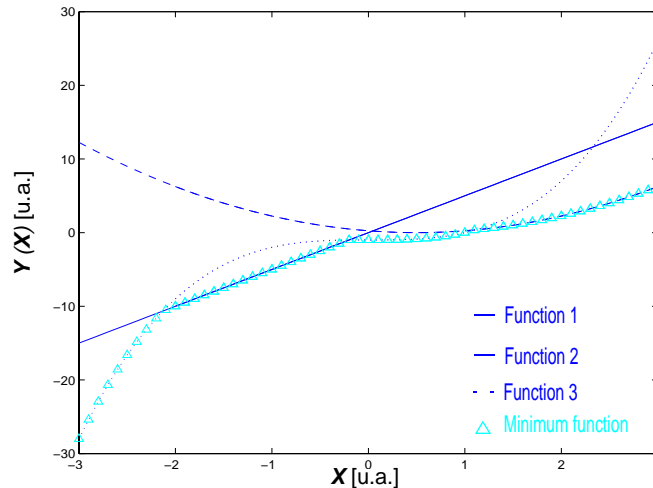
Lors de la modélisation du gap, seules les valeurs des énergies des bandes de valence en  $\Gamma$  sont prises en compte.

### II.7.1.3. Fonction minimum analytique

Afin de calculer le gap  $E_g$ , le minimum des bandes de conduction et le maximum de la bande de valence doivent être déterminés, tels que:

$$E_g = \text{Min}(E_c) - \text{Max}(E_v) \quad \text{Eq-II.64}$$

En accord avec les spécifications de la modélisation analytique des dispositifs (ou *modèle compact*), une fonction analytique continue et dérivable a été élaborée. Cette fonction, montrée en Figure II.44, permet de calculer le minimum entre trois valeurs distinctes. Cette fonction s'écrit de la



**Figure II.44:** Valeurs minimales issues d'une fonction analytique continue et dérivable (symboles) à partir de valeurs calculées par trois fonctions (lignes).

<sup>20</sup>Nous obtenons 3 solutions analytiques. Avec la dégénérescence de spin, nous calculons donc les énergies des 6 bandes de la méthode  $k.p$  6 bandes.

<sup>21</sup>Des différences peuvent apparaître dans la description de la structure de bandes entre les modèles  $k.p$  30 bandes et  $k.p$  6 bandes en bordure de zone de brillouin (non montrées dans ce manuscrit). En effet, comme mentionné en Section II.2., le modèle  $k.p$  30 bandes comporte des couplages entre les bandes de conduction et de valence qui ne sont pas pris en compte par l'Hamiltonien du  $k.p$  6 bandes.

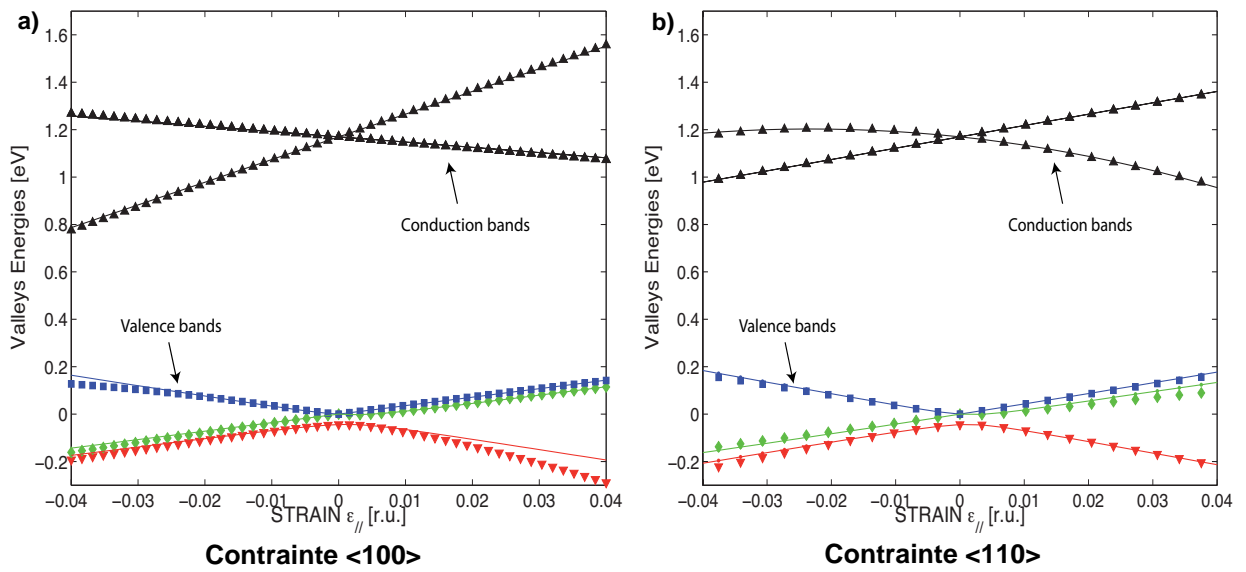
manière suivante:

$$F_{min}(F1, F2, F3) = 0,5 \left\{ 0,5(F1 + F2) - 0,5\sqrt{(F1-F2)^2 + \varepsilon} + F3 - \sqrt{\left[ 0,5(F1 + F2) - 0,5\sqrt{(F1-F2)^2 + \varepsilon} - F3 \right]^2 + \varepsilon} \right\} \quad \text{Eq-II.65}$$

Par cette fonction, nous pouvons donc calculer la valeur minimale des trois valeurs de bandes de conduction  $E_{c,1}$ ,  $E_{c,2}$  et  $E_{c,3}$  (Eq-II.57) à chaque valeur de contrainte. La valeur maximale des énergies des bandes de valence, à chaque valeur de contrainte, est déterminée via la valeur minimale de l'opposée des énergies des bandes de valence  $E_{v,1}$ ,  $E_{v,2}$  et  $E_{v,3}$  (Eq-II.63).

## II.7.2. Résultats des déplacements des bandes

Les déplacements des bandes de valence et de conduction sont montrés en Figure II.45 en fonction de la composante parallèle de déformation sous contraintes uniaxiales  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Ces déplacements sont calculés à partir des modèles analytiques ( $k.p$  6 bandes et théorie des potentiels de déformation modifiée) et du modèle numérique du  $k.p$  30 bandes.

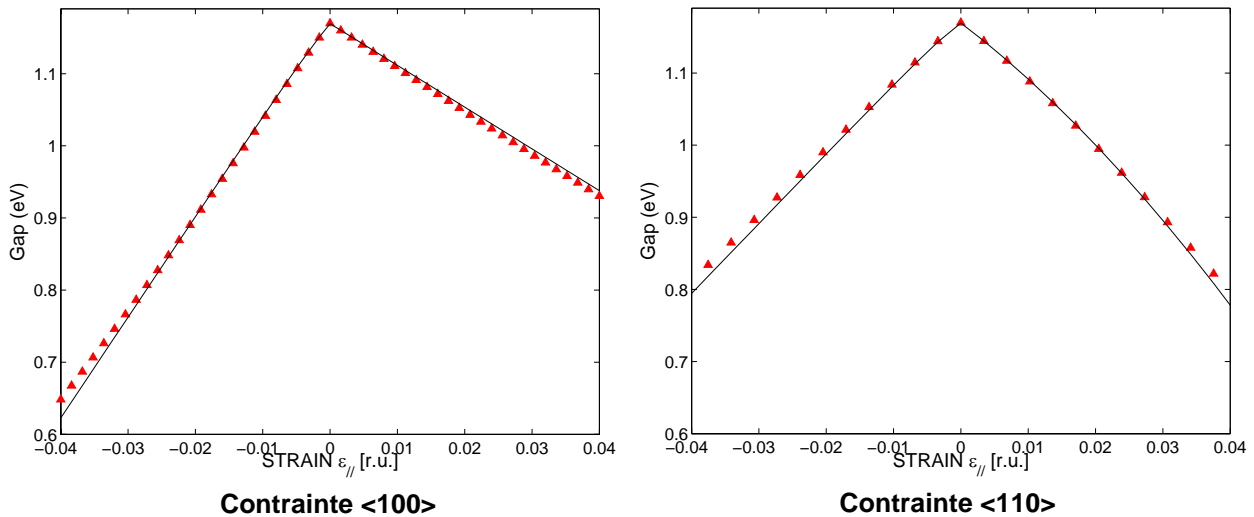


**Figure II.45:** Déplacement des bandes de conduction et de valence du Si en fonction de la composante de déformation parallèle  $\varepsilon_{||}$  pour les contraintes uniaxiales **a)**  $\langle 100 \rangle$  et **b)**  $\langle 110 \rangle$ . Les mêmes déplacements sont observés pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ . Les composantes sont exprimées selon la direction de la contrainte. Modèle analytique  $k.p$  6 bandes et théorie des potentiels de déformation modifiée (lignes), modèle numérique  $k.p$  30 bandes (symboles).

Les faibles différences dans les résultats entre les modèles  $k.p$  6 et 30 bandes proviennent des couplages supplémentaires entre les bandes de valence et de conduction pris en compte dans le modèle  $k.p$  30 bandes.

## II.7.3. Valeurs de Gap sous contraintes uniaxiales

Les valeurs du gap obtenues du déplacement des bandes de valence et de conduction en fonction de la déformation sont montrées en Figure II.46 pour les contraintes  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Les valeurs de gap sont calculées à l'aide de la fonction minimum dérivable et continue (Eq-II.65). Un bon accord est trouvé entre les modèle analytique et numérique, que des composantes de cisaillement soient présentes ou non dans l'expression du tenseur de déformation (Tableau II.A.3). Une nouvelle fois, les faibles différences entre les résultats des deux modèles sont attribuées aux couplages supplémentaires pris en compte par l'Hamiltonien  $k.p$  30 bandes.



**Figure II.46:** Energie de gap du Si en fonction de la composante de déformation parallèle  $\varepsilon_{\parallel}$  pour les contraintes uniaxiales  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Les mêmes déplacements sont observés pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ . Les composantes sont exprimées selon la direction de la contrainte. Modèle de gap analytique (lignes), valeurs de gap issues du modèle  $k.p$  30 bandes (symboles).

## II.8. Discussion et Conclusion

Un ensemble de simulations *ab initio*, qui inclue des corrections GW et des effets relativistes, a été effectué sur les matériaux Si, Ge et les alliages SiGe afin d'obtenir des informations sur les structures électroniques, non adressées par les expériences. Une fois qu'un ensemble de structures de référence a été obtenu, nous avons optimisé le modèle  $k.p$  30 bandes en utilisant une procédure gradient-conjugué afin de correspondre au mieux les résultats obtenus à ceux issus des simulations *ab initio* sur l'ensemble de la première zone de Brillouin. De surcroît, nous nous sommes aussi attachés, par cette optimisation, à décrire précisément les masses effectives et les paramètres de Luttinger des porteurs de charge en comparaison des simulations *ab initio* et des données expérimentales. Par ailleurs, les alliages SiGe sont modélisés par le modèle  $k.p$  avec une simple interpolation entre les paramètres des matériaux Si et Ge. Des simulations complémentaires effectuées à l'aide d'un EPM non local de Chelikowsky et Cohen [3] sont en bon accord avec les résultats des méthodes *ab initio* et  $k.p$  sur l'ensemble des comparaisons.

La procédure adoptée apporte des informations supplémentaires dans la description des structures de bandes dans les matériaux massifs. Le modèle  $k.p$  30 bandes, élaboré durant cette thèse, améliore les paramètres publiés des Réfs. [35] et [36] pour les matériaux massifs. Les principaux arguments sont les suivants:

(i) En utilisant les simulations *ab initio*, des données non fournies expérimentalement jusqu'à présent (bandes à hauts niveaux d'énergie et masses effectives des seconds minima de bandes de conduction) ont été prises en compte dans le développement du modèle  $k.p$  présenté.

(ii) Les paramètres pris en compte étendent la prédiction du modèle  $k.p$  aux alliages SiGe. Les composants SiGe ont été modélisés en utilisant des fonctions d'interpolation entre les paramètres  $k.p$  du Si et du Ge. Des décalages spin-orbite supplémentaires et des levées de dégénérescence (relatives à la brisure de centrosymétrie de la cellule élémentaire) ont été considérés avec l'ajout de paramètres de couplage supplémentaires dans le modèle  $k.p$ . Ces paramètres ont été ajustés aux données fournies par les simulations *ab initio*.

La structure électronique d'une couche contrainte  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  déposée sur du matériau massif  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , est étudiée en utilisant les simulations *ab initio*. En première approche, nous avons vérifié que les potentiels de déformation théoriques calculés par simulations *ab initio* (Tableau II.9) sont cohérents avec les potentiels expérimentaux sur les cas spécifiques des couches épitaxiées de Si et Ge déposées sur des matériaux massifs relaxés orientés selon les directions  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Par la suite, les termes correctifs Pikus-Bir du modèle  $k.p$  et les potentiels de déformation ont été examinés dans le cadre du formalisme du modèle  $k.p$  30 bandes de Cardona et Pollak [35]. En parallèle, un second ensemble de comparaisons a été réalisé sur un modèle EPM non local incluant les corrections relativistes [3]. Une nouvelle fonction d'interpolation est proposée à l'issue de ce travail afin de reproduire au mieux les potentiels de déformation expérimentaux. La fonction d'interpolation correspond à une fonction polynômiale, passant par les pseudo-potentiels de Chelikowsky et Cohen [3].

Par la procédure d'ajustement appliquée aux cas des matériaux contraints, nous avons veillé à ce que les calculs des modèles  $k.p$  et EPM soient comparés avec succès aux solutions obtenues des simulations *ab initio*. Les modèles semi-empiriques proposés capturent les principales caractéristiques des structures de bandes des cristaux contraints, telles que les variations des bandes d'énergie [65] et des masses de courbure en fonction de la contrainte [28][30][31][53]. Particulièrement, les potentiels de déformation calculés à partir des modèles  $k.p$  et EPM sont en excellent accord avec les potentiels expérimentaux. Ceci n'est pas le cas des modèles  $k.p$  20 bandes [88] pour du Si sous contrainte biaxiale. Dans ce modèle, des contributions importantes de la contrainte ne sont pas prises en compte. En effet, le comportement des bandes de conduction dans le Si et Ge dépend fortement des termes  $w_k$  et  $w_{\Gamma,\Gamma}$  de la matrice de perturbation. Le fait de négliger ces termes aboutit à une large sous-estimation du déplacement relatif des vallées des bandes de conduction (équivalentes en énergie dans les matériaux relaxés) les unes par rapport aux autres et du changement des masses de courbure. La symétrie par renversement du temps (par exemple, la dégénérescence au point X dans le cas d'une croissance  $\langle 001 \rangle$ , voir Figure II.27) et de correctes variations de bandes des vallées  $L$  ne peuvent être obtenues sans ces contributions.

Finalement, les méthodes  $k.p$  et EPM ont été validées à l'aide d'un ensemble de comparaisons avec les données expérimentales concernant les alliages relaxés et contraints  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ . Les modèles  $k.p$  et EPM proposés présentent un excellent compromis entre précision et temps de calcul dans la description de l'intégralité de la structure de bandes des matériaux Si, Ge et SiGe. De même, ces modèles reproduisent, de façon précise et efficace, les déplacements de bandes et les masses effectives des porteurs de charge en fonction de la contrainte.

Par ailleurs, un nouveau modèle de gap analytique a été développé durant cette thèse. Le déplacement des bandes de conduction, sur la base de la théorie des potentiels de déformation, prend en compte la levée de l'équivalence en énergie des vallées sous contrainte de cisaillement. Les bandes de valence sont décrites par une résolution analytique de l'Hamiltonien  $k.p$  6 bandes. Le déplacement des bandes a été validé par comparaison avec les solutions numériques du modèle  $k.p$  30 bandes. Enfin, le calcul du gap, par le biais d'une fonction minimum continue et dérivable, se trouve en conformité avec les spécifications des modèles compacts.

Nous verrons en chapitre III qu'une description rigoureuse de la mobilité des porteurs de charge dans les dispositifs sous contraintes à base de canaux Si, est étroitement reliée à une description précise des structures de bandes. L'approche Monte Carlo "full band", qui résout de manière statistique l'équation du transport de Boltzmann (voir chapitre III), permet d'estimer les courants dans les dispositifs à l'échelle nanométrique. La plupart des Monte Carlo "à l'état de l'art" [31][49][56] sont basés sur des calculs EPM. Dans ce chapitre, nous montrons que les propriétés de transport calculées à l'aide des structures de bandes issues des méthodes EPM non local et  $k.p$  sont proches.

---

## Références

- [1] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, (HRW International Editions, 1988).
- [2] F. Gilibert, *Modélisation des contraintes dans les dispositifs Si/SiGe basée sur l'analyse des structures de bandes*, Thèse de doctorat: Université de Provence, Ecole Doctorale Physique Modélisation et Sciences pour l'Ingénieur, 2005.
- [3] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, "Nonlocal pseudopotential calculations for electronic-structure of 11 diamond and zinblende semiconductors", *Physical Review B*, vol.14, no.2, pp. 556-582 1976.
- [4] R. M. Martin, *Electronic Structure: Basis Theory and practical Methods*, (Cambridge University Press, 2004).
- [5] R. G. Parr, W. Yang, *Density Theory of Atoms and Molecules*, (Oxford University Press, 1989).
- [6] P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas", *Physical Review*, vol.136, no.3B, pp. B864-B871 1964.
- [7] W. Kohn and L. J. Sham, "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects", *Physical Review*, vol.140, no.4A, pp. A1133-A1138 1965.
- [8] P. Boulenc, "*Etude théorique d'interfaces pour l'épitaxie de l'aluminate de lanthane sur Silicium*", Thèse de doctorat: l'université des Sciences et Technologies à Lille, 2006.
- [9] W. G. Aulbur, L. Jönsson and J. W. Wilkins, "Quasiparticle calculations in solids", [http://www.physics.ohio-state.edu/~wilkins/vita/gw\\_review.ps](http://www.physics.ohio-state.edu/~wilkins/vita/gw_review.ps).
- [10] W. G. Aulbur, L. Jonsson and J. W. Wilkins, "Quasiparticle calculations in solids", *Solid State Physics: Advances in Research and Applications*, Vol.54, vol.54, pp. 1-218 2000.
- [11] M. S. Hybertsen and S. G. Louie, "1st-principles theory of quasiparticles - calculation of band-gaps in semiconductors and insulators", *Physical Review Letters*, vol.55, no.13, pp. 1418-1421 1985.
- [12] M. Rohlfiing, P. Kruger and J. Pollmann, "Quasi-particle band-structure calculations for C, Si, Ge, GaAs, and SiC using gaussian-orbital basis-sets", *Physical Review B*, vol.48, no.24, pp. 17791-17805 1993; M. Rohlfiing, P. Kruger and J. Pollmann, "Efficient scheme for GW quasiparticle band-structure calculations with applications to bulk Si and to the Si(001)-(2x1) surface", *Physical Review B*, vol.52, no.3, pp. 1905-1917 1995.
- [13] C. Hartwigsen, S. Goedecker and J. Hutter, "Relativistic separable dual-space gaussian pseudopotentials from H to Rn", *Physical Review B*, vol.58, no.7, pp. 3641-3662 1998.
- [14] D. M. Ceperley and B. J. Alder, "Ground-state of the electron-gas by a stochastic method", *Physical Review Letters*, vol.45, no.7, pp. 566-569 1980.
- [15] V. Fiorentini, "Semiconductor band structures at zero pressure", *Physical Review B*, vol.46, no.4, pp. 2086-2091 1992.
- [16] *Physics of Group IV Elements and III-V Compounds*, edited by O. Madelung, Landolt-Bornstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group III (Springler-Verlag, Berlin, 1982), Vol. 17a.
- [17] L. Hedin, "New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem", *Physical Review*, vol.139, no.3A, pp. A796-A823 1965.
- [18] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, "Special points for brillouin-zone integrations", *Physical Review B*, vol.13, no.12, pp. 5188-5192 1976.

- [19] J. P. Dismukes, L. Ekstrom, and R. J. Paff, "Lattice Parameter and Density in Germanium-Silicon Alloys, *Journal of Physical Chemistry*, vol.68, no.10, pp. 3021-3027 1964.
- [20] D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini, M. Minondo, C. Tavernier, H. Jaouen and A. Ghetti, "Strained Si, Ge, and Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> alloys modeled with a first-principles-optimized full-zone k.p method", *Physical Review B*, vol.74, no.19, pp.195208-195228 2006.
- [21] Y. M. Niquet, D. Rideau, C. Tavernier, H. Jaouen and X. Blase, "Model for the on-site matrix elements of the tight-binding hamiltonian of a strained cristal: Application to silicon germanium and alloys", Submitted to *Physical Review B*, arXiv:0902.0491, 2009.
- [22] C. Tserbak and G. Theodorou, "Energy band structure and linear optical properties of Si and Ge strained along [111] and [110] directions", *Physical Review B*, vol.52, no.16, pp.12232-12240 1995; C. Tserbak, H. M. Polatoglou and G. Theodorou, "Unified approach to the electronic structure of strained Si/Ge superlattices", vol.47, no.12, pp.7104-7124 1993.
- [23] Q. M. Ma, K. L. Wang and J. N. Schulman, "Band-structure and symmetry analysis of coherently grown Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> alloys on oriented substrates", *Physical Review B*, vol.47, no.4, pp. 1936-1953 1993.
- [24] J. C. Phillips and L. Kleinman, "New Method for Calculating Wave Functions in crystals and Molecules", *Physical Review* 116, pp. 287-294 1959.
- [25] D. Brust, "Nonlocal Corrections to the Band Structure of Si, Ge, and alpha -Sn", *Physical Review B*, vol.4, no.10, pp. 3497-3501 1971.
- [26] G. Martinez, M. Schluter and M. L. Cohen, "Electronic-structure of PbSe and PbTe.I, Band structures, densities of states, and effective masses", *Physical Review B*, vol.11, no.2, pp. 651-659 1975.
- [27] W. Potz and P. Vogl, "Theory of optical-phonon deformation potentials in tetrahedral semiconductors", *Physical Review B*, vol.24, no.4, pp. 2025-2037 1981.
- [28] M. A. Gell, "Effect of buffer-layer composition on new optical-transitions in Si/Ge short-period superlattices", *Physical Review B*, vol.38, no.11, pp. 7535-7553 1988; M. Gell, "Effective masses and sum-rules in strained Si/Ge structures", *Physical Review B*, vol.41, no.11, pp. 7611-7614 1990.
- [29] P. Friedel, M. S. Hybertsen and M. Schluter, "Local empirical pseudopotential approach to the optical-properties of Si/Ge superlattices", *Physical Review B*, vol.39, no.11, pp. 7974-7977 1989.
- [30] M. M. Rieger and P. Vogl, "Electronic-band parameters in strained Si<sub>(1-x)</sub>Ge<sub>(x)</sub> alloys on Si<sub>(1-y)</sub>Ge<sub>(y)</sub> substrates", *Physical Review B*, vol.48, no.19, pp. 14276-14287 1993.
- [31] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys", *Journal of Applied Physics*, vol.80, no.4, pp. 2234-2252 1996.
- [32] G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel, "Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium", *Physical Review*, vol.98, no.2, pp. 368-384 1955.
- [33] C. R. Pidgeon and R. N. Brown, "Interband Magneto-Absorption and Faraday Rotation in InSb", *Physical Review*, vol.146, no.2, pp. 575-583 1966.
- [34] M. El kurdi, G. Fishman, S. Sauvage and P. Boucaud, "Comparison between 6-band and 14-band k.p formalisms in SiGe/Si heterostructures", *Physical Review B*, vol.68, no.16, pp. 165333-165349 2003.
- [35] M. Cardona and F. Pollak, "Energy\_Band Structure of Germanium and Silicon: the k.p method", *Physical Review*, vol.142, no.2, pp. 530-543 1966.
- [36] F. Pollak, M. Cardona, C. W. Higginbotham, F. Herman and J. P Van Dyke, "Energy-Band Structure and Optical Spectrum of Grey Tin", *Physical Review B*, vol.2, no.2, pp. 352-363 1970.



- [37] S. Richard, F. Aniel and G. Fishman, "Energy-band structure of Ge, Si, and GaAs: A thirty-band k.p method", *Physical Review B*, vol.70, no.23, pp. 235204-235210 2004; S. Richard, F. Aniel and G. Fishman, "Erratum: Energy-band structure of Ge, Si, and GaAs: A thirty-band k.p method", *Physical Review B*, vol.71, no.16, pp. 169901 2005.
- [38] R. G. Humphreys, "Valence band averages in silicon - anisotropy and non-parabolicity", *Journal of Physics C-Solid State Physics*, vol.14, no.21, pp. 2935-2942 1981.
- [39] L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, and E. Wigner, "Theory of Brillouin Zone and Symmetry Properties of Wave Functions in crystals", *Physical Review*, vol.50, no.1, pp. 58-67 1936.
- [40] N. Cavassilas, F. Aniel, K. Boujdaria and G. Fishman, "Energy-band structure of GaAs and si: A sp<sup>s</sup>\* k.p method", *Physical Review B*, vol.64, no.11, pp. 115207-115212 2001.
- [41] X. J. Zhu, S. Fahy and S. G. Louie, "Abinitio calculation of pressure coefficients of band-gaps of silicon - comparison of the local-density approximation and quasiparticle results", *Physical Review B*, vol.39, no.11, pp. 7840-7847 1989.
- [42] P. Lautenschlager, M. Garriga, L. Vina and M. Cardona, "Temperature-dependence of the dielectric function and interband critical-points in silicon", *Physical Review B*, vol.36, no.9, pp. 4821-4830 1987.
- [43] L. Vina, S. Logothetidis, and M. Cardona, "Temperature dependence of the dielectric function of germanium", *Physical Review B*, vol.30, no.4, pp.1979-1991 1984.
- [44] U. Schmid, N. E. Christensen and M. Cardona, "Relativistic band-structure of Si, Ge, and GeSi - inversion-asymmetry effects", *Physical Review B*, vol.41, no.9, pp. 5919-5930 1990.
- [45] F. Schaffler, "High-mobility Si and Ge structures", *Semiconductor Science and Technology*, vol.12, no.12, pp. 1515-1549 1997.
- [46] J. M. Luttinger et W. Kohn, "Motion of Electron and Holes in Perturbed Periodic Fields", *Physical Review*, vol.97, no.4, pp. 869-883 1955.
- [47] J. M. Luttinger, "Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductor: General Theory", *Physical Review*, vol.102,no.4, pp. 1030-1041 1956.
- [48] C. Y. P. Chao and S. L. Chuang, "Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum-wells", *Physical Review B*, vol.46, no.7, pp. 4110-4122 1992.
- [49] M. Feraille, D. Rideau, A. Ghetti, A. Poncet, C. Tavernier, and H. Jaouen, "Low-Field Mobility in Strained Silicon with 'Full' Band' Monte Carlo Simulation using k.p and EPM Band structure", *SISPAD 2006: Proceedings of the International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, pp. 264-266 2006; A. Ghetti and D. Rideau, "3D Monte Carlo Device Simulation of NanoWire MOSFETs including Quantum Mechanical and Strain Effects", *SISPAD 2006: Proceedings of the International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, pp. 67-70 2006.
- [50] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, ( 2<sup>nd</sup> revised edition, John Wiley, 1987).
- [51] J. E. Ortega and F. J. Himpsel, "Inverse-photoemission study of Ge(100), Si(100), and GaAs(100) - bulk bands and surface-states", *Physical Review B*, vol.47, no.4, pp. 2130-2137 1993.
- [52] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, "Electronic structure of silicon", *Physical Review B*, vol.10, no.12, pp. 5095-5107 1974.
- [53] D. E. Aspnes and M. Cardona, "Strain dependence of effective masses in tetrahedral semiconductors", *Physical Review B*, vol.17, no.2, pp. 726-740 1978.
- [54] P. Lawaetz, "Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors", *Physical Review B*, vol.4, no.10, pp.

3460-3467 1971.

- [55] O. A. Makarov, N. N. Ovsyuk, and M. P. Sinyukov, "Oscillating electroreflectance of germanium with allowance for electron-hole Coulomb interaction", Soviet Physics JETP, vol.57, no.6, pp. 1318-1323 1983 [Zh. Eksp. Theor. Fiz. 84, pp. 2261-2267 1983].
- [56] B. W. Levinger and D. R. Frankl, "cyclotron resonance measurements of the energy band parameters of germanium", Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol.20, no.3, pp. 281-288 1961.
- [57] J. Halpern and B. Lax, "magnetoabsorption of the indirect transition in germanium", Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol.26, no.5, pp. 911-919 1965.
- [58] O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, (2<sup>nd</sup> printing, Springer-Verlag, 1981).
- [59] G. Gilat and L. J. Raubenheimer, "Frequency-Distribution functions in Solids", Physical Review, vol.144, no.2, pp.390-395 1966.
- [60] P. Fantini, A. Ghetti, G. P. Carnevale, E. Bonera and D. Rideau, "A full self-consistent methodology for strain-induced effects characterization in silicon devices", IEEE International Electron Devices Meeting 2005, Technical Digest, pp. 1013-1016 2005.
- [61] L. Kleinman, "Deformation Potentials in Silicon. I. Uniaxial Strain", Physical Review, vol.128, no.6, pp. 2614-2621 1962; L. Kleinman, "Deformation Potentials in Silicon. II. Hydrostatic Strain and the Electron-Phonon Interaction", vol.130, no.6, pp. 2283-2289 1963; I. Goroff and L. Kleinman, "Deformation Potentials in Silicon. III. Effects of a general Strain Conduction and Valence Levels", Physical Review, vol.132, no.3, pp. 1080-1084 1963.
- [62] C. S. G. Cousins, L. Gerward, J. S. Olsen, B. Selsmark and B. J. Sheldon, "Surface effects in uniaxially stressed crystals - the internal-strain parameters of silicon and germanium revised", Journal of Physics C-Solid State Physics, vol.20, no.1, pp. 29-37 1987.
- [63] H. J. McSkimin, "Measurement of elastic Constant at low Temperatures by Means of Ultrasonic Waves-Data for Silicon and Germanium Single crystals, and for Fused Silica", Journal of Applied Physics, vol.24, no.8, pp. 988-997 1953.
- [64] Z. H. Levine, J. H. Burnett and E. L. Shirley, "Photoelastic and elastic properties of the fluorite structure materials, LiF, and Si", Physical Review B, vol.68, no.15, pp. 155120-155132 2003.
- [65] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, "Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system", Physical Review B, vol.34, no.8, pp. 5621-5634 1986.
- [66] J. Sanchez-Dehesa, C. Tejedor and J. A. Verges, "Self-consistent calculation of the internal strain parameter of silicon", Physical Review B, vol.26, no.10, pp. 5960-5962 1982.
- [67] O. H. Nielsen and R. M. Martin, "Quantum-mechanical theory of stress and force", Physical Review B, vol.32, no.6, pp. 3780-3791 1985 ; O. H. Nielsen and R. M. Martin, "Stresses in semiconductors - abinitio calculations on Si, Ge, and GaAs", Physical Review B, vol.32, no.6, pp. 3792-3805 1985.
- [68] Y. Umeno and T. Kitamura, "Ab initio simulation on ideal shear strength of silicon", Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology, vol.88, no.1, pp. 79-84 2002.
- [69] E. Pikus and G. L. Bir, "Effect of deformation on the hole energy spectrum of germanium and silicon", Soviet Physics - Solid State, vol.1, pp. 1502-1517 1959, [Fiz. Tverd. Tela 1, pp.1642 1959].
- [70] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique Tome 1 et 2*, (Edition Hermann, Paris, 1973).
- [71] M. Chandrasekhar and F. H. Pollak, "Effects of uniaxial stress on electroreflectance spectrum of Ge and GaAs", Physical Review B, vol.15, no.4, pp. 2127-2144 1977.

- [72] G. S. Cargill, J. Angilello and K. L. Kavanagh, "Lattice compression from conduction electrons in heavily doped Si-As", *Physical Review Letters*, vol.61, no.15, pp. 1748-1751 1988.
- [73] D. D. Nolte, W. Walukiewicz and E. E. Haller, "Band-edge hydrostatic deformation potentials in III-V semiconductors", *Physical Review Letters*, vol.59, no.4, pp. 501-504 1987.
- [74] Y. H. Li, X. G. Gong and S. H. Wei, "Ab initio all-electron calculation of absolute volume deformation potentials of IV-IV, III-V, and II-VI semiconductors: The chemical trends", *Physical Review B*, vol.73, no.24, pp. 245206-245211 2006.
- [75] J. C. Hensel, G. Feher, "Cyclotron Resonance Experiments in Uniaxially Stressed Silicon: Valence Band Inverse Mass Parameters and Deformation Potentials", *Physical Review*, vol.129, no.3, pp. 1041-1062 1963.
- [76] G. Schubert, F. Schaffler, M. Besson, G. Abstreiter and E. Gornik, "High electron-mobility in modulation-doped Si/SiGe quantum-well structures", *Applied Physics Letters*, vol.59, no.25, pp. 3318-3320 1991.
- [77] E. Ungersboeck, S. Dhar, G. Karlowatz, V. Sverdlov, H. Kosina and S. Selberherr, "The effect of general strain on the band structure and electron mobility of silicon", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.54, no.9, pp. 2183-2190 2007.
- [78] K. Uchida, T. Krishnamohan, K. C. Saraswat and Y. Nishi, "Physical mechanisms of electron mobility enhancement in uniaxial stressed mosfets and impact of uniaxial stress engineering in ballistic regime", *IEEE International Electron Devices Meeting 2005, Technical Digest*, pp. 135-138 2005.
- [79] E. X. Wang, P. Matagne, L. Shifren, B. Obradovic, R. Kotlyar, S. Cea, M. Stettler and M. D. Giles, "Physics of hole transport in strained silicon MOSFET inversion layers", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.53, no.8, pp. 1840-1851 2006.
- [80] S. E. Thompson, G. Y. Sun, Y. S. Choi and T. Nishida, "Uniaxial-process-induced strained-Si: Extending the CMOS roadmap", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.53, no.5, pp. 1010-1020 2006.
- [81] X. F. Fan, L. F. Register, B. Winstead, M. C. Foisy, W. Q. Chen, X. Zheng, B. Ghosh and S. K. Banerjee, "Hole mobility and thermal velocity enhancement for uniaxial stress in Si up to 4 GPa", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.54, no.2, pp. 291-296 2007.
- [82] A. T. Pham, C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "Physics-Based Modeling of Hole Inversion-Layer Mobility in Strained-SiGe-on-Insulator", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.54, no.9, pp. 2174-2182 2007.
- [83] V. Sverdlov, G. Karlowatz, S. Dhar, H. Kosina and S. Selberherr, "Two-band k.p model for the conduction band in silicon: Impact of strain and confinement on band structure and mobility", *Solid-State Electronics*, vol.52, no.10, pp. 1563-1568 2008; V. Sverdlov, T. Windbacher, H. Kosina and S. Selberherr, "Stress-induced valley splitting in silicon thin films", *ULIS 2008: Proceedings of the 9th International Conference on Ultimate Integration on Silicon*, pp. 93-96 2008.
- [84] Sdevice, Sentaurus Device, release 2007.12, TCAD Sentaurus, SYNOPSIS, 2007.
- [85] E. Ramis, C. Deschamps, J. Odoux, *Cours de mathématiques spéciales, applications de l'analyse à la géométrie*, (Masson, Paris, 1981).
- [86] T. Guillaume et M. Mouis, "Variations of hole mass in p-MOSFETs under process-induced mechanical stress", *ESSDERC 2005: proceedings of the 35th European Solid-State Device Research Conference*, pp. 289-292 2005.
- [87] T. Manku and A. Nathan, "Valence energy-band structure for strained group-IV semiconductors", *Journal of Applied Physics*, vol.73, no.3, pp. 1205-1213 1993.
- [88] S. Richard, N. Cavasillas, F. Aniel and G. Fishman, "Energy-band structure in strained silicon: A 20-band k.p

and Bir-Pikus Hamiltonian model", Journal of Applied Physics, vol.94, no.3, pp. 1795-1799 2003.

- [89] F. H. Pollak and M. Cardona, "Piezo-Electroreflectance in Ge, GaAs, and Si", Physical Review, vol. 172, no.3, pp. 816-837 1968.

## Simulateurs utilisés

- [90] Méthode de calcul *ab initio*: [www.abinit.org](http://www.abinit.org).

- [91] UTOX: D. Rideau, M. Feraille, M. Michailat, Y. M. Niquet, C. Tavernier and H. Jaouen, "On the Validity of the effective mass approximation and the Luttinger  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model in fully depleted SOI MOSFETs", Solid-State Electronics, vol.53, no.4, pp.452-46 2008.



# **CHAPITRE III: Transport de charges dans les transistors MOSFETs sous contraintes**



## **CHAPITRE III: TRANSPORT DE CHARGES DANS LES TRANSISTORS MOSFETs SOUS CONTRAINTES**

### **III.1. Introduction**

#### **III.1.1. Objectif du chapitre**

L'importance stratégique pour une société de microélectronique est de pouvoir modéliser, de manière prédictive, le comportement électrique des dispositifs MOSFETs. A cette fin, l'industrie utilise des méthodes de simulations de dispositifs électroniques. En effet, l'étape de simulation intervient en support :

- lors des choix de procédé de fabrication dans les technologies.
- au centrage d'un procédé.
- aux bureaux d'études ou divisions lors du développement d'un produit.

L'objectif de ce chapitre est de comparer les diverses méthodes de simulation du transport dans les nanodispositifs contraints.

Ces méthodes intègrent (chacune de façon différente) des effets liés à la structure électronique du Silicium contraint. Nous évoquerons dans ce chapitre:

- les simulations Dérive-Diffusion en nous focalisant particulièrement sur la prise en compte de la contrainte et des effets de quantification.
- les simulations Monte Carlo. Nous effectuerons le lien avec le chapitre II (calculs de structures de bandes). Les structures de bandes sont calculées à partir des méthodes développées en chapitre II. Nous décrirons brièvement notre participation à la calibration de MC++.

A travers ce chapitre, nous testons la validité de l'approche d'un simulateur Monte Carlo concernant :

- l'estimation d'une valeur absolue d'un courant drain.
- l'estimation de la variation relative du courant en fonction de la longueur de grille.
- l'estimation de la variation relative du courant en fonction de la contrainte uniaxiale à différentes longueurs de grille.

Nous simulons des dispositifs MOSFETs à l'aide de différents simulateurs Monte Carlo utilisant des structures de bandes 3D. Les effets de confinement dus au potentiel de grille ne sont pas pris en compte dans les structures de bandes calculées, et intégrées aux simulations avancées de transport.

#### **III.1.2. Simulations Monte Carlo**

Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes servis des deux approches de la méthode Monte Carlo de façon complémentaire. Les simulateurs associés sont MC++ pour le Monte Carlo d'ensemble et SPARTA pour le Monte Carlo à flux incident. Ces deux simulateurs ont la dénomination "full band" puisqu'ils intègrent en données d'entrée les structures de bandes des matériaux étudiés sur l'intégralité de la première zone de Brillouin.

Les notions associées à la résolution de l'équation de transport Boltzmann par la méthode stochastique Monte Carlo ont déjà été abordées en chapitre I et ANNEXE I.B.



### III.1.2.1. Simulateur Monte Carlo d'ensemble: MC++

MC++ est un simulateur Monte Carlo d'ensemble. Lors du démarrage de cette thèse, MC++ venait d'être couplé avec les calculs de structures de bandes UTOX- $k,p$  et UTOX-EPM [52]. Une longue étape de collaboration a eu lieu. Des comparaisons avec des simulations incluant d'autres structures électroniques ont été effectuées dans des matériaux non contraints. Ce travail a fait l'objet d'une publication [1].

MC++ a été développé par Andrea Ghetti à ST Agrates. MC++ résout de manière autocohérente en 1D, 2D ou 3D l'équation de Poisson, tandis que les contraintes mécaniques sont prises en compte dans les simulations par un changement approprié de la structure de bandes (voir chapitre II). MC++ tient compte aussi des effets quantiques dus au potentiel de grille. Cependant, nous n'utilisons que l'approche 3D du simulateur dans ce manuscrit.

Dans MC++, les mécanismes d'interaction avec les impuretés ionisées sont supposés isotropes [2]. Les mécanismes d'interaction de MC++ incluent les interactions élastiques des phonons acoustiques et les interactions inélastiques des phonons optiques selon les trois processus de transfert de type  $g$  ainsi que les trois procédés de type  $f$  [3]. Les interactions de rugosité de surface sont, de même, prises en compte. La proportion des porteurs de charge diffusés par ce mécanisme a été fixée à 15%.

La contrainte est prise en compte dans les mécanismes d'interaction de MC++ par une variation de la densité d'états dans l'expression du taux d'interaction [2].

### III.1.2.2. Simulateur Monte Carlo à flux incident: SPARTA

SPARTA est un simulateur commercial Monte Carlo à flux incident [53]. Nous nous sommes servis de SPARTA dans l'étude des propriétés de transport dans les dispositifs non contraints et contraints. Une comparaison entre SPARTA et MC++ a lieu en Section III.2.3.. Ce simulateur Monte Carlo a été développé par F. Bufler [4]. Il a été intégré en Juin 2002 à la version 8.0 des solutions designs technologiques assistées par ordinateur (TCAD, *Technology Computer-Aided Design*) proposées par ISE<sup>1</sup>.

Au commencement de la thèse, ce simulateur ne prenait pas en compte les effets de cisaillement des contraintes. En effet, il ne permettait pas de charger une structure de bandes sur l'intégralité de la première zone de Brillouin. Or, cette condition est indispensable pour ce type de contrainte. Pour cette raison, nous avons commencé nos développements avec MC++. Avec la version 2007.03 de Sdevice, SPARTA ne présentait plus ces limitations [53]. Ceci nous a permis de continuer nos études avec le simulateur SPARTA pour la simplicité de son interface avec l'environnement industriel de travail. En effet, SPARTA est directement intégré dans la suite des logiciels disponibles sous l'interface *swb* [53]. Par ailleurs, les simulations de SPARTA présentent des temps de simulation plus rapides que ceux de MC++, pour les mêmes conditions de contrainte et de précision. Le rapport entre les durées de calcul des deux simulateurs est environ de 6. SPARTA est actuellement vendu parmi la suite de logiciels proposés par SYNOPSIS.

La méthode de calcul de structures de bandes utilisée par défaut dans SPARTA est directement basée sur la méthode EPM non local de M. M. Rieger et P. Vogl [5]. Toutefois, les structures de bandes fournies par le logiciel portent sur des contraintes biaxiales en rapport avec les couches contraintes de Si déposées par épitaxie sur un matériau massif SiGe. Les contraintes uniaxiales ne sont pas supportées par SYNOPSIS. Pour ces raisons, nos propres structures de bandes ont été générées avec les méthodes de calcul de structures de bandes développées en chapitre II. L'étude des dispositifs sous contrainte à l'aide de SPARTA s'effectue en Section III.3.. Toutes les

---

<sup>1</sup>Racheté par la suite par SYNOPSIS Inc. en 2004.

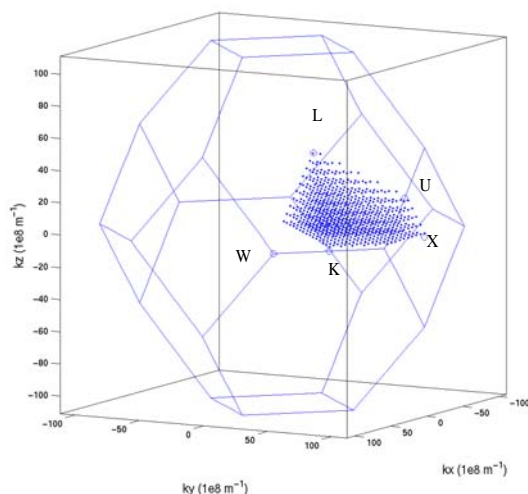
simulations SPARTA présentes dans ce manuscrit ont été obtenues avec la distribution 2007.03 [53].

Les mécanismes d'interaction dans le simulateur SPARTA incluent les interactions de phonons, d'impact ionisation, ainsi que d'impuretés ionisées. Les modèles d'interactions pour les électrons prennent en compte les trois procédés de type  $g$  ainsi que les trois procédés de type  $f$  [3], aussi bien que des interactions inélastiques intra-vallées. Dans le cas des trous, les interactions de phonons optiques et les interactions inélastiques de phonons acoustiques sont considérées. Les interactions des impuretés ionisées sont issues du modèle statistique d'écrantage de Ridley [53]. Afin d'effectuer une comparaison cohérente avec SPARTA, la proportion des porteurs diffusés a de même été fixée à 15%.

A l'instar de MC++, les mécanismes d'interaction dans SPARTA dépendent de la contrainte à travers la variation de la densité d'états (DOS) [53]. Dans cette étude, seul le courant de drain nous intéresse. Les interactions de l'ionisation par impact n'ont donc pas été retenues dans les simulations de dispositifs.

### III.1.2.3. Comment intégrer la structure électronique dans un Monte Carlo "full-band"

SPARTA et MC++ fonctionnent avec des structures de bandes et des taux d'interaction tabulés, préalablement calculés avec les méthodes adéquates. Les simulations Monte Carlo de ce chapitre ne tiennent pas compte des effets quantiques afin d'effectuer des comparaisons cohérentes entre les deux simulateurs (SPARTA n'inclut pas de manière explicite les effets de confinement [53]). Les structures de bandes sont donc calculées sur une zone de Brillouin 3D. L'étendue de la zone à mailler dépend de la contrainte: de 1/48 (voir Figure III.1) pour un matériau massif (cette proportion reflète la zone irréductible de la première zone de Brillouin du Silicium massif relaxé) à 1/2 pour un matériau déformé arbitrairement<sup>2</sup>. Les énergies de bandes sont calculées sur un maillage spécifique

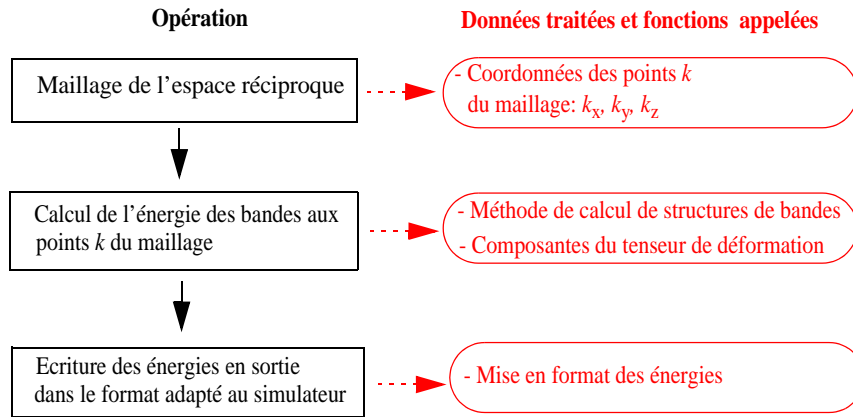


**Figure III.1:** Discretisation de 1/48ème de la zone de Brillouin. Chaque point représente les sommets des cubes élémentaires [28].

de la zone de Brillouin. Les données sont ensuite écrites selon le format imposé par le simulateur (MC++ ou SPARTA). Cette procédure est schématisée en Figure III.2.

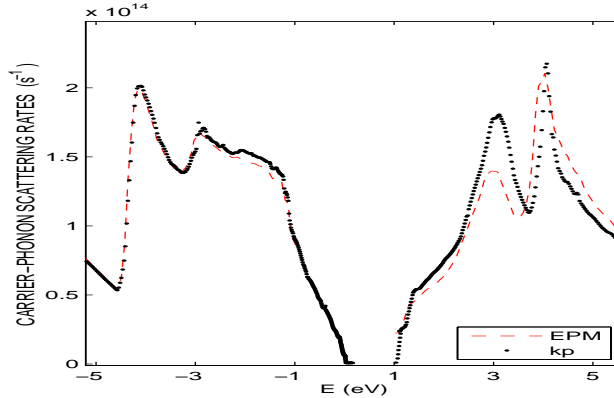
Les énergies de bandes sont calculées à partir d'une méthode choisie:  $k.p$ , EPM, .... Les taux d'interaction sont calculés en interne par le simulateur à partir des structures de bandes fournies. A

<sup>2</sup>En raison de la symétrie  $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$ .



**Figure III.2:** Procédure du calcul de structures de bandes sur les points d'un maillage de l'espace réciproque adapté au simulateur Monte Carlo. Les opérations sont détaillées à gauche, tandis que les données et les fonctions appelées sont mentionnées à droite.

titre d'exemple, nous montrons sur la Figure III.3, les taux d'interaction électron-phonon calculés à partir des structures de bandes des deux méthodes  $k.p$  30 bandes et de l'EPM non local [6]. Les taux d'interaction sont calculés en utilisant la procédure de la Réf. [7]. Nous utilisons les paramètres d'ajustement des Réf. [7] pour les bandes de valence et Réf. [8] pour les bandes de conduction. Ces paramètres ont été utilisés avec une relation empirique de dispersion des phonons de la Réf. [7]. Comme il peut être noté, les taux d'interaction pour les deux méthodes de calcul sont, en grande partie, similaires. Toutefois, de petits écarts, dus aux disparités entre les structures de bandes des deux méthodes, apparaissent à forte énergie. De fait, les calculs de la densité d'états et des taux d'interaction sont sensibles à la précision des modèles de calculs de structure (énergies de bandes et valeurs des masses effectives).



**Figure III.3:** Taux d'interaction électron-phonon dans du Si: comparaison entre les résultats obtenus en utilisant les modèles de calcul de structures de bandes  $k.p$  30 bandes et EPM non local [6].

La comparaison entre les deux méthodes sur le calcul de grandeurs physiques liées aux structures de bandes a déjà été traitée en chapitre II. Par ailleurs, l'origine des différences dans les taux d'interaction issus des modèles  $k.p$  30 bandes et EMP ainsi que leur impact sur les propriétés du matériau massif est discutée en Réf. [1]. De fait, les bandes (220) ne sont pas prises en compte dans le  $k.p$  30 bandes (voir Figure II.21 du chapitre II). Nous avons démontré en Réf. [1] que ces différences n'introduisent aucune incidence sur la fonction de distribution pour des champs électriques  $< 300$  kV/cm. Ainsi, les méthodes  $k.p$  et EPM peuvent être utilisées pour la simulation des matériaux massifs sans modifier les variables internes des taux d'interaction (dépendants des structures de bandes utilisés) utilisés dans les simulateurs. Nous compléterons cette étude dans les couches d'inversion des MOSFETs en Section III.3.1.2.. Nous montrons, là encore, une bonne interchangeabilité des méthodes  $k.p$  et EPM pour la génération des structures de bandes tabulées .

## III.2. Modélisation des propriétés de transport dans les dispositifs non contraints

Dans cette partie, les propriétés de transport dans les systèmes non contraints sont analysées et expliquées dans le cadre de couches d'inversion dans les plans (100). Nous définirons l'impact de la structure de bandes sur les propriétés de transport. Dans ce but, les simulateurs Monte Carlo MC++ et SPARTA ont été utilisés.

Nous avons participé à l'intégration de la structure de bandes tabulée dans MC++ selon l'approche "full band". Ce développement s'est suivi de la calibration du Monte Carlo sur ces structures de bandes. Nous présentons quelques simulations de MC++ sur du Si non contraint. La validation des taux de collision des électrons et des trous a été effectuée en comparant les simulations MC avec un large ensemble de données expérimentales.

Les solutions des Monte Carlo MC++ et SPARTA, selon les deux approches d'ensemble et à flux incident respectivement, sont comparées sur les caractéristiques électriques des nMOS pour une direction de canal  $\langle 110 \rangle$ . Les effets de transport, propres aux dispositifs électroniques, sont examinés et commentés à travers des profils tirés de ces simulations.

Enfin, des simulations SPARTA ont été exécutées sur des pMOSFETs à différentes longueurs de grille pour deux orientations de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Dans les dispositifs les plus courts, la variation de courant à fort champ apparaît entre les simulations pour ces deux directions de canal. Ces résultats seront expliqués et la physique sous-jacente sera analysée sur la base de la description des structures de bandes.

### III.2.1. Note préalable sur la calibration de MC++

#### III.2.1.1. Matériau massif

Cette partie confronte les simulations du Monte Carlo MC++ aux données expérimentales dans le matériau contraint. Ces études ont été réalisées en coopération avec A. Ghetti dans le cadre du projet européen PULLNANO [9].

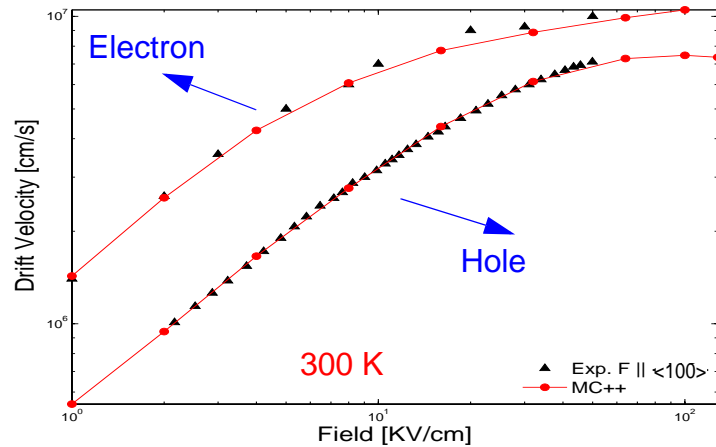
La Figure III.4 montre la vitesse de dérive calculée dans un barreau de Si en fonction du champ électrique. A faible champ ( $|\vec{E}| < 10 \text{ kV/cm}$ ), la vitesse de dérive  $|\vec{v}_d|$  est proportionnelle au champ électrique, telle que:

$$\vec{v}_d = \mu_d \cdot \vec{E} \quad \text{Eq-III.1}$$

Dans cette simulation, le champ électrique est appliqué le long de la direction cristallographique  $\langle 100 \rangle$ . A faible champ, la mobilité est extraite des pentes de ces caractéristiques selon l'expression Eq-III.1 ( $\mu_d$  est le tenseur de mobilité). Toutes les valeurs de mobilité, présentées par la suite, sont extraites des régions à faible champ de ces courbes. Au delà d'un champ critique  $E_c$ , la vitesse de dérive sature à une valeur  $v_{sat}$  (environ  $1.10^7 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ).

Des résultats complémentaires du simulateur MC++ sont placés en ANNEXE III.A. Ces résultats concernent la variation de mobilité en fonction des impuretés. Les coefficients d'ionisation par impact sont, de même, calculés à fort champ électrique.

Les résultats de SPARTA dans les barreaux de Silicium sont importants dans les discussions qui vont suivre. Ces résultats sont reportés en ANNEXE III.B.



**Figure III.4:** Vitesse de dérive des électrons et des trous dans du Si massif en fonction du champ électrique, le long de la direction cristallographique <100> [10]. Les simulations MC++ (cercles fermés) sont comparées aux mesures expérimentales (diamant): C. Canali et al. [11] pour les électrons et G. Ottaviani et al. [12] pour les trous. La température du réseau cristallin est de 300K.

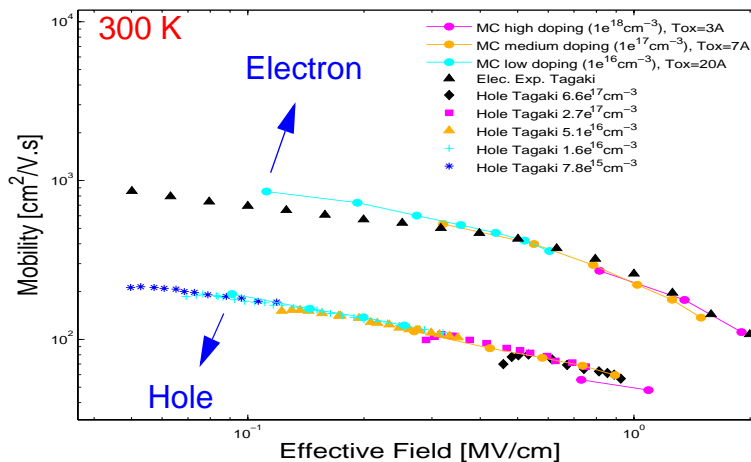
### III.2.1.2. Couche d'inversion ; MOSFET long

Dans le cas des dispositifs MOSFET, la présence de l'interface avec l'oxyde complexifie le transport. A faible champ électrique longitudinal, c'est à dire à faible  $v_d$  (lorsque le transistor est en régime linéaire), trois composantes de la mobilité prédominent:

- mobilité liée aux interactions relatives à la rugosité de surface.
- mobilité liée aux interactions avec les phonons.
- mobilité liée aux interactions coulombiennes.

L'expérience montre qu'il est possible de définir la mobilité dans les MOSFETs à canal long par la loi universelle de la mobilité à faible champ. La mobilité totale d'inversion  $\frac{1}{\mu_{tot}}$  se calcule à partir de la règle de Matthiessen (voire Section I.1.3. du chapitre I).

La mobilité en fonction du champ effectif a été tracée en Figure III.5 [9]. Cette courbe est fondamentale dans la validation des simulations de dispositifs MOSFETs. Les courbes pour les électrons et les trous ont été obtenues avec trois dispositifs à différents niveaux de dopage. Nous remarquons que les simulations MC++ reproduisent bien les données expérimentales de la mobilité universelle de Takagi et al. [13]. De fait, les coefficients de rugosité de surface ont été ajustés afin de prendre en compte les courbes de mobilité universelle des dispositifs nMOS et pMOS [13].



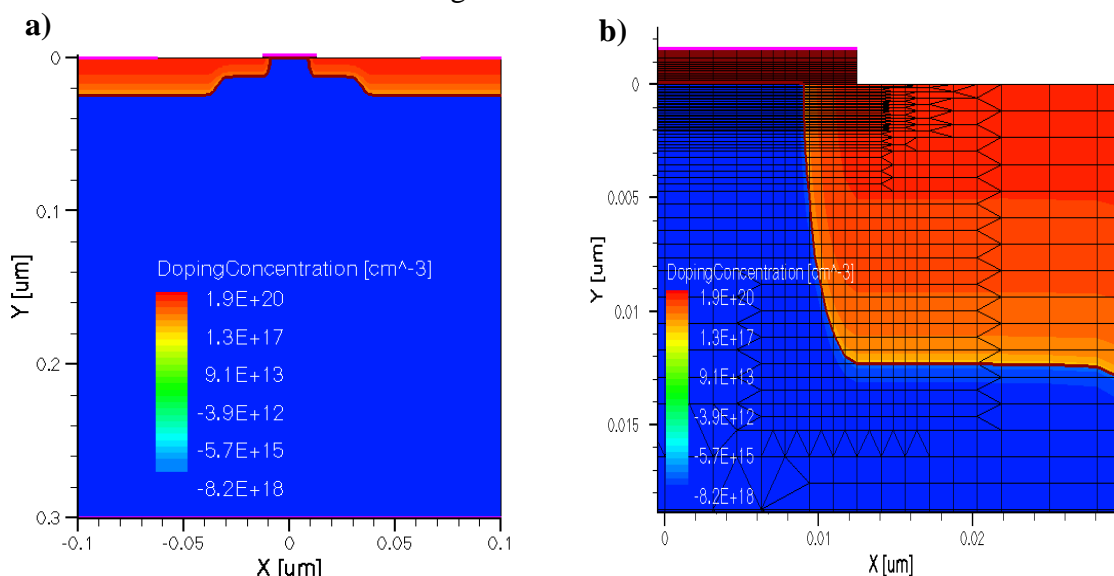
**Figure III.5:** Mobilité des électrons et des trous en fonction du champ effectif. Les symboles se réfèrent aux données expérimentales [13] pour différents niveaux de dopage[10]. Les lignes solides reportent les calculs MC++. La température du réseau est à 300 K.

Il est à souligner que cette courbe n'est valide que dans le cadre de MOSFETs à grandes longueurs de grille. La loi de Mathiessen est valable lorsque les interactions sont considérées comme indépendantes les unes des autres et que leur dépendance en énergie est identique. Ce qui n'est généralement pas le cas pour les canaux courts.

Comme il sera expliqué en Section III.2.3.2., des phénomènes de transport hors-équilibre apparaissent dans les dispositifs courts (pour des variations rapides de champ électrique ou lorsque les dimensions du dispositif sont du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen des porteurs). Sous ces conditions, la mobilité effective n'est plus calculable avec la règle de Mathiessen.

### III.2.2. Structure simulée

Les simulations Monte Carlo de ce chapitre sont exécutées sur un MOSFET planaire dont la longueur de grille varie de 25 nm à 90 nm. Ses principales caractéristiques sont basées sur les spécifications du projet européen SINANO pour des transistors de haute performance logique de noeud technologique 65 nm [14]. Cette structure est montrée en Figure III.6. La constante diélectrique de l'oxyde de grille a été fixée à celle de l'oxyde de Silicium  $\text{SiO}_2$ :  $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 3,2$ ). L'oxyde de grille  $\text{SiO}_2$  a une épaisseur de 16 Å, le canal est dopé à  $3.0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , avec des halos dopés à  $8.0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Les extensions LDD et les régions source et drain sont dopées à  $1.0 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . La distance entre les contacts source/drain et les bords de grille est de 7 nm.



**Figure III.6:** Structure nMOSFET de longueur de grille 25nm basée sur le dispositif référence SINANO [14]:  $T_{\text{ox}}=16\text{\AA}$ ,  $N_{\text{grille}}=1.0 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_{\text{canal}}=3.0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_{\text{idd}}=1.0 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . **a)** Structure et dopage du transistor nMOSFET. **b)** Dopage et maillage dans la région du canal du transistor nMOSFET.

La structure SINANO est conçue par défaut pour une longueur de grille de 25 nm [14]. Cette structure présente les évolutions technologiques envisagées dans les MOSFETs planaires à canaux ultra-courts. De fait, les simulations ont été réalisées sur ce dispositif afin d'étudier l'évolution des propriétés de transport dans les MOSFETs contraints des futurs noeuds technologiques.

Pour un profil de dopage identique, les structures pMOSFETs sont obtenues à partir des structures nMOSFETs SINANO en inversant la polarité de dopage dans les différentes régions du dispositif. Le travail de sortie de la grille ainsi que la polarisation au niveau des contacts sont, de même, inversés.

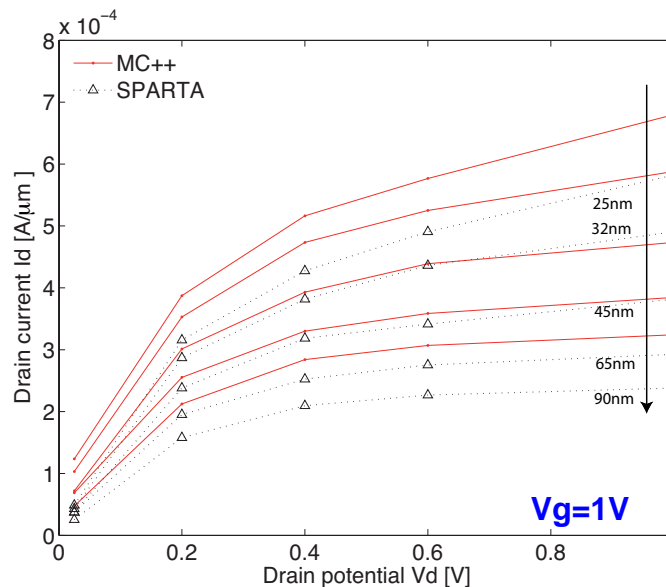
### III.2.3. Quelques comparaisons entre SPARTA et MC++

Dans le but de comparer les deux approches des deux Monte Carlo MC++ (MC d'ensemble) et SPARTA (MC à flux incident), les dispositifs SINANO nMOSFET et pMOSFET ont été simulés. Les caractéristiques électriques obtenues des deux simulateurs sont comparées.

#### III.2.3.1. Caractéristiques électriques d'un nMOSFET

##### III.2.3.1.1. Caractéristiques Id-Vd

En Figure III.7, les courbes IdVd à  $V_g = 1V$  ont été tracées avec SPARTA et MC++ pour différentes longueurs de dispositifs allant de 25 nm à 260 nm.



**Figure III.7:** Caractéristiques IdVd à  $V_g=1V$  obtenues des simulations Monte Carlo effectuées sur un transistor nMOSFET à différentes longueurs de grille. Les simulations des Monte Carlo d'ensemble MC++ (lignes continues rouges, points) et à une particule SPARTA (lignes pointillées noires, triangles).

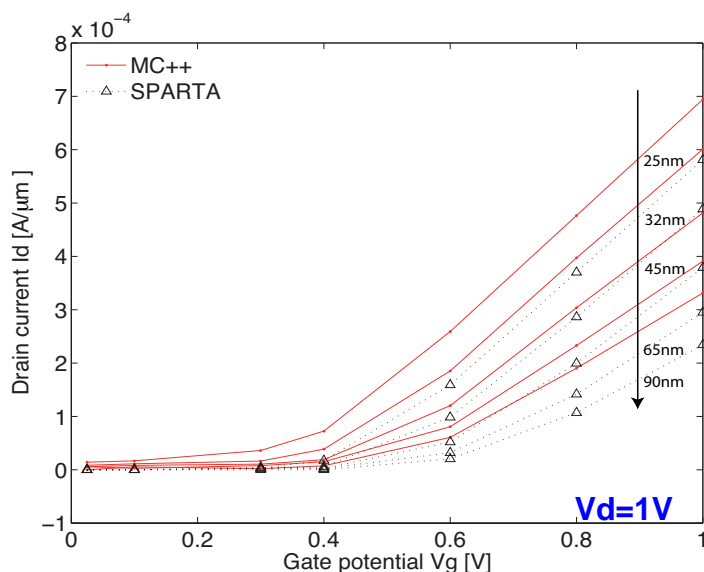
##### III.2.3.1.2. Caractéristiques Id-Vg

En Figure III.8, les courbes IdVg dans le régime de saturation, ont été obtenues avec SPARTA et MC++ pour différents transistors nMOSFETs avec des longueurs de grille allant de 25 nm à 90 nm.

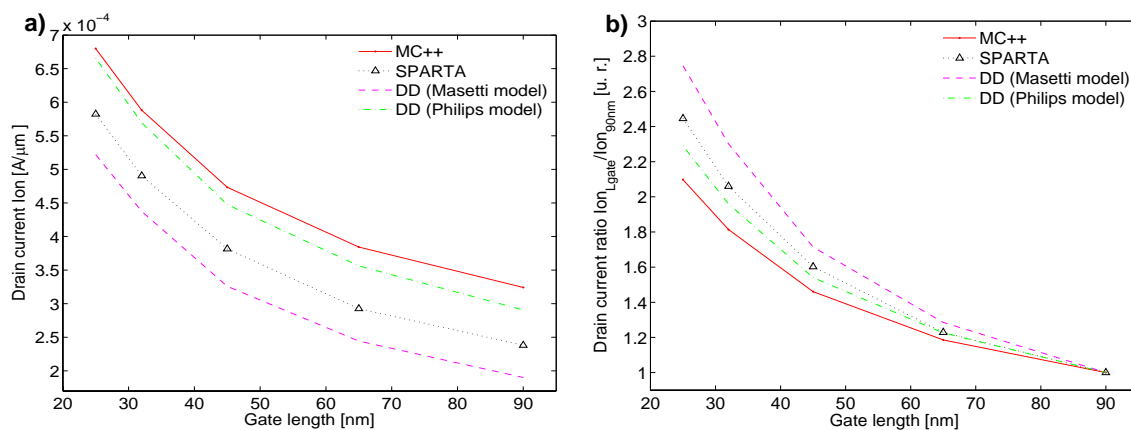
##### III.2.3.1.3. Bilan

Nous montrons en Figure III.9 a) les courants Ion obtenus par MC++ et SPARTA en fonction de la longueur de grille. Nous trouvons des différences de calcul entre les simulateurs dans le régime de saturation. De manière globale, les valeurs des courant issus de MC++ sont plus élevées que ceux provenant de SPARTA (36% pour une longueur de grille 90 nm).

Nous montrons en Figure III.9 b) le ratio des courants entre ceux calculés pour différentes longueurs et celui obtenu pour une longueur de grille de 90 nm. Des différences dans la variation des courants en fonction de la longueur persistent entre les deux types de simulation. Celles-ci s'accroissent avec la réduction de la longueur de grille. Pour un nMOSFET de 25 nm de longueur de grille, nous obtenons une différence de l'ordre de 35% .



**Figure III.8:** Caractéristiques  $I_d V_g$  à  $V_d=1V$  obtenues des simulations Monte Carlo effectuées sur un transistor nMOSFET à différentes longueurs de grille. Les simulations des Monte Carlo d'ensemble MC++ (lignes continues rouges, points) et à une particule SPARTA (lignes pointillées noire, triangles).



**Figure III.9:** a) Courants de drain  $I_{on}$  d'un transistor nMOS en fonction de la longueur de grille; b) Ratio des courants de drain  $I_{on}$  en fonction de la longueur de grille en comparaison des résultats obtenus pour la longueur de grille de 90nm. Les courants sont obtenus de simulations Monte Carlo MC++ (symboles) et SPARTA (lignes). Les simulations Dérive-diffusion utilisant les modèles Masetti et philips unifié [54] sont également reportées (respectivement tirets et pointillés-tirets).

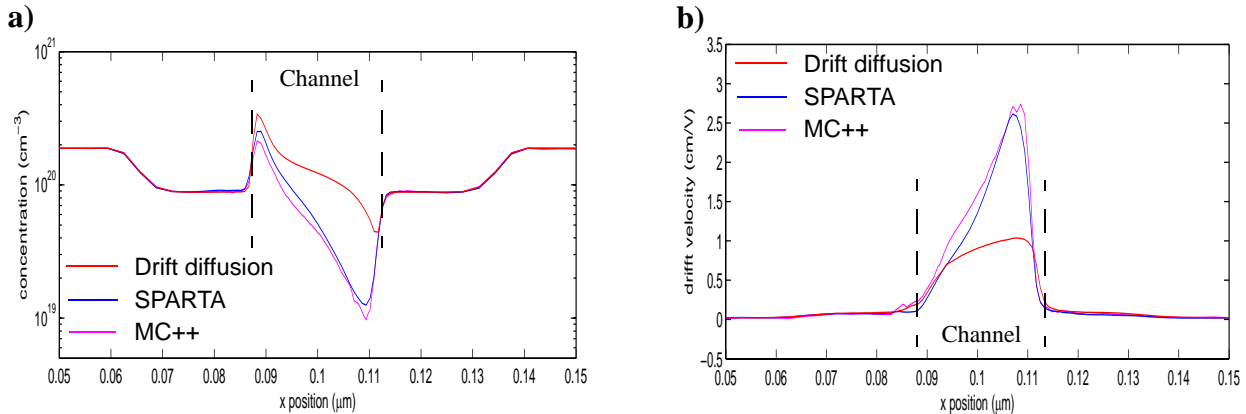
D'après [15], le courant des dispositifs MOSFETs est lié à la vitesse des porteurs de charge dans le dispositif. Afin de caractériser l'origine des différences entre les courants des simulations MC++ et SPARTA, il est pertinent de tracer les profils de vitesse des porteurs de charge le long du canal d'un MOSFET.

### III.2.3.2. Profils de vitesse et de concentration le long du canal d'un dispositif MOSFET à canal ultra-court

Afin de compléter la comparaison entre les résultats des deux simulateurs MC++ (MC d'ensemble) et SPARTA (MC à flux incident), nous montrons en Figure III.10 les profils de concentration et de vitesse de dérive des porteurs de charge obtenus par simulations Monte Carlo. Les profils sont issus de simulations effectuées sur la structure nMOSFET SINANO de 25 nm de longueur de grille. Les profils appartiennent à des coupes réalisées à une profondeur de 1Å de l'interface Si / SiO<sub>2</sub>.



A 300K, dans le régime stationnaire, la vitesse de dérive des porteurs de charge sature à  $10^7$  cm / s (comme il peut être vu en Figure III.4). Dans le cas du dispositif de 25 nm de longueur de grille, la Figure III.10 b) montre une vitesse moyenne de dérive allant jusqu'à  $2.7 \cdot 10^7$  cm / s. Cet effet se rattache au phénomène de survitesse (ou *velocity overshoot*, en anglais). Ces effets sont parfaitement reproduits par les deux Monte Carlo, contrairement aux solutions du Dérive-Diffusion<sup>3</sup> (voir Section III.2.4.).



**Figure III.10:** Profils de **a)** concentration et de **b)** vitesse le long du canal du dispositif référence SINANO nMOS de 25nm de longueur de grille. Les coupes ont été effectuées à une profondeur de 1Å de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. Les profils sont calculés dans le régime saturé de transport pour des conditions de polarisation de  $V_d=1V$ ,  $V_g=1.0V$ . La température du dispositif est fixée à 300K. Les simulations de SPARTA et MC++ correspondent respectivement aux lignes continues bleue et magenta. Les lignes rouges se réfèrent aux résultats de Dérive-Diffusion.

Ce phénomène peut s'expliquer par deux effets de transport hors-équilibre: le transport non-stationnaire et quasi-balistique. Les notions de ces effets de transport sont exposées en ANNEXE III.C.

Lorsque les effets de transport non-stationnaire apparaissent, la longueur de relaxation de l'énergie  $L_w$  est bien supérieure à la longueur de relaxation de la vitesse  $L_m$ . Le gaz d'électron n'est alors plus thermalisé par le réseau, alors que les porteurs de charge acquièrent une vitesse supérieure à la vitesse de saturation, comme montré en Figure III.10 [16]. Ainsi, le transport non stationnaire apparaît lorsque les interactions inélastiques sont en nombre insuffisant.

Dans le cas du dispositif nMOSFET SINANO de 25 nm de longueur de grille avec un dopage canal de  $3e18$  cm<sup>-3</sup>, nous obtenons un libre parcours moyen  $l_{pm}$  de  $2.2$  nm<sup>4</sup>. Cette valeur se rapproche de celles calculées par simulations Monte Carlo [18][19] dans des structures de longueurs de grille similaires. Une proportion non négligeable de porteurs, supérieure à 6% [19], traverse le canal sans subir d'interactions. Dans ce cadre, le transport est alors qualifié de quasi-balistique.

Les effets de transport hors-équilibre sont donc présents dans notre dispositif de 25 nm de longueur de grille. Ces effets vont particulièrement perturber la fonction de distribution  $f(r, p, t)$  [16].

Comme souligné par F. Bufler et al. [15], le pic de survitesse le long du canal est d'importance mineure dans le calcul du courant de drain. En revanche, le courant de drain est directement corrélé à la vitesse coté source du canal. La vitesse des porteurs de charge est déterminée en fonction de l'intensité du champ électrique. Dans les régions de source et drain fortement dopées, le transport est considéré proche de l'équilibre à cause des interactions des porteurs de charge avec les impuretés. La vitesse de dérive des porteurs de charge dans ces régions est liée à la mobilité à faible champ à mesure qu'ils approchent le canal. A la jonction entre la source et le canal, ils sont soumis

<sup>3</sup>. Rappelons que la calibration de MC++ sur la courbe de mobilité effective universelle de la Figure III.5 s'est effectuée sur un dispositif à grande longueur de grille afin d'éviter l'apparition des effets non locaux.

<sup>4</sup>-Voir l'Eq-III.C.2 en annexe du chapitre III.  $\mu_0$  est estimé en fonction de la concentration de dopage dans le Silicium (voir Figure III.A.1 annexe du chapitre III et [17]).

sur une faible distance à un fort champ électrique. En fonction du champ électrique, les porteurs de charges adoptent la vitesse de dérive des caractéristiques champ-vitesse (Figure III.B.1). Pour des variations rapides de champs électriques, les effets hors-équilibre thermodynamique apparaissent, la vitesse des porteurs dépend alors de la force du champ local (sans être pour autant plus large que la vitesse de saturation).

Comme montré en Figure III.10 b), de bons accords sont trouvés entre SPARTA et MC++ sur l'estimation de la survitesse. Cependant, de faibles écarts sont visibles entre les profils des deux simulations dans la zone du canal proche de la source. Ces écarts peuvent être à l'origine des différences observées sur le calcul du courant. A la différence des résultats Monte Carlo, les modèles Dérive-Diffusion ne prennent pas en compte ces phénomènes de transport non stationnaire et quasi-balistique. Dans un canal de Si, les simulations Dérive-Diffusion produisent par défaut un courant dont la vitesse des porteurs de charge ne peut excéder une valeur proche de  $10^7$  cm / s (valeur du Si massif).

Notons également qu'à cause de ces phénomènes de survitesse, les distributions de porteurs de charge obtenues des deux simulateurs Monte Carlo sont significativement différentes des prédictions des simulations de Dérive-Diffusion, comme montré en Figure III.10 a) [20].

En résolvant l'équation de transport de Boltzmann dans son intégralité, la méthode Monte Carlo est l'outil adéquat dans l'évaluation de la fonction de distribution ainsi que dans l'évaluation des conséquences des effets non-stationnaire et quasi-balistique dans les caractéristiques électriques des dispositifs MOSFETs ultimes. Comme nous le verrons dans le cas des systèmes contraints, ces effets de transport auront un fort impact sur la variation de la mobilité dans les dispositifs à canaux ultra-courts sous un régime de transport à fort champ.

### III.2.3.3. Bilan sur les simulateurs MC++ et SPARTA

Dans l'étude des nMOSFETs, des différences ont été observées sur la valeur absolue ainsi que sur la variation de courant en fonction de la longueur de grille. L'écart observé sur les valeurs des courants demeure significatif. Cependant, cet écart est similaire à celui obtenu avec les modèles Dérive-Diffusion (à l'exemple des simulations Dérive-Diffusion utilisant les modèles de Masetti et Philips unifié [54] en Figure III.9). Par ailleurs, ces résultats rejoignent les conclusions de Fiegna et al. [21] qui trouvent une dispersion relativement large des résultats Monte Carlo lorsque les interactions avec les impuretés ionisées sont activées. Notamment, les courants Ion calculés avec SPARTA ont été trouvés plus faibles que ceux prédits par quatre autres simulateurs. Les différences de résultats entre SPARTA et MC++ pourraient être reliées aux différents traitements des interactions avec les impuretés ionisées [21][22]<sup>5</sup>.

Les simulations Monte Carlo sur le dispositif 25 nm montrent de petites différences sur la variation de vitesse à proximité de la source, mais ne permettent pas de comprendre la variation de 36% sur le courant. Par ailleurs, le traitement des résistances d'accès dans la simulation Monte Carlo devient prépondérant avec la diminution des dimensions des dispositifs [23]. Ces faibles écarts dans la variation des vitesses des porteurs de charge près de la zone de source peuvent provenir des différences dans la prise en compte des résistances d'accès par les Monte Carlo.

Le traitement des dispositifs pMOSFETs par les deux simulateurs Monte Carlo n'est pas effectué dans cette partie. En effet, le transport des trous est plus complexe à appréhender. Le transport des charges se produit sur les premières bandes entre lesquelles se manifestent des couplages complexes. Les différences entre les simulateurs n'en sont que plus délicates à analyser.

<sup>5</sup>Effectivement, les simulateurs MC++ et SPARTA résolvent la même équation du transport de Boltzmann (voir Section I.4.3. du chapitre I). Toutefois, les disparités dans les résultats, obtenus des deux simulateurs, sont issues des différents modèles d'interaction utilisés.

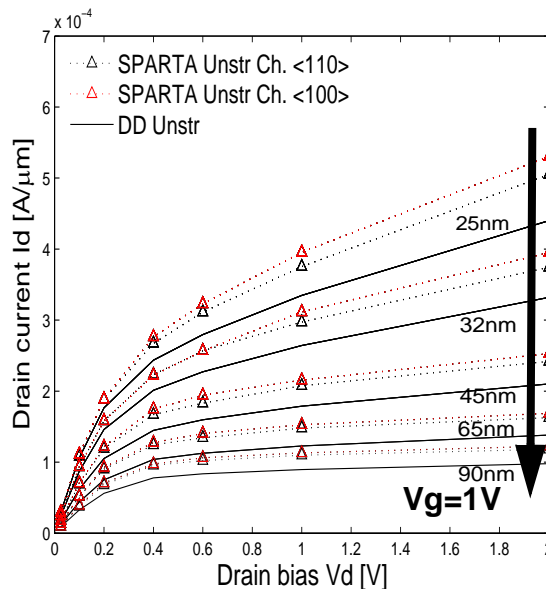
Par conséquent, nous n'utiliserons qu'un seul simulateur Monte Carlo dans l'étude relative des courants de drain. Nous avons choisi SPARTA pour sa parfaite adaptation à l'environnement informatique de l'organisation industrielle des simulations de MOSFETs (interface *swb* de SYNOPSIS).

### III.2.4. Influence de l'orientation et la longueur du canal sur un pMOS

Cette section est consacrée à la mise en évidence par simulation Monte Carlo d'une variation de courant dans les pMOSFETs courts entre deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Dans le cadre de cette étude, l'orientation de la structure de bandes a seulement été modifiée relativement au référentiel du MOSFET. L'architecture du MOSFET reste identique pour les deux directions de transport.

#### III.2.4.1. Influence de l'orientation du canal d'un pMOSFET et de sa longueur

En Figure III.11, les courbes  $I_d V_d$  à  $V_g = 1V$  du dispositif pMOSFET, calculées avec SPARTA, ont été tracées pour différentes longueurs de dispositifs allant de 25 nm à 90 nm pour deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ .

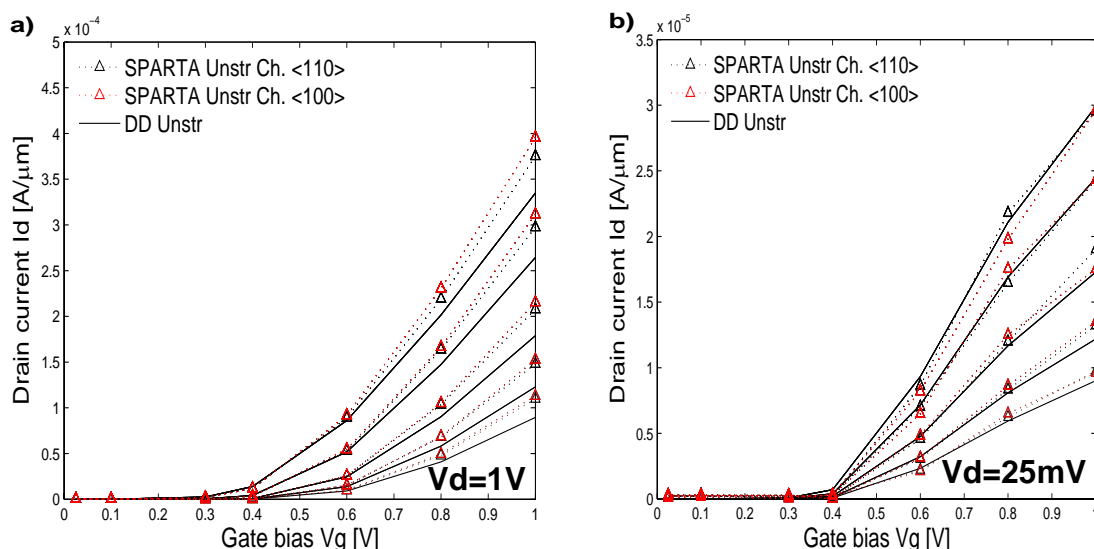


**Figure III.11:** Caractéristiques  $I_d V_d$  à  $V_g=1V$  obtenues d'un transistor pMOS massif à différentes longueurs de grille pour deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations Monte Carlo sont reportées en symboles noirs (en symboles rouges) pour une direction cristallographique de transport  $\langle 110 \rangle$  ( $\langle 100 \rangle$ ). Les solutions du simulateur Dérive-Diffusion (lignes continues noires) sont également montrées.

#### III.2.4.2. Caractéristiques électriques

En Figure III.12 a) (et Figure III.12 b)), les courbes  $I_d V_g$  dans le régime linéaire (et dans le régime de saturation) ont été obtenues avec SPARTA sur le dispositif pMOSFET à différentes longueurs de grille, pour deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations Dérive-Diffusion sur les mêmes dispositifs, aux mêmes conditions de polarisation, sont de même tracées.

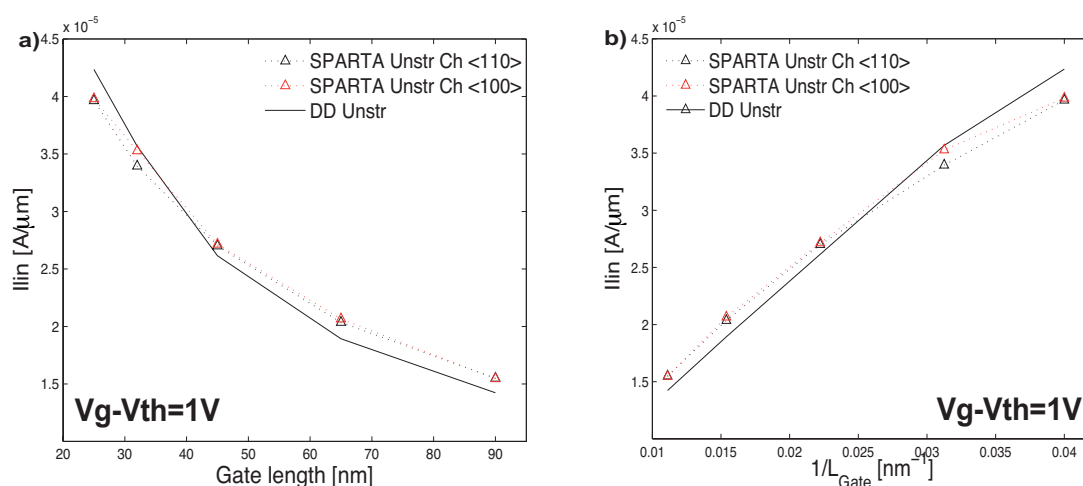
La différence de courant entre les deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  est visible dans le régime de saturation. Dans ce régime, le courant dans la direction  $\langle 100 \rangle$  est plus élevé que dans la direction  $\langle 110 \rangle$ . Tandis que cet écart semble constant dans les longs canaux, elle tend à s'amplifier pour les petits canaux. En revanche, aucune différence n'apparaît explicitement dans le régime linéaire.



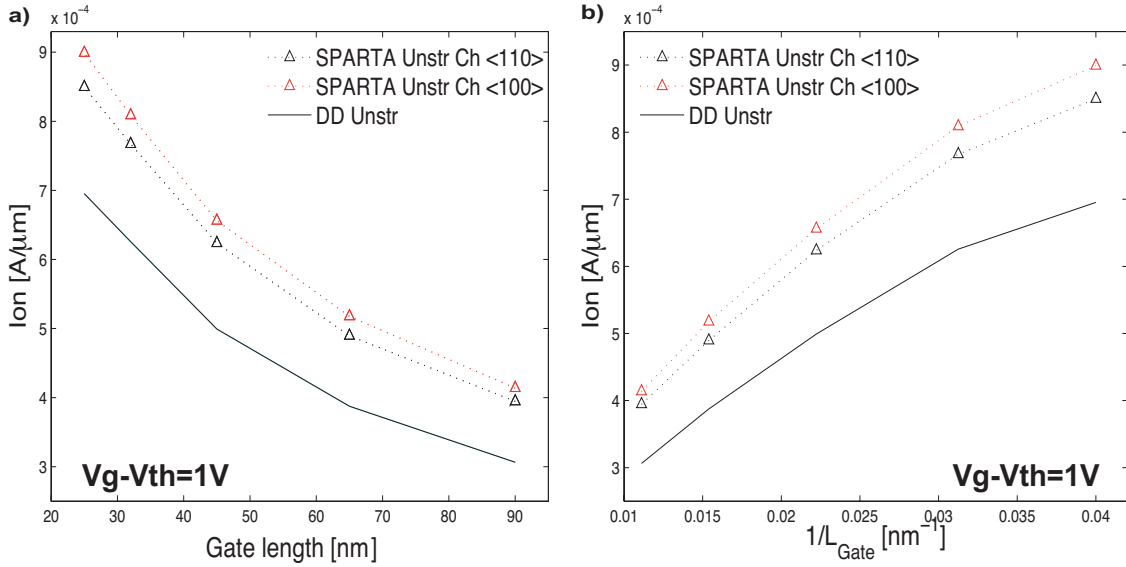
**Figure III.12:** Caractéristiques  $I_d V_g$  à **a)**  $V_d=1\text{V}$  et **b)**  $V_d=25\text{mV}$  obtenues d'un transistor pMOS planaire à différentes longueurs de grille pour deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations Monte Carlo sont reportées en symboles noirs (en symboles rouges) pour une direction cristallographique de transport  $\langle 110 \rangle$  ( $\langle 100 \rangle$ ). Les solutions du simulateur Dérive-Diffusion (lignes continues noires) sont également montrées. L'ordre des courbes en fonction de la longueur de grille est le même qu'en Figure III.11.

### III.2.4.3. $I_{on}$ , $I_{lin}$ en fonction de la longueur de grille

Les courants de drain du dispositif pMOS sont reportés en Figure III.13 dans le régime linéaire (et en Figure III.14 dans le régime de saturation) en fonction de la longueur de grille et de son inverse. Ces caractéristiques sont calculées à  $V_g - V_{th}$  constant. Comparé au régime linéaire, le courant de saturation montre des déviations non linéaires de plus en plus marquées avec la diminution de la longueur de grille. L'augmentation du courant en  $1/L_{gate(canal)}$  ( $W$ ,  $\mu_{eff}$ ,  $V_{dd}$  identiques) prévue par les théories stationnaires ne permettent pas de modéliser ce comportement. En effet, plusieurs phénomènes, devenant non négligeables avec la réduction des échelles, peuvent participer à la non linéarité du courant en fonction de l'inverse de la longueur de grille. Les résistances d'accès ainsi que les effets de transport hors-équilibre peuvent être à l'origine de cette variation du courant:



**Figure III.13:** Courant de drain  $I_{lin}$  dans le régime linéaire **a)** en fonction de la longueur de grille et **b)** en fonction de l'inverse de la longueur de la grille du transistor pMOS planaire à  $V_g - V_{th} = 1\text{V}$  pour deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations Monte Carlo, reportées en symboles noirs (en symboles rouges) pour une direction cristallographique de  $\langle 110 \rangle$  ( $\langle 100 \rangle$ ), sont comparées aux solutions du Dérive-Diffusion (lignes continues noires).



**Figure III.14:** Courant de drain  $I_{on}$  dans le régime linéaire **a)** en fonction de la longueur de grille et **b)** en fonction de l'inverse de la longueur de la grille du transistor pMOS massif à  $V_g - V_{th} = 1V$  pour deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations Monte Carlo, reportées en symboles noirs (en symboles rouges) pour une direction cristallographique de  $\langle 110 \rangle$  ( $\langle 100 \rangle$ ), sont comparées aux solutions du Dérive-Diffusion (lignes continues noires).

- Les résistances d'accès induisent une forte chute de potentiel dans les zones de source et drain. Le potentiel intrinsèque aux bornes des zones de source  $R_s$  et de drain  $R_d$  se calcule alors de la manière suivante en fonction des résistances d'accès de la source et du drain:

$$V_{DS_{intrinsque}} = V_{ds} - (R_d + R_s)I_{ds} \quad \text{Eq-III.2}$$

Cette résistance devient de plus en plus prépondérante à mesure que les échelles des dispositifs électroniques diminuent. Cette réduction amène la résistance du canal  $R_{ch}$  à être du même ordre de grandeur que les résistances de drain et de source. En tenant compte des résistances d'accès  $R_{SD}$ , le courant de saturation  $I_{dsat}^{RS}$  d'un dispositif court s'écrit comme suit [24]:

$$I_{dsat}^{RS} = \frac{I_{dsat0}}{1 - \frac{2R_{SD}I_{dsat0}}{V_{gt0}} + \frac{R_{SD}I_{dsat0}}{V_{gt0} + L_g E_c}} \quad \text{Eq-III.3}$$

$$\text{où } I_{dsat0} = v_{sat} C_{ox} W \left( \frac{V_{gt0}^2}{V_{gt0} + L_g E_c} \right), \quad V_{gt0} = V_{gs} - V_{th} \text{ et } E_c = 2v_{sat}/\mu_{eff}$$

$E_c$  correspond au champ électrique critique marquant le début de la saturation de la vitesse de dérive à la valeur  $v_{sat}$ .

L'expression Eq-III.3 n'est pas proportionnelle en fonction de l'inverse de la longueur de grille. L'expression du courant de saturation Eq-III.3 est décroissante en fonction de la résistance d'accès  $R_{SD}$ . De même, nous pouvons noter que cette décroissance du courant s'amplifie avec la réduction de la longueur de grille.

- Dans l'Eq-III.6, la mobilité est une variable qui peut dépendre de la longueur de grille. Notamment, les effets non stationnaire et quasi-balistique, présents dans les dispositifs à faibles longueurs de grille, contribuent de manière importante dans le transport. La "mobilité"<sup>6</sup> de l'Eq-III.3 est modifiée, laissant apparaître une non-linéarité [15].

<sup>6</sup>La définition de mobilité est altérée par l'apparition des effets non-stationnaire et quasi-balistique dans le transport.

Dans le régime linéaire, notons la relative adéquation de SPARTA avec la simulation de Dérive-Diffusion tenant compte du modèle de mobilité de Masetti<sup>7</sup>. En revanche, des différences significatives apparaissent à fort  $V_d$  entre les simulations Monte Carlo et les résultats de Dérive-Diffusion. Les simulateurs Monte Carlo et Dérive-Diffusion traitent différemment les aspects de résistances d'accès. Cependant, seul le Monte Carlo permet de simuler le transport hors-équilibre.

#### III.2.4.4. Ratio des courants $I_{on}$ et $I_{lin}$ en fonction de la longueur de grille

Le ratio des courants dans les deux directions du canal  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$  a été calculé à l'aide du Monte Carlo SPARTA. Dans le régime à fort champ, une augmentation du ratio est observée (non montré) avec la réduction de la longueur de grille. L'augmentation du courant est proche de 6% pour la longueur de grille de 25 nm dans le régime de saturation. Cette augmentation est en accord avec les données de la littérature:

- Simulations Monte Carlo: nous retrouvons la même estimation que F. Bufler [4] dans un dispositif similaire de 25 nm.
- Expériences: Nos simulations sont en bon accord avec les données expérimentales disponibles dans la littérature [26][27]. Pour un dispositif de 60 nm de longueur de grille et de largeur 10  $\mu\text{m}$ , une augmentation de 5% a été mesurée par C. Ortolland [26]<sup>8</sup>.

Dans le cadre du régime linéaire, cette augmentation est négligeable, ne dépassant pas les 1% pour la plupart des longueurs de grille. Ceci rejoint également les conclusions de la littérature [26].

L'origine des écarts entre les caractéristiques électriques pour les deux directions de transport  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  du pMOSFET se comprend par l'anisotropie de la bande hh dans l'espace réciproque. Comme observé en chapitre II, la masse de courbure est anisotrope dès les faibles énergies. En effet, les courbures des deux premières bandes de valence sont différentes dans les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . L'anisotropie est, notamment, nettement plus marquée sur la bande hh.

À 300K, à partir des méthodes développées en chapitre II, nous avons calculé les masses de densité d'états des bandes de valence  $m_{DOS}^{DOS} = 0,52$  et  $m_{lh}^{DOS} = 0,16$  à 0K. Le rapport des densités d'états étant  $(m_{hh}^{DOS})^{3/2} / ((m_{hh}^{DOS})^{3/2} + (m_{lh}^{DOS})^{3/2})$ , les trous se situent dans une proportion de 85% dans la bande hh à 0K<sup>9</sup>. La bande des trous hh étant largement la plus occupée dans le Si non contraint, elle est donc dominante dans le transport des trous dans le Si non contraint. Notamment, on s'attend à ce que la masse de courbure de cette bande dans la direction du transport soit prépondérante dans la mobilité des porteurs de charge. En chapitre II, nous avons observé une large variation de la masse de courbure de la bande hh entre les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . On en déduit que la mobilité maximale est obtenue dans les directions  $x$  et  $y$  (soit, dans les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ ), alors que le minimum de mobilité se trouve à 45 degrés (soit, selon la direction  $\langle 110 \rangle$ ). Le ratio des masses hh observé pour les deux directions,  $m^{hh} \langle 100 \rangle / m^{hh} \langle 110 \rangle$ , est proche de 2 [28]. Or, ce ratio est loin d'être observé dans les variations de courant de 6%. L'augmentation du courant dans le régime de saturation dans la

<sup>7</sup>Cette adéquation n'est pas reproductible avec tous les modèles de mobilité. Notamment, les simulations de Dérive-Diffusion avec le modèle de mobilité unifié de philips, également largement utilisé dans la simulation des transistors MOSFETs, avec les paramètres par défaut présentent des valeurs de courants doubles en comparaison des simulations de Monte Carlo SPARTA. L'effet de la composante normale au canal du champ électrique a également été pris en compte par le modèle renforcé Lombardi [25].

<sup>8</sup>L'auteur souligne aussi l'influence de la largeur du dispositif sur l'augmentation du courant dans le cadre expérimental. Une augmentation de 12% est mesurée pour une largeur de grille de 1  $\mu\text{m}$ .

<sup>9</sup>Puisque la bande de spin-orbite est décalée en énergie par rapport au deux autres, seules deux bandes hh et lh sont prises en compte dans les calculs de la répartition des porteurs de charge à 0K. En revanche, la bande de spin-orbite doit être considérée dans l'estimation de la répartition des porteurs de charge dans les premières bandes de valence lors de l'étude des propriétés de transport à température ambiante ( $T = 300K$ ).

direction  $\langle 100 \rangle$  vs.  $\langle 110 \rangle$  ne peut pas se déduire uniquement à partir des valeurs de la masse de courbure dans ces deux directions.

La “faible” valeur du ratio du courant dans ces deux orientations provient des interactions subies par les porteurs dans le canal. Il est connu expérimentalement que la mobilité des trous à faible champ est isotrope dans le Silicium massif [29][30]. En ce qui concerne les MOSFETs, des publications [27][31] sous-entendent, de même, que la mobilité des trous dans les deux directions cristallographiques sont équivalentes dans le cadre de dispositifs longs. Selon les auteurs, la masse de conduction des trous dans les dispositifs longs, correspond à une masse moyennée sur la zone proche de  $\Gamma$   $m_c = m_{av}$ . Ceci n’est possible que s’il y a suffisamment d’interactions de façon telle que la longueur de relaxation de la vitesse  $L_m$  soit faible (voir Section III.3.2.3.). Dans ce cas, la vitesse de dérive de ces dispositifs est largement inférieure à la vitesse thermique [27] ( $v_{therm} = 10^7$  cm/s dans le Si). Par conséquent, le transport des trous sera le même dans les deux directions cristallographiques. Sans contrainte, l’isotropie de la mobilité des trous à faible champ corrobore avec les valeurs similaires de l’inverse de la masse moyenne pour les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ , tel qu’observé en chapitre II (Figure II.42). Comme souligné par Fan et al. [32], considérer uniquement la courbure de bande au point  $\Gamma$ , peut conduire à de larges erreurs d’interprétation. Par conséquent, le transport des trous doit être compris sur la base d’une description globale des trois premières bandes de valence.

Dans le cas des canaux courts, comme dans l’exemple de notre dispositif de 25 nm, le transport peut-être considéré comme quasi-balistique [19]. Ce qui revient à uniquement décrire la structure de bandes 3Dk selon la direction du transport. Les propriétés de transport balistique sont directement reliées à la vitesse thermique des porteurs de charge localisés à proximité de la barrière de potentiel (voir Figure III.15). Or, cette vitesse thermique,  $v_{therm}$ , dépend de la masse de conduction  $m_c$  des porteurs de charge:

$$v_{therm} = \sqrt{\frac{2kT}{m^*_c}} \tag{Eq-III.4}$$

Dans le régime de transport quasi-balistique, le porteur de charge subit peu de collisions entre la source et le drain. Ainsi, la masse effective de conduction est associée à la masse de courbure parallèle à la direction du courant. Cela est résumé en Figure III.15, où le transport est différencié selon la longueur de grille des transistors. Comme  $m_{\langle 100 \rangle}$  est supérieure à  $m_{\langle 110 \rangle}$ , le courant est plus fort dans la direction  $\langle 100 \rangle$  dans les dispositifs courts.

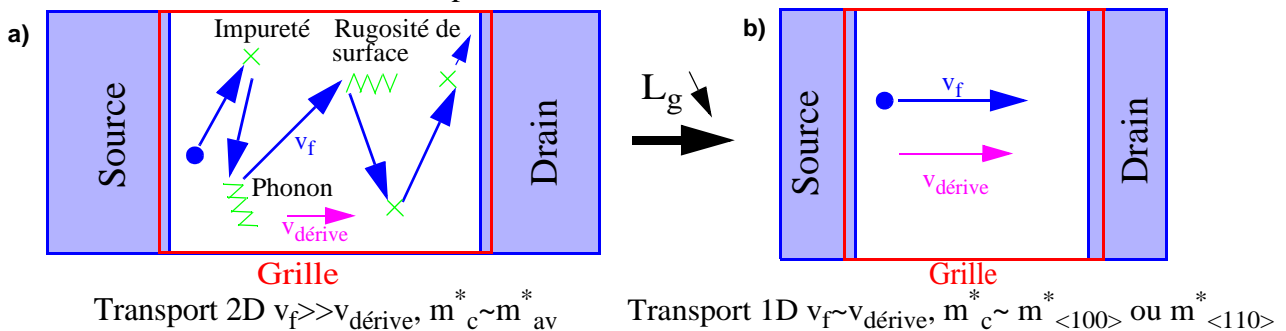


Figure III.15: Schéma d’un transport diffusif 2D le long du canal a) dans un dispositif électronique long, b) transport balistique 2D dans un dispositif électronique court, d’après [27].

Ces considérations sur l’influence de la longueur de grille du dispositif dans les propriétés de transport des trous peuvent être généralisées en fonction des régimes de transport étudiés. Dans le régime linéaire, la masse de trous est moyennée  $m_{av}$ ; Dans le régime de transport de saturation, la masse de conduction des trous s’assimile à la masse de courbure dans la direction du courant. Par cette interprétation, nous retrouvons bien une augmentation du courant pour les dispositifs à faibles longueurs de canal ainsi que dans les régimes de forte polarisation de drain (donc, dans des conditions quasi-balistiques).

Si la variation du courant dans les dispositifs nanométriques n'est pas relative au ratio des masses de conduction dans les directions du canal ( $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ ), c'est qu'une faible proportion de porteurs de charge dans notre dispositif est quasi-balistique. Ces particules, injectées par la source, ne subissent aucune interaction durant leur traversée du canal. La masse de transport de ces particules est équivalente à la masse de courbure dans le sens du transport. Néanmoins, sur le dispositif de 25nm, la variation du courant de 6% observée dans nos simulations ne peut pas être attribuée directement à une proportion équivalente de porteurs de charge balistique<sup>10</sup>.

Cette étude théorique montre bien une augmentation du courant des trous entre les deux directions de transport  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$  dans les dispositifs pMOSFETs à canaux courts sous forte tension de drain. A la différence des études expérimentales, Il faut noter que cette étude théorique est dénuée de toute incertitude sur l'architecture des MOSFETs orientés  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Ces architectures sont identiques pour les deux directions. De fait, dans le cadre des expériences menées dans la littérature, l'orientation du substrat vient perturber le procédé de fabrication des MOSFETs [26]. Dans les circuits intégrés, les dispositifs sont actuellement isolés les uns des autres par des tranchées d'oxyde de Silicium par le procédé STI (*Shallow Trench Isolation*), formés dans des plans cristallographiques. Il est connu que la vitesse d'oxydation du Silicium SiO<sub>2</sub> varie en fonction de l'orientation des plans à oxyder. L'épaisseur de l'oxyde dans les tranchées induit des contraintes dans le dispositif. La Ref. [26] suspecte ces contraintes parasites être à l'origine de fortes différences sur les données expérimentales extraits de dispositifs pMOSFETs non contraints intentionnellement et utilisant les deux orientations de canal  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Une variation de 12% sur les courants de drain est mesurée sur des dispositifs de largeur de grille de 1 $\mu$ m.

Dans le cadre des nMOSFETs, la variation du transport le long des deux directions du canal est faible (inférieure à 2%). Les vallées de conduction étant des ellipsoïdes, les masses de conduction dans les deux directions  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  sont équivalentes. Que ce soit dans le régime linéaire ou saturé, l'influence de l'orientation du champ électrique est nulle. En outre, le transport balistique,  $v_{therm} \propto \frac{1}{m_c}$  ne dépend pas non plus de l'orientation cristallographique.

#### III.2.4.5. Note sur les modèles Dérive-Diffusion

D'après les considérations précédentes, il apparaît que les modèles de Dérive-Diffusion présentent des limitations intrinsèques à leur développement:

- Les simulateurs de Dérive-Diffusion ne prennent pas en compte les phénomènes balistiques du transport. Ces simulateurs ne peuvent donc différencier les variations de courant dans les dispositifs nanométriques en fonction de la direction de transport.

- Les variations de courant en fonction de la longueur du canal du Dérive-Diffusion sont différentes de celles présentées par le Monte Carlo à fort champ.

Cependant, les paramètres d'ajustement de ces modèles peuvent être calibrés afin de reproduire les courants des dispositifs nanométriques. Il est prouvé dans ce manuscrit, toute l'utilité des résultats références des simulateurs Monte Carlo dans cette calibration:

- Des résistances d'accès doivent être introduites dans les simulations Dérive-Diffusion. Ces résistances d'accès peuvent être déduites des chutes de potentiel dans les régions de source et de drain des simulations Monte Carlo convergées.

<sup>10</sup>Les facteurs de balisticité effective et intrinsèque, respectivement  $B_{eff}$  et  $B_{int}$ , permettent de quantifier la balisticité dans un dispositif électronique [33].  $B_{eff}$  correspond au rapport des courants des canaux standard et balistique (où aucune interaction n'intervient).  $B_{int}$  représente la proportion de porteurs de charge balistique en fin de canal. Comme souligné par [33], la relation entre  $B_{eff}$  et  $B_{int}$  n'est pas linéaire dans les dispositifs de longueur de grille inférieure à 50 nm. Rappelons également que les porteurs de charge et leurs interactions dans la couche d'énergie  $kT$  ou à quelques  $kT$  contribuent réellement au courant électrique. Ce qui contribue également à la faible variation de courant observée.



- En présence des phénomènes de transport hors-équilibre, les paramètres de calibration concernant la mobilité à faible et à fort champ (avec la saturation de la mobilité associée) doivent être réajustés en regard des simulations Monte Carlo.

Par ailleurs, des améliorations sont actuellement développées dans les modèles compacts afin de modéliser les effets non-stationnaires et quasi-balistiques:

- Effets non stationnaires: la modélisation analytique la plus simple des effets de transport non stationnaires tient compte d'une modulation de la vitesse de saturation [34]. Des modèles plus complexes reposent sur la théorie des moments [35][36]. Pour des dispositifs à canaux ultra-courts ( $L_g < 10$  nm), la modélisation se base sur les matrices d'interaction [37].

- Effets quasi-balistiques: des travaux expriment le courant quasi-balistique à partir de la théorie de Landauer [16][19]. Les travaux de Shur et al. [38] ont défini une formulation de la mobilité sur la base de la loi de Mathiessen qui inclut les phénomènes hors-équilibre thermodynamique du transport.

#### **III.2.4.6. Bilan sur la modélisation numérique des propriétés de transport dans un dispositif MOSFET non contraint**

Depuis quelques années, les simulateurs Monte Carlo sont devenus des outils de référence dans la calibration des simulateurs de Dérive-Diffusion. Un consensus général sur la validité et la précision de ces modèles est d'une grande importance. Nous avons comparé les résultats de deux simulateurs de conceptions différentes et ne présentant pas les mêmes modèles de mécanisme de relaxation. Nous avons constaté au cours de cette étude que les simulations Monte Carlo doivent être considérées avec précaution:

- Les résultats des calculs des simulateurs Monte Carlo ne sont pas identiques dans l'estimation des valeurs absolues des courants Ion (bien que qualitativement en accord).
- Le calcul de la variation des courants en fonction de la longueur de grille par les Monte Carlo SPARTA et MC++ présente également des différences.

La calibration des modèles de Dérive-Diffusion à partir des simulations Monte Carlo est donc sujette à caution concernant l'estimation:

- de la valeur absolue du courant dans un dispositif.
- de l'évolution des paramètres d'ajustement des modèles de mobilité à fort champ en fonction de la longueur de grille.

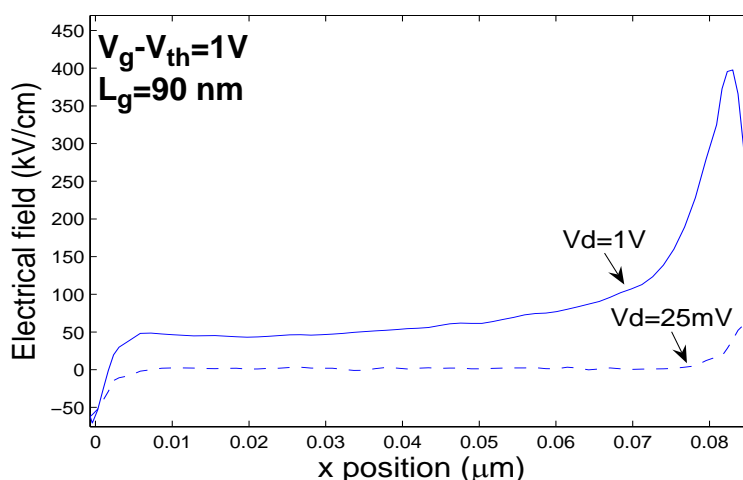
Toutefois, nous avons observé que la méthode Monte Carlo parvenait à reproduire le ratio des courants issus de deux directions de canal d'un pMOS en fonction de la longueur de grille. La variation du courant observée est liée aux effets de transport hors-équilibre qui se comportent différemment selon la direction du canal. Ainsi, les simulateurs Monte Carlo peuvent être considérés comme des outils adaptés à l'étude de mécanismes physiques qui influencent le courant d'un dispositif à longueur de grille équivalente. Dans la Section III.3., nous calculons à l'aide du Monte Carlo SPARTA, les variations de courant de nanodispositif MOSFETs à différentes longueurs de grille sous contraintes uniaxiales.

### III.2.5. Des profils de champs et de vitesse issus des simulations Monte Carlo d'un nMOSFET

Nous montrons dans cette partie les profils de champs électriques et de vitesse le long des canaux de nMOSFETs issus des calculs du Monte Carlo SPARTA. Par ces profils, nous discutons l'évolution des effets de transport hors-équilibre dans les MOSFETs sous différentes conditions de polarisation ainsi qu'en fonction de la longueur de grille. Ces discussions serviront de base à la description de la variation du courant dans les MOSFETs sous contrainte.

#### III.2.5.1. Influence des conditions de polarisation

Le profil du champ électrique longitudinal le long du canal d'un nMOS non contraint de 90nm de longueur de grille (structure SINANO), est montré en Figure III.16 pour deux tensions de drain  $V_d=1V$  et  $V_d=25mV$ . Le dispositif simulé est orienté selon  $\langle 110 \rangle$ . Ces profils sont moyennés par la densité de porteurs de charge perpendiculairement à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. Nous voyons que la valeur maximale du champ électrique pour la tension de drain  $V_d=1.0V$  est de 422 kV/cm. En comparaison, la valeur maximale du champ est de 75 kV/cm pour la tension de drain de 25mV. Les champs sont supérieurs au champ critique  $E_c$  (environ à 30 kV/cm) à partir duquel la vitesse des porteurs de charge sature (voir ANNEXE III.B, Figure III.B.1).

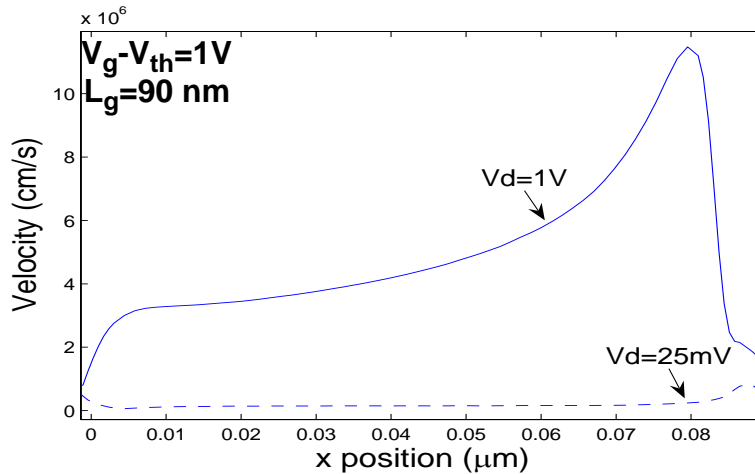


**Figure III.16:** Profils du champ électrique longitudinal le long du canal dans la structure nMOS SINANO non contrainte orientée en  $\langle 110 \rangle$  avec une longueur de grille de 90 nm, sous des potentiels de drain de 1.0V et 25mV. La tension de grille considérée est telle que  $V_g - V_{th} = 1V$ . La position où le champ électrique change de signe du côté source du canal est prise comme origine. Le champ électrique moyen est pondéré par la densité des porteurs de charge perpendiculairement à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>.

La Figure III.17 montre les profils de vitesse le long du canal d'un nMOS non contraint de 90nm de longueur de grille pour deux tensions de drain  $V_d=1V$  et  $V_d=25mV$ . Pour la tension de grille de 25 mV, la vitesse moyenne maximale des porteurs de charge est de  $4 \cdot 10^5$  cm/s, tandis qu'elle est de  $1.24 \cdot 10^7$  cm/s pour  $V_d=1V$ <sup>11</sup>. La vitesse de dérive maximale pour la tension  $V_d=1V$  est supérieure à la valeur de saturation du Si massif, proche de  $1 \cdot 10^7$  cm<sup>2</sup>/V.s (voir ANNEXE III.B, Figure III.B.1). Pour la tension de drain de  $V_d=1V$ , des effets de transport hors-équilibre sont donc déjà présents dans ce MOSFETs de 90nm.

Cependant, le courant des MOSFETs est dépendant de la vitesse des porteurs de charge du côté source du MOSFET [15]. Pour la tension  $V_d=25mV$ , le champ électrique est inférieur à 10 kV/cm sur la majeure partie du canal. La vitesse des porteurs de charge est directement liée à la

<sup>11</sup> Les faibles valeurs de la vitesse à faible champ, montrées avec une tension de drain de 25mV en Figure III.17, s'expliquent par la forte contribution des processus coulombiens à faible champ électrique. Cette contribution réduit la mobilité [2] (voir Figure III.5).

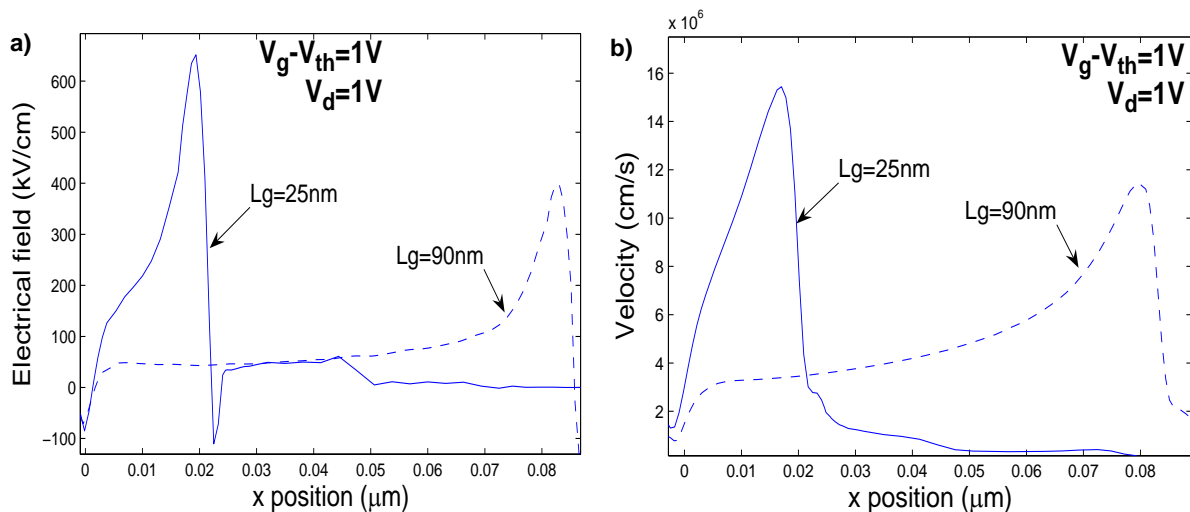


**Figure III.17:** Profils de la vitesse de dérive le long du canal dans la structure nMOS SINANO non contrainte orientée en  $\langle 110 \rangle$  avec une longueur de grille de 90 nm, sous des potentiels de drain de 1.0V et 25mV. La tension de grille considérée est telle que  $V_g - V_{th} = 1V$ . La position où le champ électrique change de signe du côté source du canal est prise comme origine. La vitesse de dérive est pondérée par la densité des porteurs de charge perpendiculairement à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>.

mobilité faible champ de la caractéristique champ-vitesse. Par contre, dans le cas de la tension  $V_d = 1V$ , les porteurs de charge expérimentent, au bout de 4nm dans le canal, un champ électrique moyen supérieur à 30 kV/cm. La vitesse des porteurs de charge est alors dépendante de la région non-linéaire de la caractéristique champ-vitesse (Figure III.B.1).

### III.2.5.2. Influence de la longueur de grille

Les profils du champ électrique d'un nMOS pour deux longueurs de grille  $L_g = 25\text{ nm}$  et  $L_g = 90\text{ nm}$  sont tracés en Figure III.18 a). Le dispositif, orienté selon  $\langle 110 \rangle$ , est polarisé tel que  $V_d = 1V$  et  $V_g - V_{th} = 1V$ . Nous voyons que la variation du champ effectif est nettement plus rapide pour une longueur de grille de 25 nm. Après 10 nm de distance depuis la jonction source, le champ électrique est de l'ordre de 218 kV/cm.



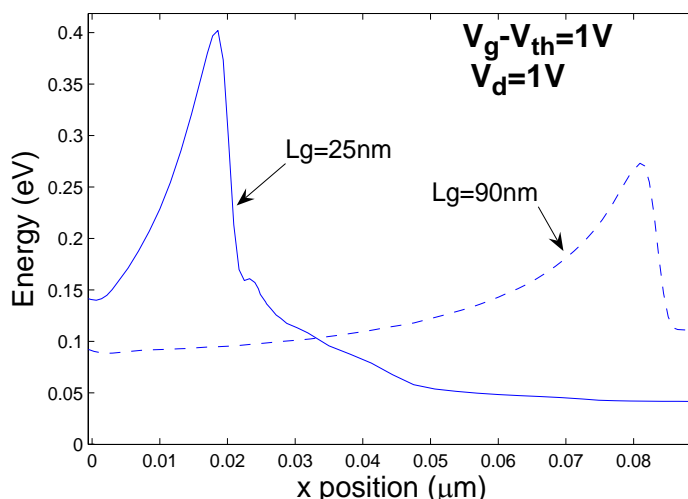
**Figure III.18:** a) Profils du champ électrique et b) profils de la vitesse de dérive le long du canal dans la structure nMOS SINANO non contrainte orientée en  $\langle 110 \rangle$  avec des longueurs de grille de 25 nm et 90 nm, sous un potentiel de drain de 1.0V. La tension de grille considérée est telle que  $V_g - V_{th} = 1V$ . La position où le champ électrique longitudinal change de signe du côté source du canal est prise comme origine. Le champ électrique moyen est pondéré par la densité des porteurs de charge perpendiculairement à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>.

Par cette variation rapide du champ électrique, l'électron atteint rapidement la vitesse de  $1.076 \cdot 10^7$  cm/s (voir Figure III.18 b)). Le pic de survitesse à  $1.26 \cdot 10^7$  cm/s se situe à 18 nm de la jonction source. Les effets de transport hors-équilibre sont présents dans le dispositif de 25 nm à faible distance de la jonction du canal. Ils doivent avoir une influence non négligeable sur la valeur du courant en sortie du nanodispositif.

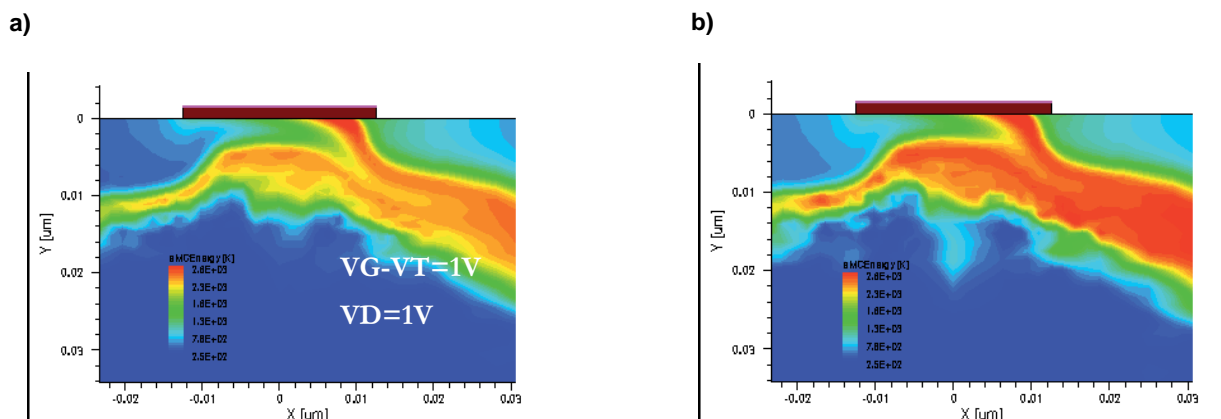
### III.2.5.3. Profils d'énergie

Afin de compléter l'analyse de l'influence des effets non-stationnaire et quasi-balistique du transport sur la variation du courant, la Figure III.19 montre le profil de l'énergie moyenne des porteurs de charge le long du canal de structures nMOS en forte inversion avec des longueurs de grille de 25 nm et 90 nm dans le régime de saturation ( $V_d=1V$ ). Les effets de transport hors-équilibre provoquent un échauffement du gaz électronique. Nous observons une augmentation de l'énergie des porteurs de charge. En effet, l'énergie moyenne des porteurs de charge est bien supérieure à l'énergie thermique  $\frac{3}{2}kT_L$  (40 meV pour une température du réseau cristallin à  $T=300$  K).

La cartographie des énergies des porteurs de charge dans une structure nMOSFET SINANO de 25nm de longueur de grille est montrée en Figure III.20. Le dispositif est polarisé avec  $V_d = 1V$  et  $V_g - V_{th} = 1V$ .

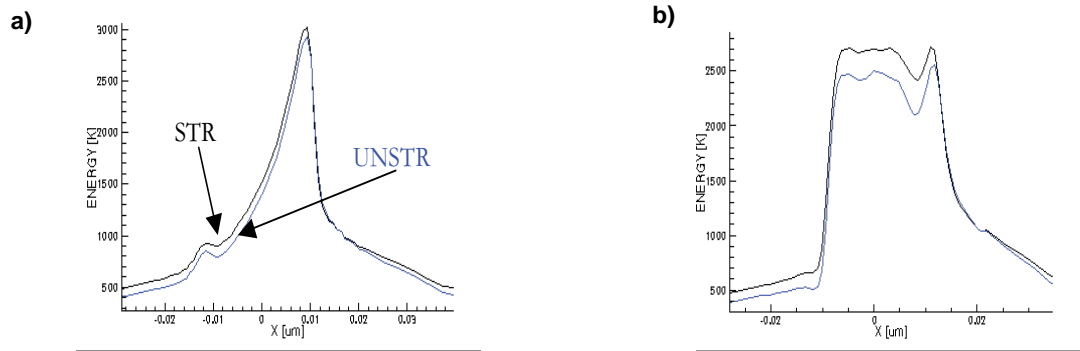


**Figure III.19:** Profils de l'énergie moyenne des électrons le long du canal dans la structure nMOS SINANO non contrainte orientée en  $\langle 110 \rangle$  avec des longueurs de grille de 25 nm et 90 nm, sous un potentiel de drain de 1.0V. Nous appliquons la tension de grille telle que  $V_g - V_{th} = 1V$ . La position où le champ électrique change de signe du côté source est prise comme origine. L'énergie moyenne est pondérée par la densité des porteurs de charge perpendiculairement à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>.



**Figure III.20:** Cartographie 2D de l'énergie d'un transistor nMOS SINANO de 25nm de longueur de grille orienté  $\langle 100 \rangle$ : **a)** non contraint, **b)** sous contrainte uniaxiale le long de la direction  $\langle 100 \rangle$ .

La Figure III.21 montre les énergies de porteurs en fonction de la position dans ces mêmes dispositifs SINANO relaxés de 25nm orientés  $\langle 100 \rangle$ .



**Figure III.21:** Profils de l'énergie moyenne des électrons le long du canal de structures relaxée et sous contrainte tensile  $\langle 100 \rangle$  de 200MPa d'un transistor nMOS SINANO de 25 nm de longueur de grille orienté  $\langle 100 \rangle$ : a) coupe à 1 Å et b) 5nm de profondeur. Une tension de 1.0V est appliquée au drain. Nous appliquons la tension de grille telle que  $V_g - V_{th} = 1V$ .

Les caractéristiques de ces dispositifs sous contrainte tensile de 200MPa sont également reportées en Figure III.20 et Figure III.21. Les effets de ces contraintes seront discutés en Section III.3.2.3.

### III.3. Simulations des propriétés de transport dans les MOSFETs contraints

Nous traitons en Section III.3.1. les aspects pratiques de la simulation de Monte Carlo. Nous montrons les difficultés inhérentes dans la recherche d'une convergence optimale des simulations. Par ailleurs, nos propres structures de bandes ont été générées pour des directions de contrainte bien définies. Nous montrons l'interchangeabilité des structures de bandes dans la simulation des dispositifs sous contrainte biaxiale pour des dispositifs nMOSFET et pMOSFET de 25nm de longueur de grille.

La Section III.3.2.1. est consacrée l'impact des contraintes appliquées sur les propriétés statiques des MOSFETs simulés, notamment la variation de tension de seuil. Enfin, en Section III.3.2.2., nous étudions respectivement la variation de courant dans les nMOSFETs sous contraintes uniaxiales. Le calcul de ces variations de courant, à l'aide des Monte Carlo, pour plusieurs longueurs de grille permet d'étudier l'impact de la contrainte sur les propriétés de transport. Les effets de confinement et de contrainte sur les propriétés statiques des nMOSFETs simulés ont été isolés dans cette étude.

Dans cette dernière section, nous n'étudierons que les propriétés de transport de nMOSFETs sous contraintes uniaxiales de valeur absolue 200MPa. Les propriétés de transport dans le régime linéaire des couches d'inversion des pMOSFETs sous contrainte uniaxiale seront étudiées dans le chapitre IV. Nous séparons donc l'étude des propriétés de transport entre les nMOS et pMOS. Ce choix est motivé par le fait que les effets de contrainte impactent différemment les bandes de valence et de conduction. Par ailleurs, l'influence du couplage entre les effets de contrainte uniaxiale et de confinement dans la mobilité des trous d'une couche d'inversion sera quantifié en chapitre IV par une comparaison cohérente des simulations Kubo-Greenwood 3Dk et 2Dk.

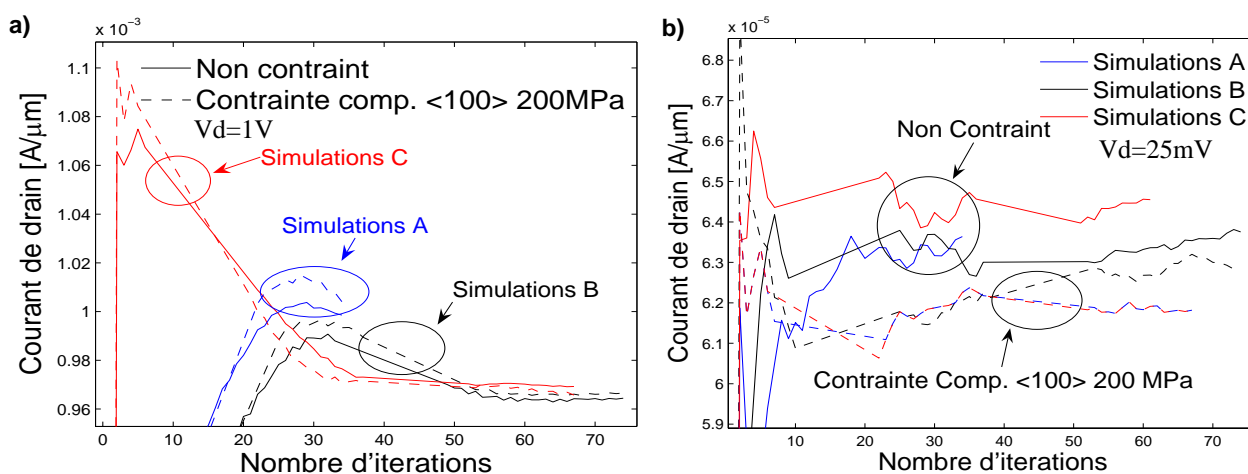
Cette étude n'est qu'une première analyse des simulations de dispositifs sous contrainte avant leur comparaison à des mesures de MOSFETs sous contrainte parfaitement contrôlée (voir chapitre V concernant les expériences de Wafer Bending).

### III.3.1. Quelques aspects pratiques à ne pas oublier

#### III.3.1.1. La très longue convergence des simulations Monte Carlo

Les techniques d'ingénierie de contrainte induisent des variations de courant de l'ordre de 5-10% [26]. Afin d'assurer nos résultats, nos simulations Monte Carlo SPARTA ont été initialisées pour une barre d'erreur de 1% sur les courants de drain finaux<sup>12</sup>. Par ailleurs, la collecte de statistiques dans les simulations Monte Carlo ne s'effectue qu'après un temps effectif afin de minimiser l'impact de valeurs "non stationnaires" dans le calcul de la moyenne. De fait, la marge n'est atteinte qu'après une longue durée de calculs (supérieure à 10 heures pour une condition de polarisation).

En Figure III.22, nous présentons les moyennes cumulatives de courants de drain en fonction du nombre d'itérations<sup>13</sup> d'un nMOSFETs orienté en  $\langle 110 \rangle$ . Les résultats des dispositifs sont présentés pour deux configurations de contrainte, relaxé et contraint uniaxialement en compression dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . Dans ces figures, trois ensembles de critères de convergence (A, B et C) sont appliqués aux simulations.



**Figure III.22:** Moyenne cumulative des courants de drain d'un transistor nMOSFET en fonction du nombre d'itérations dans le régime **a)** saturé et **b)** linéaire. La structure simulée a une longueur de grille de 25 nm orienté  $\langle 110 \rangle$  non contraint et contraint en compression à 200MPa dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . Trois ensembles de paramètres de convergence A, B et C (reportés en Tableau III.2) ont été utilisés dans les simulations. Il est à noter que les simulations Monte Carlo SPARTA, présentées dans ce manuscrit, ont été obtenues à l'aide de l'ensemble de paramètres C.

<sup>12</sup>Rappelons que l'incertitude générale associée aux résultats des simulations Monte Carlo n'est pas uniquement dû bruit statistique de la méthode, mais il faut également prendre en compte la pertinence des modèles implémentés.

<sup>13</sup>Les itérations de Poisson sont uniformément réparties sur la durée maximale de simulation. Ainsi, un pas de temps est défini entre deux itérations. Le nombre d'itérations en abscisse des Figure III.22 correspond donc à une durée de simulation.

Dans le cadre de SPARTA, la convergence des simulations Monte Carlo est reliée à 4 critères de convergence:

- Le temps maximal de convergence correspond au temps physique de simulation maximal établi par le programmeur.
- Le temps de simulation avant la collecte des statistiques correspond au temps physique de simulation après lequel les résultats de simulation sont estimés fluctuer autour d'une solution stationnaire. C'est à partir de ce temps que la collecte des statistiques est effectuée, notamment l'estimation du courant de drain.
- Le nombre d'itérations de Poisson dénombre les intervalles qui divisent le temps maximal de simulation. Lorsque la solution stationnaire est rejointe, une estimation du courant de drain est effectuée après chaque intervalle, via une moyenne sur l'ensemble des valeurs obtenues lors des collectes des statistiques. C'est également à la fin de chaque intervalle de temps de simulation que l'équation de Poisson est résolue, couplée à la répartition des porteurs de charge.
- La barre d'erreur détermine l'erreur relative sur l'estimation du courant de drain en-dessous de laquelle la simulation peut être arrêtée avant la fin du temps maximal de simulation. Toutefois, la simulation ne peut s'arrêter avant que la solution stationnaire ne soit obtenue.

Ces critères sont reportés en Tableau III.1. Les simulations utilisant les ensembles de paramètres A et B, présentent le même temps de simulation avant le début de la collecte des statistiques. Le nombre total d'itérations et le temps final de simulation sont augmentés dans le cas B. Les simulations avec les critères de convergence C ont un temps de simulation, avant la collecte des statistiques, double par rapport aux deux autres simulations.

**Tableau III.1:** Tableau des paramètres de convergence des simulations A, B et C présentées en Figure III.22. Les paramètres des simulations C ont été utilisés sur l'ensemble de ce manuscrit. Les simulations se terminent lorsque les conditions de convergence sont atteintes. Les simulations s'arrêtent avant le temps maximal de simulation si l'erreur relative entre les moyennes cumulatives de courant de drain est inférieure à une barre d'erreur fixée. Pour continuer la simulation au-delà du critère de convergence fixée par la barre d'erreur, un nombre minimal d'itérations peut être imposé avant l'arrêt des simulations.

Paramètres	Simulations des dispositifs nMOS et pMOS de longueur de grille de 25 nm.		
	A	B	C
Temps de simulation à partir duquel les statistiques sont collectées [s]	$3.0 \cdot 10^{-6}$	$3.0 \cdot 10^{-6}$	$6.0 \cdot 10^{-6}$
Temps de simulation avant la collecte des statistiques [s]	$3.0 \cdot 10^{-6}$	$3.0 \cdot 10^{-6}$	$6.0 \cdot 10^{-6}$
Temps maximal de simulation [s]	$9.0 \cdot 10^{-6}$	$18.0 \cdot 10^{-6}$	$18.0 \cdot 10^{-6}$
Nombre d'itérations de Poisson sur le temps maximal de simulation (-> détermine la durée de chaque itération)	50	88	100
Critère de convergence Barre d'erreur [%] / Nb minimal d'itérations	2.5 / 10	1.0 / 80	1.0 / 80

Dans le cadre du dispositif nMOSFET, les trois ensembles de critères de convergence n'aboutissent pas aux mêmes conclusions. Les simulations de type A donnent des variations positives de courant plus importantes que celles de type B. Pour les simulations de type C, nous observons un croisement de courant entre les cas de nMOS contraint et non contraint. Nous trouvons, pour cet ensemble de critères de convergence, une variation négative du courant en fonction de la contrainte en cohérence avec les attentes physiques basées sur la description des structures de bandes (voir Section III.3.2.).

Les résultats présentés dans le manuscrit ont été obtenus à l'aide des critères de convergence de type C. Nous montrons par ailleurs (Sections III.3.2.) que les résultats sur la variation de courant sous contrainte uniaxiale, obtenus avec cet ensemble de paramètres, sont en adéquation avec les attentes basées sur la compréhension physique des structures de bandes effectuée en chapitre II.

### III.3.1.2. Influence de la structure de bandes sur la variation de courant

Nous analysons, dans cette section, l'influence des modèles de structure de bandes sous contrainte dans le cadre d'un MOSFET ultime de 25 nm de longueur de grille.

Les structures de bandes incluses dans SPARTA sont relativement peu nombreuses et ne concernent que les contraintes biaxiales. Or, l'ingénierie actuelle de contrainte privilégie les contraintes uniaxiales qui allient une augmentation accrue de la mobilité des porteurs de charge avec une souplesse d'intégration technologique [39] (comme l'utilisation du procédé CESL, *Contact Edge Stop Layer*). De nouvelles structures de bandes modifiées par les contraintes uniaxiales sont calculées. Ces structures de bandes sont tabulées et intégrées aux simulations Monte Carlo SPARTA. Le Monte Carlo SPARTA ayant été calibré pour des structures de bandes issues du Modèle EPM non local de Rieger et Vogl [5], il est nécessaire de valider la compatibilité des structures de bandes  $k,p$  30 bandes<sup>14</sup> avec la calibration des temps d'interaction de SPARTA. Nous avons comparé les simulations utilisant les structures de bandes EPM non local et celles utilisant les structures de bandes du  $k,p$  30 bandes.

Des simulations sont effectuées à partir de structures de bandes des modèles  $k,p$  30 bandes [6] et EPM non local avec deux paramétrages différents [5][6] sur des dispositifs nMOS et pMOS. Les dispositifs de 25 nm longueur de grille sont simulés pour deux conditions de contraintes: relaxé et biaxialement contraints (correspondant à une couche de Silicium biaxialement contrainte, déposée par épitaxie sur un matériau relaxé  $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ ). Dans cette étude, les structures de bandes sont les uniques modifications des simulations. La calibration de SPARTA est restée inchangée. Les paramètres technologiques du MOSFETs ainsi que les taux d'interaction pris en compte dans les simulations ont été conservés à l'identique pour toutes les simulations.

Les courants obtenus des nMOS et pMOS sont reportés respectivement en Tableau III.2 et Tableau III.3. Nous avons calculé la différence relative des courants obtenus des différents modèles en comparaison de l'EPM non local Rieger et Vogl [5] (prise en compte lors de la calibration de SPARTA [53]). Les simulations Monte Carlo obtenues avec les méthodes EPM et  $k,p$  30 bandes produisent des résultats cohérents. Une variation des courants de drain est observable entre les conditions relaxée et contrainte: pour  $V_d=1.0\text{V}$ , 35% pour les électrons et 3% pour les trous pour les simulations effectuées avec l'EPM non local. Ces variations sont en accord avec la littérature [4][18] pour un dispositif de 25 nm.

<sup>14</sup> Le modèle de calcul de structures de bandes a la particularité d'être efficace en temps de calcul (voir chapitre II).



**Tableau III.2:** Courants de drain du transistor nMOS SINANO dans le régime de saturation ( $V_d = 1V$ ) et dans le régime de transport linéaire ( $V_d = 25mV$ ) pour  $V_g = 1V$ . Les courants de drain sont obtenus des simulations SPARTA sur une structure de 25 nm de longueur de grille. Les simulations ont été réalisées en utilisant trois modèles différents de calcul de structures de bandes, l'EPM non local de Rieger et Vogl [5], les modèles EPM non local (sur la base des pseudo-potentiels de Chelikowsky) et  $k.p$  30 bandes développés durant cette thèse [6]. Les configurations relaxée et sous contrainte biaxiale (Si sur  $Si_{0.8}Ge_{0.2}$ ) ont été prises en compte dans les simulations. Les erreurs relatives en regard des modèles de calcul de structures de bandes utilisés dans les simulations ont été calculées par rapport aux résultats obtenus avec la structure de bandes de Rieger et Vogl [5]. Les variations relatives des courants sous contrainte sont calculées pour chaque modèle de calcul de structures de bandes.

nMOS à $V_g=1V$	Méthode	$V_d=1.0V$			$V_d=25mV$		
		Id [ $A/\mu m$ ]	Différence modèle [%]	Variation contrainte [%]	Id [ $A/\mu m$ ]	Différence modèle [%]	Variation contrainte [%]
Non contraint	EPM Rieger	$0.590 \cdot 10^{-3}$	0.00	/	$0.514 \cdot 10^{-4}$	0.00	/
	EPM Chelikowski	$0.599 \cdot 10^{-3}$	1.54	/	$0.520 \cdot 10^{-4}$	1.22	/
	$k.p$ 30 bandes	$0.614 \cdot 10^{-3}$	4.08	/	$0.521 \cdot 10^{-4}$	1.28	/
Contrainte biaxiale (Si/Si <sub>0.8</sub> Ge <sub>0.2</sub> )	EPM Rieger	$0.796 \cdot 10^{-3}$	0.00	34.9	$0.730 \cdot 10^{-4}$	0.00	42.0
	$k.p$ 30 bandes	$0.808 \cdot 10^{-3}$	1.46	31.6	$0.731 \cdot 10^{-4}$	0.14	40.3

**Tableau III.3:** Courants de drain du transistor pMOS SINANO dans le régime de saturation ( $V_d = 1V$ ) et dans le régime de transport linéaire ( $V_d = 25mV$ ) à  $V_g = 1V$ . Les courants de drain sont obtenus des simulations SPARTA sur une structure de 25 nm longueur de grille. Les simulations ont été réalisées en utilisant deux modèles différents de calcul de structures de bandes, l'EPM non local de Rieger et Vogl [5] et le modèle  $k.p$  30 bandes développé durant cette thèse [6]. Les configurations relaxée et de contrainte biaxiale (Si sur  $Si_{0.8}Ge_{0.2}$ ) ont été prises en compte dans les simulations. Les erreurs relatives en regard des modèles de calcul de structures de bandes utilisés dans les simulations ont été calculées par rapport aux résultats obtenus avec la structure de bandes de Rieger et Vogl [5]. Les variations relatives des courants sous contrainte sont calculées pour chaque modèle de calcul de structures de bandes.

pMOS à $V_g=1V$	Méthode	$V_d=1.0V$			$V_d=25mV$		
		Id [ $A/\mu m$ ]	Différence modèle [%]	Variation contrainte [%]	Id [ $A/\mu m$ ]	Différence modèle [%]	Variation contrainte [%]
Non contraint	EPM Rieger	$-0.848 \cdot 10^{-3}$	0.00	/	$-0.4037 \cdot 10^{-4}$	0.00	/
	$k.p$ 30 bandes	$-0.849 \cdot 10^{-3}$	0.1	/	$-0.4075 \cdot 10^{-4}$	0.1	/
Contrainte biaxiale (Si/Si <sub>0.8</sub> Ge <sub>0.2</sub> )	EPM Rieger	$-0.8775 \cdot 10^{-3}$	0.00	3.4	$-0.4424 \cdot 10^{-4}$	0.00	9.5
	$k.p$ 30 bandes	$-0.8688 \cdot 10^{-3}$	0.1	2.3	$-0.4166 \cdot 10^{-4}$	6.2	2.2/

### III.3.1.2.1. nMOSFETs

Dans le cas des nMOS, alors que les différences de courant dans le régime linéaire ( $V_d=25\text{mV}$ ) sont inférieures à 1.3%, des différences nettement plus marquées sont observables pour des courants à forte tension de drain. A  $V_d=1\text{V}$ , l'erreur relative des simulations issues du *k.p* 30 bandes dans le Silicium non contraint est de 4% en comparaison de l'EPM non local de Rieger et Vogl [5]. L'erreur relative des courants de l'EPM non local de Chelikowsky et Cohen [6] est de 1.6 % pour cette tension.

Lors de la calibration des méthodes empiriques, les efforts d'ajustement se concentrent principalement sur les niveaux énergétiques et les courbures de bande des minima de vallées de conduction. Comme expliqué en chapitre II, la méthode *k.p* est ajustée aux résultats obtenus expérimentalement et à partir des simulations *ab initio* sur l'ensemble de l'espace réciproque. Comme démontré également en chapitre II, la méthode de calcul de structures de bandes EPM de Chelikowsky et Cohen [6] rejoint les résultats de la méthode du *k.p* 30 bandes relatifs aux données des minima de bande. Dans la gamme des hautes énergies, des écarts peuvent apparaître entre les structures de bandes calculées par les deux méthodes (voir chapitre II).

Ainsi, l'erreur relative est faible dans le régime linéaire. Par contre, les différences entre les méthodes *k.p* 30 bandes et EPM de Chelikowsky à haute énergie, bien que minimes (voir chapitre II), suffisent à produire une erreur relative plus forte dans le régime de saturation.

### III.3.1.2.2. pMOSFETs

Dans le cas des pMOS, l'ensemble de la zone de Brillouin proche du point  $\Gamma$  est à prendre en considération pour comprendre les propriétés de transport (voir Section III.2.4.). Les différences relatives observées, même à faible champ, sont dues aux disparités entre les méthodes de calcul de structures de bandes. La complexité des couplages des bandes de valence à proximité du point  $\Gamma$  mène à de faibles différences entre les méthodes de calcul dans la modélisation des trois premières bandes de valence. Ainsi, une variation de 6.2% se note dans les simulations à  $V_d = 25\text{mV}$  d'un pMOS contraint biaxialement (couche Si contrainte sur un matériau massif  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ ) entre les méthodes EPM non local de Rieger et Vogl [5] et *k.p* 30 bandes [6].

### III.3.1.2.3. Bilan

Les structures *k.p* 30 bandes et l'EPM de Rieger et Vogl (utilisé par défaut dans SPARTA) donnent des résultats comparables pour des conditions identiques de simulation. Ces résultats tendent à confirmer le fait que, d'un point de vue pratique, la méthode *k.p* 30 bandes peut être utilisée afin de calculer la structure de bandes nécessaire aux simulations Monte Carlo "full band".

Dans les paragraphes suivants, les MOSFETs sous contraintes sont simulés en utilisant des structures de bandes de la méthode *k.p* 30 bandes. Le choix de cette méthode de calcul tient à son efficacité en temps de calcul (voir chapitre II) et sa bonne compatibilité avec le simulateur SPARTA.

### **III.3.1.3. Contraintes utilisées dans les simulations numériques**

Nous avons effectué des simulations Monte Carlo pour des configurations de contraintes uniaxiales. les simulations seront comparées ultérieurement à des mesures de MOSFETs contraints selon ces mêmes directions (voir chapitre V). Les simulations ont été menées avec SPARTA sur des dispositifs électroniques contraints selon les trois directions cristallographiques  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Par conséquent, les tenseurs de contrainte incluent des composantes uniaxiale et de cisaillement.

Au préalable des simulations de transport Monte Carlo, les structures de bandes sont calculées pour des valeurs absolues de contraintes proches de 200MPa. Nous avons utilisé la méthode  $k.p$  30 bandes. Les valeurs des composantes du tenseur de déformation dans le repère cristallographique, utilisées lors du calcul de structures de bandes, sont reportées en Tableau III.4 en fonction de l'orientation de la contrainte. Dans les simulations Monte Carlo, lors du changement d'une orientation de contrainte à une autre, les structures de bandes sont uniquement changées. L'architecture des MOSFETs reste identique d'une contrainte à l'autre.

**Tableau III.4:** Valeurs des différentes composantes du tenseur de déformation dans le repère cristallographique pour trois directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  de contraintes uniaxiales compressives et tensiles. Les structures de bandes intégrées dans nos simulations Monte Carlo ont été calculées à partir de ces valeurs de déformation. Les contraintes sont décrites suivant les notations habituelles:  $\sigma < 0$  pour des contraintes compressives et  $\sigma > 0$  pour des contraintes tensiles. Les indices  $x$ ,  $y$  et  $z$  sont associés aux directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 010 \rangle$  et  $\langle 001 \rangle$ . Les composantes du tenseur de déformation sont exprimées en unité relative [u. r.].

		Valeurs des composantes du tenseur de déformation dans le repère cristallographique [u. r.]					
Orientation des contraintes	Valeur des contraintes [MPa]	$\epsilon_{xx}$	$\epsilon_{yy}$	$\epsilon_{zz}$	$\epsilon_{yz}$	$\epsilon_{xz}$	$\epsilon_{xy}$
$\langle 100 \rangle$	-185	$-1.4 \cdot 10^{-3}$	$3.9551 \cdot 10^{-4}$	$3.9551 \cdot 10^{-4}$	0	0	0
$\langle 100 \rangle$	170	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$-3.6344 \cdot 10^{-4}$	$-3.6344 \cdot 10^{-4}$	0	0	0
$\langle 110 \rangle$	-200	$-5 \cdot 10^{-4}$	$-5 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	0	0	$-6 \cdot 10^{-4}$
$\langle 110 \rangle$	200	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	0	0	$6 \cdot 10^{-4}$
$\langle \bar{1}10 \rangle$	-200	$-5 \cdot 10^{-4}$	$-5 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	0	0	$6 \cdot 10^{-4}$
$\langle \bar{1}10 \rangle$	200	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	0	0	$-6 \cdot 10^{-4}$

Rappelons que dans les paramètres des simulations Monte Carlo SPARTA [4], la contrainte influence exclusivement la densité d'états et les vitesses de groupe (dérivées des structures de bandes). Ces derniers, calculés en fonction de la contrainte, sont pris en compte en entrée des simulations de transport. Dans notre cas, l'influence de la contrainte est négligée sur les potentiels de déformation des taux d'interaction du Monte Carlo.

### III.3.1.4. Variations de la tension de seuil dans le cas du dispositif nMOSFET

Afin d'étudier uniquement l'impact de la contrainte sur les propriétés de transport dans les MOSFETs sous contrainte, les simulations ont été effectuées pour une tension de grille relative à la tension de seuil  $v_g - v_{th} = 1V$  (selon une procédure inspirée des Réfs. [40][41]<sup>15</sup>). Cette approche est nécessaire dans l'étude des transistors sous contraintes et pour différentes longueurs de grille.

Dans l'exemple des dispositifs nMOSFETs, les effets canaux courts (voir Ref. [42]) imposent une large variation de la tension de seuil en parallèle de la diminution de la longueur de grille. Cette variation est de  $\Delta v_{th} \sim 30\%$  pour  $V_d = 1V$  et  $\Delta v_{th} \sim 5\%$  pour  $V_d = 25mV$  sur une gamme de longueur de grille allant de 25 nm à 90 nm. Ces variations de tension de seuil, calculées à partir des caractéristiques  $I_d V_g$  du modèle Dérive-Diffusion, sont faibles en comparaison des résultats

<sup>15</sup>La présence de matériaux SiGe dans les procédés de contrainte biaxiale Si/SiGe induit un décalage de la tension de seuil  $V_{th}$  de 0.2 V. Afin d'empêcher ce décalage, C. Jungeman et al. modifient le profil de dopage de la structure contrainte [18]. En outre, le travail de sortie de la grille de la structure contrainte est changé afin d'obtenir une même densité de charge d'inversion entre les structures relaxées et contraintes pour les mêmes conditions de tension de grille, en l'absence de tension source/drain [18].

expérimentaux de la littérature. Une variation de  $\Delta V_{th} > 50\%$  a été mesurée par C. Ortolland [26] sur une même gamme de longueurs de grille.

Par ailleurs, la tension de seuil est, de même, dépendante de la contrainte appliquée. De fait, le potentiel de Fermi  $\phi_f$  et la tension de bande plate  $V_{FB}$  sont reliés au gap via la densité de porteurs de charge. Comme le gap varie en fonction de la contrainte, nous avons également une variation de la tension de seuil en fonction de la contrainte. La modélisation de la variation de la tension de seuil en fonction de la contrainte est succinctement expliquée en ANNEXE III.D.

Dans nos simulations, les variations observées de la tension de seuil sont relativement faibles ( $\Delta V_{th} < 1\%$ ) pour les contraintes uniaxiales appliquées. Cette variation est indépendante de la longueur de grille. Ceci est en accord avec les mesures expérimentales de la littérature [26].

### III.3.2. Propriétés de transport des nMOSFETs sous contrainte

Nous présentons, dans cette section, les variations de courant calculées par SPARTA sur le dispositif SINANO nMOS pour les trois directions de contrainte uniaxiale  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . L'étude porte sur les variations de courant dans les régimes linéaire Ilin ( $V_d = 25\text{mV}$ ) et de saturation Ion ( $V_d = 1\text{V}$ ) du transport. Deux directions de canal ont été prises en compte,  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Afin d'anticiper les variations de courant dans les technologies futures, deux longueurs de grille ont été prises en compte: 25 et 32 nm.

Nous analysons les variations de courant, pour chaque direction de contrainte, en fonction de l'orientation de canal à partir de considérations physiques sur les structures de bandes. Nous montrons que les simulations Monte Carlo peuvent être comprises à partir du déplacement des extréma de bande et de la modification des courbures de bande. Ces deux contributions au transport peuvent explicitement se déduire du modèle de Drude. De l'équation Eq-I.5 du chapitre I, nous en déduisons la variation de la mobilité:

$$\frac{\Delta\mu}{\mu(0)} = \frac{q\tau(\varepsilon)}{m_c(\varepsilon)} - \frac{q\tau(0)}{m_c(0)} \quad \text{Eq-III.5}$$

où  $m(0)$  et  $\tau(0)$  sont respectivement les masses et les temps d'interaction du matériau dans l'état relaxé.

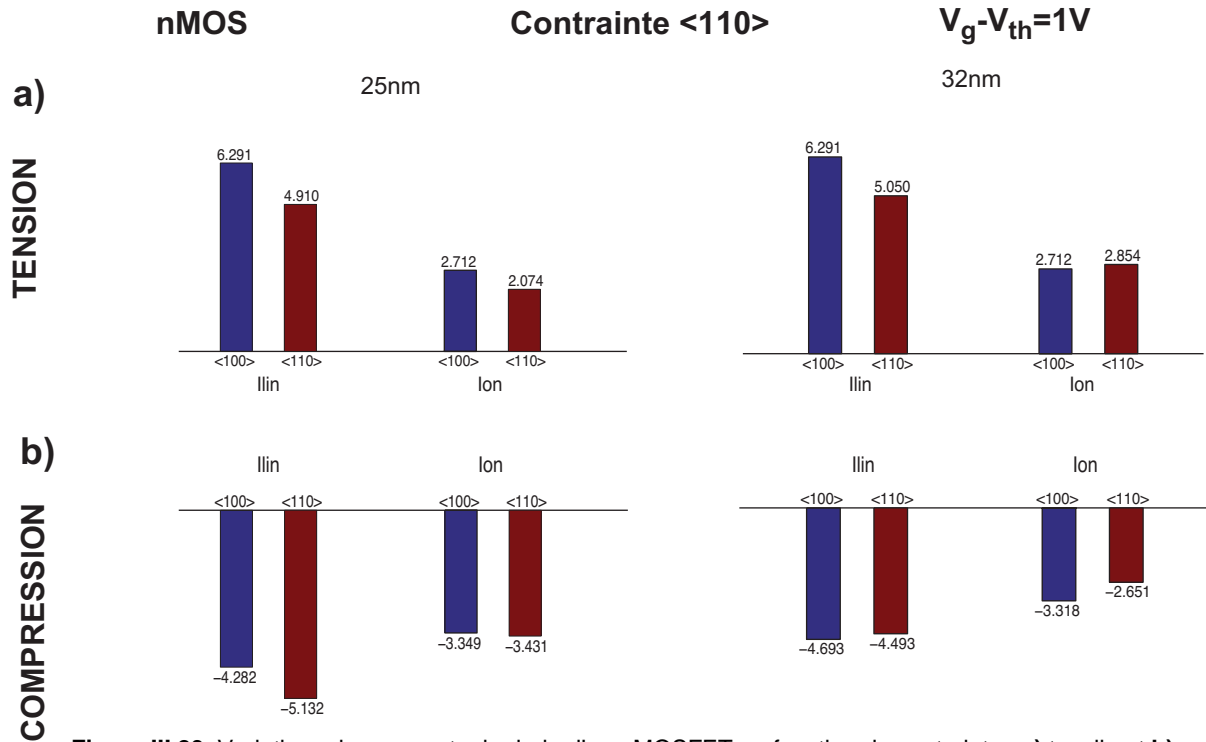
Après le développement limité des calculs au premier ordre, nous arrivons à l'expression:

$$\frac{\Delta\mu}{\mu(0)} = \frac{q\Delta\tau}{m_c(0)} + \frac{q\tau(0) \cdot \Delta m_c}{m_c(0)} \quad \text{Eq-III.6}$$

Comme démontré par ce calcul, la variation de la mobilité est due à la contribution de deux termes. Le premier terme de l'Eq-III.6 est relatif à la variation des taux d'interaction qui dépendent principalement du déplacement des bandes et de la densité d'états. Le second terme dépend de la variation de masse. Comme nous le verrons par la suite, le concours de chacun des termes de l'équation Eq-III.6 au transport dépend du type de contrainte considéré.

#### III.3.2.1. Simulations de courants sous contraintes uniaxiales

Nous avons reporté en Figure III.23 (Figure III.24 et Figure III.25) les variations de courant de drain dans le régime de transport linéaire Ilin ( $V_d = 25\text{mV}$ ) et de saturation Ion ( $V_d = 1\text{V}$ ) en fonction de contraintes compressive et tensile de 200 MPa le long de la direction  $\langle 110 \rangle$  ( $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , respectivement). Les courants obtenus pour les deux directions de canal  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  sont respectivement reportés en rouge et bleu. Les variations de courant Ilin et Ion sont présentées pour deux longueurs de grille (25 nm et 32 nm). La tension de grille est appliquée en regard de la tension de seuil telle que  $v_g - v_{th} = 1\text{V}$ .



**Figure III.23:** Variations des courants de drain d'un nMOSFET en fonction de contraintes **a)** tensile et **b)** compressive selon la direction <110> de 200 MPa en valeur absolue. Les courants de drain sont simulés dans les régimes de transport linéaire à  $V_d = 25\text{mV}$  ( $I_{lin}$ ) et de saturation à  $V_d = 1\text{V}$  ( $I_{on}$ ). Ces variations sont obtenues sur le dispositif de référence SINANO de 25nm (à gauche) et 32nm (à droite) de longueur de grille à des tensions de grille  $V_g - V_{th} = 1\text{V}$ . Les dispositifs sont simulés en fonction de deux directions de canal, <100> (bleu) et <110> (rouge). Les variations des courants sont légèrement sensibles à la longueur de grille du dispositif étudié ainsi qu'aux conditions de polarisation prises en compte (voir texte).

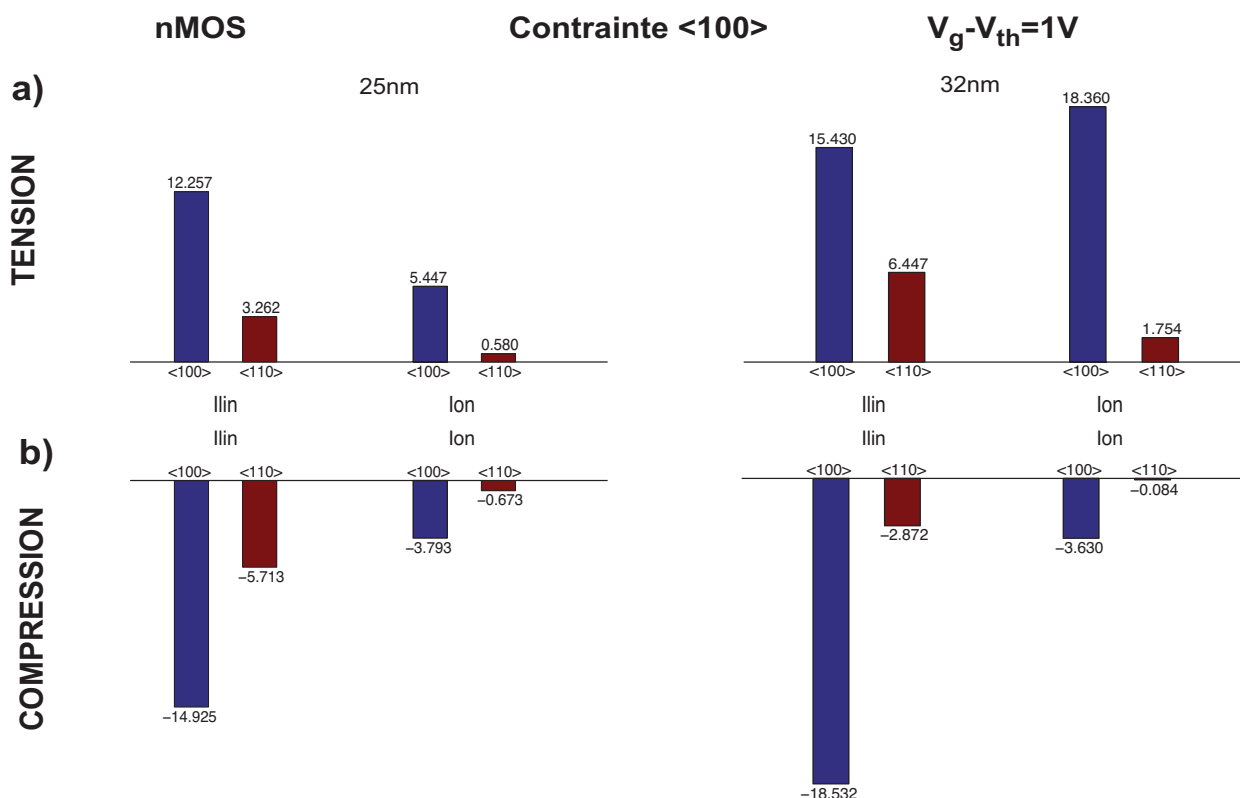
Plusieurs observations sont à noter sur la variation des courants de drain de nMOSFETs en fonction de contraintes uniaxiales:

i) Les simulations du nMOS affichent une augmentation des courants  $I_{on}$  et  $I_{lin}$  pour tous les cas de contraintes tensiles. En revanche, les contraintes compressives conduisent à une diminution des courants  $I_{lin}$  et  $I_{on}$ . Les variations de courant sont relatives aux orientations de contrainte par rapport à la direction du transport. Par exemple, dans le cas du nMOS de 25 nm:

- Pour un canal orienté en <110>, les variations des courants  $I_{on}$  et  $I_{lin}$  dues à la contrainte <110> sont supérieures à celles obtenues pour des contraintes  $\bar{1}10$  aussi bien en compression qu'en tension.

- Pour un canal orienté selon la direction <100>, les variations de courant  $I_{lin}$  sous contraintes <110> et  $\bar{1}10$  sont presque similaires (respectivement -4.282% et -4.488 en compression) si nous tenons compte de l'erreur statistique de 1% des simulations. En revanche la contrainte <100> en compression impose une variation de courant supérieure (-14.925%). La variation de courant trouvée pour cette contrainte <100> est largement supérieure à celles calculées pour les contraintes <110> et  $\bar{1}10$  (plus du double).

ii) Les courants  $I_{lin}$  attestent de variations plus marquées que les courants  $I_{on}$  pour la majorité des orientations de contrainte. Dans l'exemple de la contrainte tensile <100> sur un nMOSFET de 25nm orienté <100>, la différence entre les variations du courant entre le régime linéaire et de saturation est de 11.13%.



**Figure III.24:** Variations des courants de drain d'un nMOS en fonction de contraintes **a)** tensile et **b)** compressive selon la direction <100> proches de 200 MPa en valeur absolue. Les courants de drain sont simulés dans les régimes de transport linéaire à  $V_d = 25\text{mV}$  ( $I_{lin}$ ) et de saturation à  $V_d = 1\text{V}$  ( $I_{on}$ ). Ces variations sont obtenues sur le dispositif de référence SINANO de 25nm (à gauche) et 32nm (à droite) de longueur de grille à des tensions de grille  $V_g - V_{th} = 1\text{V}$ . Les dispositifs sont simulés en fonction de deux directions de canal, <100> (bleu) et <110> (rouge). Les variations des courants sont légèrement sensibles à la longueur de grille du dispositif étudié ainsi qu'aux conditions de polarisation prises en compte (voir texte).

iii) La longueur de grille des nMOSFETs influence la variation des courants  $I_{on}$  sous contrainte. En parallèle d'une diminution de la longueur du dispositif, nous observons un léger affaiblissement de la variation des courants du nMOSFET sous certaines conditions de contrainte. Dans le cadre des canaux <110> sous contrainte tensile <100>, cette variation est de 3.185%.

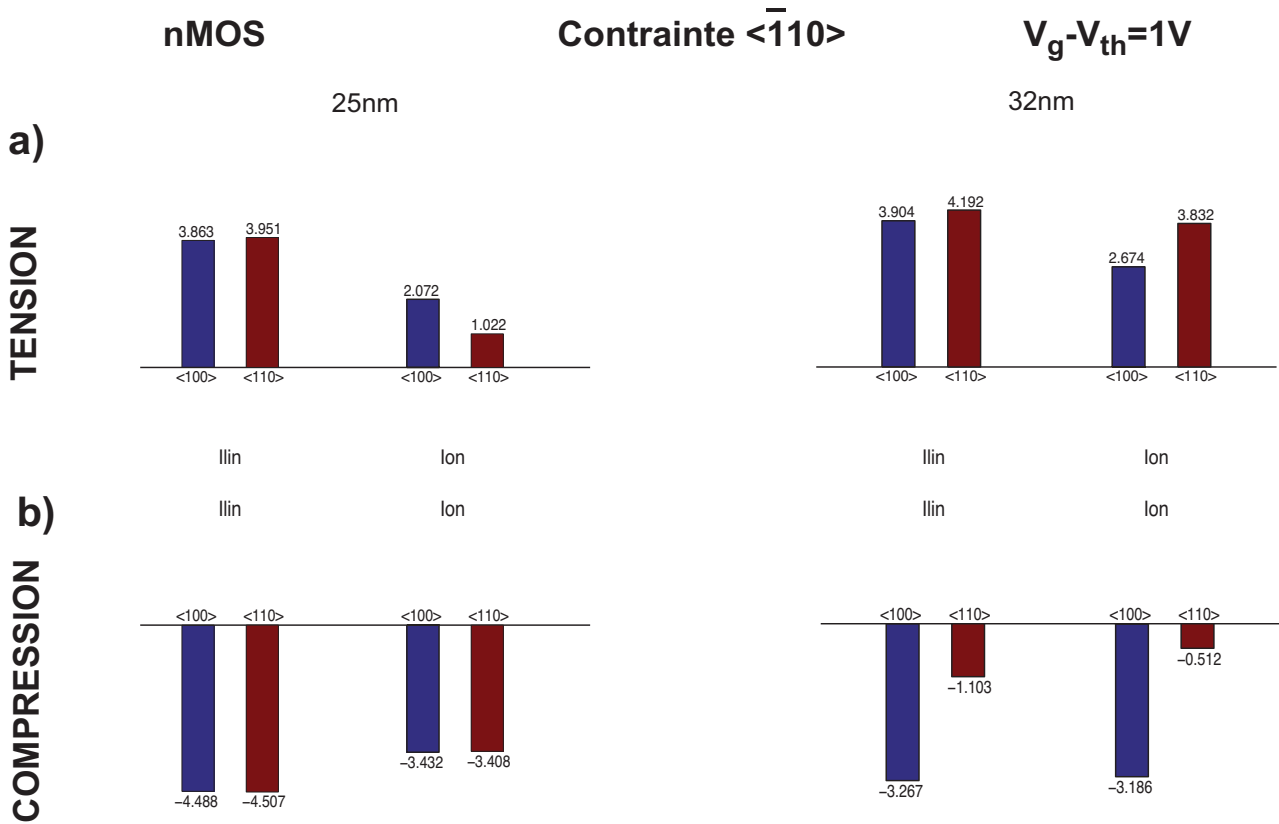
### III.3.2.2. Analyse des simulations dans le régime linéaire du transport

#### III.3.2.2.1. Canal orienté <110>

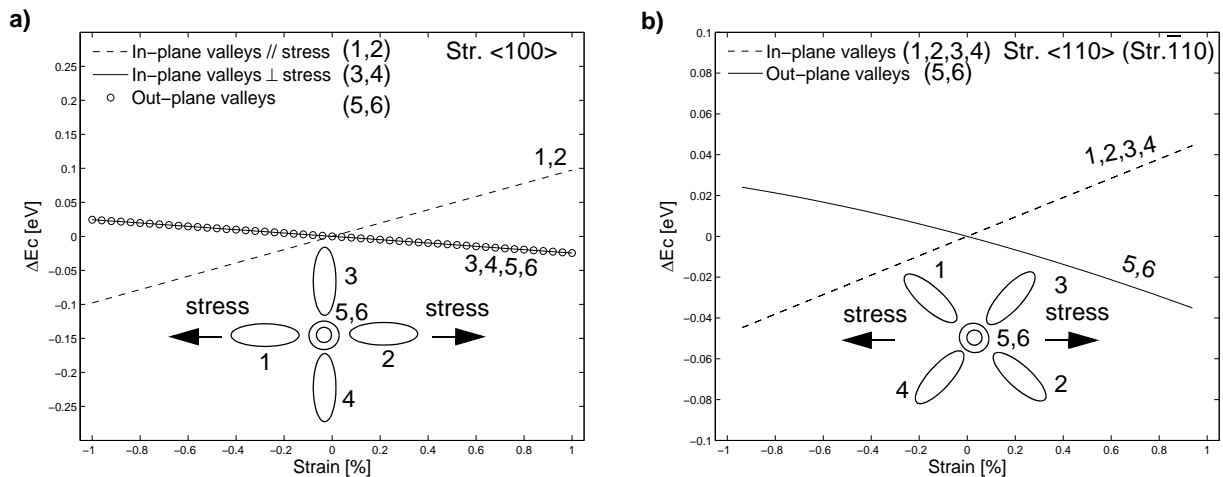
Dans le régime de transport linéaire, la distribution des porteurs de charge est considérée à l'équilibre et s'exprime en fonction de la distribution de Fermi-Dirac [16]. La distribution des porteurs de charge s'étend sur des régions proches des minima de bande où les niveaux énergétiques des vallées et les masses de courbure sont précisément connus. De l'Eq-III.6, le déplacement des extréma de bande et la variation des masses de conduction sous contrainte permettent d'expliquer le changement de courant dans le régime linéaire.

Dans le cas de la contrainte <100>, la variation du courant vient en grande partie du déplacement des extréma de bande. La Figure III.26 a) représente le déplacement des bandes de conduction en fonction de la contrainte. La contrainte provoque un décalage énergétique entre les vallées  $X$  parallèles à la contrainte (1, 2 dans le schéma) et les autres vallées. Les variations des masses effectives longitudinales  $m_l$  et transverses  $m_t$  des vallées dans le plan du transport ont été tracées pour cette contrainte en Figure III.27 a). Nous remarquons que les masses effectives sont presque

constantes en fonction de la contrainte<sup>16</sup>. Ceci est conforme aux conclusions émises dans la littérature [5][43][44].

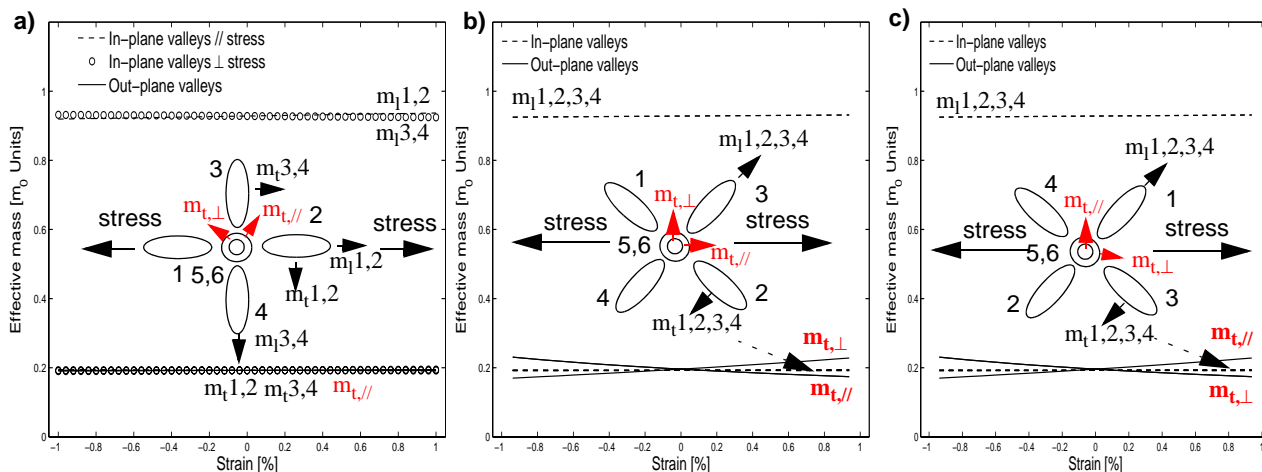


**Figure III.25:** Variations des courants de drain d'un nMOS en fonction de contraintes **a)** tensile et **b)** compressive selon la direction  $\langle 110 \rangle$  de 200 MPa en valeur absolue. Les courants de drain sont simulés dans les régimes de transport linéaire à  $V_d = 25\text{mV}$  ( $I_{lin}$ ) et de saturation à  $V_d = 1\text{V}$  ( $I_{on}$ ). Ces variations sont obtenues sur le dispositif de référence SINANO de 25nm (à gauche) et 32nm (à droite) de longueur de grille à des tensions de grille  $V_g - V_{th} = 1\text{V}$ . Les dispositifs sont simulés en fonction de deux directions de canal,  $\langle 100 \rangle$  (bleu) et  $\langle 110 \rangle$  (rouge). Les variations des courants sont légèrement sensibles à la longueur de grille du dispositif étudié ainsi qu'aux conditions de polarisation prises en compte (voir texte).



**Figure III.26:** Déplacement relatif  $\Delta E_c$  des bandes de conduction en fonction de la déformation pour des contraintes uniaxiales **a)**  $\langle 100 \rangle$  et **b)**  $\langle 110 \rangle$ . Les mêmes déplacements de vallées sont observés pour des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{110} \rangle$ . Les composantes du tenseur de déformation sont exprimées selon la direction de la contrainte.

<sup>16</sup>Rappelons que pour le Si non contraint, les masses longitudinale et transverse des vallées de conduction valent respectivement  $m_l = 0.91.m_0$  et  $m_t = 0.1916.m_0$ .



**Figure III.27:** Masses effectives longitudinales et transverses en fonction de la déformation occasionnée par des contraintes uniaxiales **a)**  $\langle 100 \rangle$ , **b)**  $\langle 110 \rangle$  et **c)**  $\langle 110 \rangle$ . Les masses effectives transverses des vallées hors-plan sont calculées perpendiculairement et longitudinalement à la direction  $\langle 110 \rangle$ . Les composantes des tenseurs de déformation sont exprimées selon la direction de la contrainte. Dans le cas de la contrainte  $\langle 100 \rangle$ , les masses sont presque constantes. Dans le cas des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , un changement des masses effectives transverses des vallées hors-plan est visible. Il est important de noter l'inversion de ces masses entre les directions de contrainte  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Ces variations de masse sont à l'origine des propriétés de transport sous ces deux contraintes (voir texte). Les calculs ont été réalisés à l'aide du **k.p** 30 bandes [52].

La variation du courant pour la contrainte  $\langle 100 \rangle$  n'est donc pratiquement liée qu'aux déplacements relatifs des vallées et à la réduction des taux d'interaction intervallée en fonction de la contrainte. Une variation des masses de densité d'états doit également être prise en compte dans le calcul des taux d'interaction [39] dans les propriétés de transport sous contrainte.

En ce qui concerne les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , le déplacement des extréma de bande ainsi que la variation des courbures de bande participe conjointement à la variation du courant. Nous avons tracé en Figure III.26 b), le déplacement des bandes de conduction pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$ . Pour ces contraintes, le décalage en énergie se produit entre les vallées Z (5, 6 dans le schéma) et les autres vallées. Nous avons le même déplacement relatif des bandes en fonction de la contrainte. L'origine de la disparité entre les variations de courant des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  n'est donc pas due au déplacement en énergie des bandes de conduction.

Les variations des masses effectives longitudinale  $m_l$  et transverse  $m_t$  des vallées dans le plan du transport dans le cas d'une contrainte  $\langle 110 \rangle$  sont tracées en Figure III.27 b) (et Figure III.27 c) pour une contrainte  $\langle \bar{1}10 \rangle$ ). De plus, nous avons calculé les variations des masses transverses effectives des vallées Z hors-plan de conduction, parallèle  $m_{t, \parallel}$  et perpendiculaire  $m_{t, \perp}$  à la direction du transport  $\langle 110 \rangle$ . Les masses effectives  $m_l$ ,  $m_t$  restent presque constantes en fonction de la contrainte. Ces masses des vallées dans le plan ne participent pas à la variation du courant sous contrainte. En revanche, les vallées Z hors-plan subissent de larges modifications dans leur forme par la composante de cisaillement de la contrainte (voir chapitre II). Par conséquent, les masses de courbure transverse  $m_{t, \parallel}$  et  $m_{t, \perp}$  de ces vallées sont modifiées en fonction de la contrainte de cisaillement<sup>17</sup>. Les variations de ces masses sous contrainte de cisaillement, issues des calculs de la méthode k.p 30 bandes [6], sont en bon accord avec les calculs de la littérature [43][44] (Pour une contrainte tensile de 1%, la masse parallèle au transport de la vallée Z a une valeur de  $0.1782 m_0$ , la variation relative est de 6.9%).

<sup>17</sup>voir également Section II.6.1. du chapitre II.



Finalement, lorsque les contraintes tensiles  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  sont appliquées, les porteurs de charge peuplent en priorité les deux vallées hors-plan. La différence dans les propriétés de transport sous contrainte  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  provient essentiellement de la modification des masses effectives des vallées  $Z$  en fonction de la contrainte de cisaillement. En effet, le déplacement des vallées hors-plan (5,6) est identique pour les deux types de contraintes de cisaillement  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , tandis que les variations des masses transverses sont opposées pour ces deux contraintes. Ainsi, une augmentation globale de la mobilité pour des contraintes tensiles est issue de la réduction des taux d'interaction intervallée<sup>18</sup>. La variation de la masse effective des électrons ajoute quant à elle une contribution positive ou négative à la variation de la mobilité, en accord avec l'Eq-III.6.

### III.3.2.2.2. Canal orienté $\langle 100 \rangle$

Nous expliquons dans ce paragraphe l'origine des variations de courants dans les nMOSFETs orientés  $\langle 100 \rangle$  via la description des structures de bandes sous contrainte.

En ce qui concerne la contrainte tensile  $\langle 100 \rangle$ , les vallées perpendiculaires au transport (3, 4, 5, 6) sont les plus basses en énergie (Figure III.26). Ces vallées ont donc une plus forte occupation de porteurs de charge. Remarquons que, dans cette configuration de contrainte, les masses influentes du transport dans la direction  $\langle 100 \rangle$  sont principalement les masses transverses  $m_t$  de faibles valeurs (Figure III.27). L'augmentation du courant est alors significative pour une contrainte tensile  $\langle 100 \rangle$ . Dans le cadre des contraintes compressives  $\langle 100 \rangle$ , les vallées (1, 2) dans le plan et le long de la direction du transport sont les plus peuplées. La forte occupation de ces vallées, associée avec une forte masse longitudinale  $m_l$ , engendre une diminution du transport [44]<sup>19</sup>.

En ce qui concernent les contraintes tensiles  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , celles-ci abaissent les vallées hors-plan (5, 6). Les porteurs sont redistribués dans ces vallées dont les masses de conduction sont faibles. Nous avons donc une augmentation de la mobilité. La masse transverse  $m_t$  dans les vallées hors-plan (5, 6) selon la direction  $\langle 100 \rangle$  dévie peu en fonction des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Cette masse est identique pour les deux cas de contrainte  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Ainsi, nous obtenons la même variation de courant pour ces deux orientations de contraintes.

### **III.3.2.3. Analyse des simulations dans le régime de saturation du transport**

Dans cette section, nous discutons de l'influence des effets de transport hors-équilibre thermodynamique sur les variations des courants sous contrainte des dispositifs nMOSFET. Comme décrit en Section III.2.3.2., ces effets apparaissent pour une variation spatiale rapide du champ électrique. Cette condition est réalisée dans le cadre d'un dispositif MOSFET dans le régime de saturation. Nous démontrons dans cette section que les effets non stationnaire et quasi-balistique contribuent considérablement dans la variation des courants des dispositifs courts contraints sous fort champ. Ces effets vont amoindrir les variations du courant sur des dispositifs contraints à canal ultra-court en régime de saturation (Ion), comparé au régime linéaire (Ilin).

<sup>18</sup>Remarquons qu'en compression, les énergies des deux paires de vallées  $X$  et  $Y$  diminuent, conduisant à la réduction de la mobilité [44]. Par leur abaissement, ces vallées ont, en effet, une augmentation de leur occupation par des électrons telle que la masse de conduction augmente.

<sup>19</sup>Pour des valeurs de contrainte plus élevées selon la direction  $\langle 100 \rangle$ , une asymétrie apparaît entre les valeurs de saturation des courants en fonction des contraintes compressives et tensiles pour une direction de transport  $\langle 100 \rangle$  [44]. Pour les contraintes compressives, la mobilité sature à une valeur plus élevée. Effectivement, dans le cas de contrainte compressive, les deux vallées le long de l'axe de conduction  $\langle 100 \rangle$  ont une énergie plus faible. Les taux d'interaction sont donc plus faibles que dans le cas des contraintes tensiles où quatre vallées participent aux interactions intervallées des électrons [44].

Afin de comprendre cette diminution, il est intéressant de reprendre les profils des vitesses de la Section III.2.3.2.. En effet, des études expérimentales ont laissé entendre qu'une corrélation existe entre la valeur de la vitesse côté source dans les régimes de saturation et la mobilité à faible champ [45].

La Figure III.17 de la Section III.2.3.2. montre que des effets de transport hors-équilibre sont donc déjà présents dans un MOSFETs de 90 nm. Pour  $V_d=1V$ , Les électrons expérimentent un champ électrique longitudinal supérieur à 30 kV/cm au bout de 4 nm dans le canal. La vitesse des porteurs de charge est alors dépendante de la région non-linéaire de la caractéristique champ-vitesse (ANNEXE III.B, Figure III.B.1 du Si massif). Or dans cette région, les effets de contrainte disparaissent à fort champ électrique.

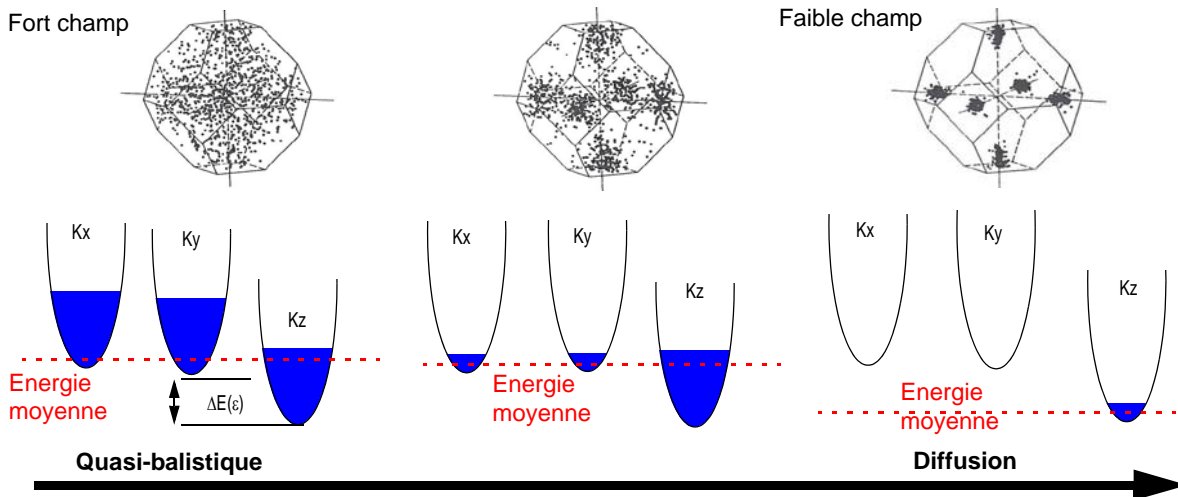
La variation des courants dans le régime de saturation, n'est donc pas liée à la caractéristique vitesse-mobilité des électrons dans le Silicium massif. En revanche, la variation persistante de courant s'explique par la non linéarité de la mobilité en fonction du champ électrique combinée aux effets de transport non linéaire et quasi-balistique. Des études Monte Carlo ont démontré que la valeur du courant Ion d'un MOSFET est directement reliée à la vitesse des porteurs de charge coté source du canal [15]. En effet, les phénomènes de transport hors-équilibre conduisent à une variation des pics de survitesse sous contrainte (voir ANNEXE III.B., Figure III.B.2 du Silicium massif). Ainsi, la variation de courant à  $V_d=1V$  persiste, bien qu'elle soit moindre en comparaison des simulations à  $V_d=25mV$ .

Ce sont ces mêmes considérations qui permettent d'expliquer la diminution de la variation du courant sous contrainte en fonction de la longueur de grille. Dans l'exemple de la contrainte tensile  $\langle 100 \rangle$  appliquée à un nMOS orienté selon  $\langle 100 \rangle$ , la diminution est de 3.19%. La diminution du courant sous contrainte liée à la réduction de longueur de grille est, par ailleurs, largement discutée dans la littérature (expériences: [26][41][46][47][48], simulations: [4][18]).

La diminution du dispositif s'accompagne d'une variation extrêmement rapide du champ électrique. L'électron atteint rapidement la vitesse de  $1.076 \cdot 10^7$  cm/s au bout de 10 nm (voir Figure III.18 b)). D'autre part, le pic de survitesse à  $1.26 \cdot 10^7$  cm/s se situe à 18 nm de la jonction source. Les effets de transport hors-équilibre sont particulièrement présents dans le dispositif de 25 nm. Ils se renforcent à mesure que les dimensions du dispositif diminuent.

La variation des courants sous contrainte dans les dispositifs les plus courts peut s'expliquer par les effets de transport hors-équilibre. La vitesse de dérive sous ces effets est fortement dépendante de la contrainte [4]. Comme montré en Figure III.B.2 de l'ANNEXE III.B, les pics de survitesse varient en fonction de la contrainte appliquée. La variation de courant observée dans les dispositifs les plus courts, tel que le dispositif 25 nm, est due à la combinaison des effets de transport stationnaire, non stationnaire et quasi-balistique. Nous avons donc une variation de courant qui persiste, bien qu'elle s'amenuise avec la réduction de la longueur de grille.

Par ailleurs, le gaz de porteurs de charge acquiert une forte énergie par les effets de transport hors-équilibre (voir Figure III.19). Les mécanismes de relaxation par interaction permettent une large redistribution des porteurs de charge dans la structure de bandes. Cette redistribution est "proche" de l'état du Silicium relaxé, où la répartition des porteurs de charge reste dans des proportions similaires dans chacune des paires de vallées. Par conséquent, les fréquences d'interaction mises en jeu sont les mêmes que dans le Silicium relaxé [19]. La Figure III.28 décrit schématiquement la redistribution des porteurs dans les vallées d'un matériau contraint. Les propriétés de transport sous contrainte à fort champ aboutissent à celles du Silicium relaxé. Ainsi, l'analyse sur les énergies nous permet de donner des éléments de compréhension sur la diminution de la variation du courant dans les régimes à fort champ.



**Figure III.28:** Schéma de la distribution des porteurs de charge dans les vallées de conduction du régime de diffusion au domaine quasi-balistique. L'énergie moyenne des porteurs de charge dépend du champ électrique auquel ils sont soumis. Ainsi, leur répartition s'homogénéise sur l'ensemble des bandes de conduction (en bleu dans les vallées 2D) dans le régime de transport quasi-balistique. La dispersion des électrons dans la structure de bandes 3D est tirée de [16] à partir de simulations Monte Carlo. Les porteurs de charge sont symbolisés par les points noirs.

En Figure III.20 et Figure III.21, une contrainte en tension de 200MPa est appliquée le long de la direction  $\langle 100 \rangle$  d'un MOSFET de 25 nm orienté  $\langle 100 \rangle$  dans le régime de saturation (la tension de grille est telle que  $v_g - v_{th} = 1$  V). L'impact de la contrainte est particulièrement notable sur la cartographie d'énergie (Figure III.20). Nous observons une forte diffusion des porteurs de charge dans la profondeur du canal. Ces caractéristiques sont associées à l'augmentation du courant de drain observée en Figure III.24 dans ces dispositifs contraints.

Notons qu'une récente publication [49] met en doute l'influence des effets quasi-balistiques sur l'augmentation du courant dans les dispositifs à canaux ultra-courts et contraints. Selon les auteurs, la vitesse de saturation continue d'influencer considérablement la nature du transport dans ces dispositifs. La variation du courant des dispositifs dans un régime de saturation proviendrait d'une dépendance de la vitesse de saturation  $v_{sat}$  en fonction de la contrainte.

### III.3.2.4. Remarques sur les simulations nMOSFETs sous contrainte

La dépendance du courant aux déformations des vallées Z sous contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  est difficilement vérifiable à partir des simulations Monte Carlo à base des structures de bandes des matériaux massifs 3D pour de faibles valeurs de contrainte. Dans le canal  $\langle 110 \rangle$ , les variations du courant nMOS obtenues par les simulations Monte Carlo sont extrêmement proches pour tous les cas de contrainte. Les variations de courant  $I_{lin}$  sont presque similaires pour les contraintes tensiles  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ : 4.910% et 3.951%, respectivement. En revanche, cette dépendance a été pleinement observée par K. Uchida et al. [43] en mesurant la variation de la mobilité dans des dispositifs sous confinement transverse au canal (appelés UTBFETs, Ultrathin-body FET). Les auteurs ont appliqué des contraintes parallèles et transverses au canal orienté  $\langle 110 \rangle$ . Tous les électrons peuplent alors les 2 vallées dégénérées les plus basses en énergie grâce au confinement quantique. Sous ces conditions, une décroissance de la mobilité est observée pour une contrainte  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Ceci est dû à l'augmentation de la masse transverse sous cette contrainte. L'anisotropie de ces vallées, liée aux contraintes de cisaillement, peut être directement évaluée, ainsi que la variation de la masse de courbure associée.

### III.4. Conclusion

La modélisation des MOSFETs à canaux ultra-courts nécessite la prise en compte des effets de transport hors-équilibre (non-stationnaire et quasi-balistique). Or, la prise en compte de ces effets dépasse le domaine de validité des modèles de Dérive-Diffusion, actuellement en usage dans l'industrie pour leur souplesse d'utilisation et leur efficacité. Ces modèles présentent des paramètres semi-empiriques pouvant être ajustés sur des données références dans la perspective d'estimer les courants de façon qualitativement et quantitativement correcte.

Les simulations Monte Carlo peuvent servir de référence dans la calibration des Modèles de Dérive-Diffusion, à condition qu'un consensus large existe dans les résultats des différents simulateurs. Dans l'étude préliminaire des dispositifs MOSFETs non contraints, les simulations Monte Carlo d'ensemble (MC++) et à flux incident (SPARTA) montrent des écarts entre elles sur l'estimation de la valeur absolue du courant des MOSFETs. Des différences sont, de même, observées dans l'évaluation des courants en fonction de la longueur de grille. Toutefois, nos études établissent que les simulations Monte Carlo présentent des solutions qualitativement correctes dans l'étude de variations de caractéristiques électriques des dispositifs à une longueur de grille donnée (à l'exemple de la variation du courant dans les pMOSFETs à canaux ultra-courts entre la direction de canal  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ ).

Par la suite, nous avons calculé la variation de courant de dispositifs nMOSFETs sous contraintes uniaxiales dans les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  à différentes longueurs de grille. Les courants ont été simulés dans les régimes de transport linéaire et de saturation des nMOSFETs. Les variations de courant obtenues sont conformes aux attentes basées sur les considérations physiques des structures de bandes. Par ailleurs, nous montrons que les effets de transport hors-équilibre sont à l'origine de la diminution de la variation du courant entre les régimes linéaire et de saturation. Ces mêmes effets sont aussi à l'origine de l'affaiblissement des variations de courant à mesure d'une réduction de la longueur de grille.

Les variations de mobilité sous contrainte dans des couches d'inversion de trous sont étudiées en chapitre IV par le biais de simulations de transport basées sur la formule de Kubo-Greenwood. Nous comparerons dans ce chapitre les solutions issues de simulations utilisant des structures de bandes 3D de matériaux massifs, mais également tenant compte des effets de confinement. Nous verrons que la conjonction des effets de contrainte et de confinement impacte significativement les solutions des simulations de transport dans les couches d'inversion de trous.

## Références

- [1] M. Feraille, D. Rideau, A. Ghetti, A. Poncet, C. Tavernier, and H. Jaouen, "Low-Field Mobility in Strained Silicon with 'Full' Band' Monte Carlo Simulation using k.p and EPM Band structure", *SISPAD 2006: Proceedings of the International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, pp. 264-266 2006.
- [2] F. M. Bufler, A. Schenk and W. Fichtner, "Efficient monte carlo device modeling", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.47, no.10, pp. 1891-1897 2000.
- [3] C. Jacoboni and L. Reggiani, "The monte-carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials", *Reviews of Modern Physics*, vol.55, no.3, pp. 645-705 1983.
- [4] F. M. Bufler, *Full-Band Monte Carlo Simulation of Nanoscale Strained-Silicon MOSFETS*, Series in Microelectronics, vol. 140, (Hartung-Gorre, 2003).
- [5] M. M. Rieger and P. Vogl, "Electronic-band parameters in strained Si(1-x)Ge(x) alloys on Si(1-y)Ge(y) substrates", *Physical Review B*, vol.48, no.19, pp. 14276-14287 1993.
- [6] D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini, M. Minondo, C. Tavernier, H. Jaouen and A. Ghetti, "Strained Si, Ge, and Si1-xGex alloys modeled with a first-principles-optimized full-zone k.p method", *Physical Review B*, vol.74, no.19, pp. 195208-195228 2006.
- [7] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys", *Journal of Applied Physics*, vol.80, no.4, pp. 2234-2252 1996.
- [8] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers", *Physical Review B*, vol.48, no.4, pp. 2244-2274 1993.
- [9] Projet Européen PULLING the limits of NANOCMOS electronics [PULLNANO]: Subproject 6 / Workpackage 6.1.
- [10] Résultats obtenus par A. Ghetti dans le cadre du projet européen PULLNANO [9].
- [11] C. Canali, C. Jacoboni, F. Nava, G. Ottaviani and A. Alberigi-Quaranta, "Electron drift velocity in silicon", *Physical Review B*, vol.12, no.4, pp. 2265-2284 1975.
- [12] G. Ottaviani, L. Reggiani, C. Canali, F. Nava and A. Alberigiquaranta, "Hole drift velocity in silicon", *Physical Review B*, vol.12, no.8, pp. 3318-3329 1975.
- [13] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase and H. Tango, "On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFETs .1. Effects of substrate impurity concentration", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.41, no.12, pp. 2357-2362 1994; S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase and H. Tango, "On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFETs .2. Effects of surface orientation", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.41, no.12, pp. 2363-2368 1994.
- [14] La structure de référence, conforme aux spécifications du projet européen SINANO, nous a été fourni lors d'échanges avec F. Bufler (SYNOPSIS).
- [15] F. M. Bufler, Y. Asahi, H. Yoshimura, C. Zechner, A. Schenk and W. Fichtner, "Monte carlo simulation and measurement of nanoscale n-MOSFETs", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.50, no.2, pp. 418-424 2003.
- [16] M. S. Lundstrom, *Fundamentals of carrier transport*, (Cambridge University Press, 2001).
- [17] D. Rideau, M. Feraille, A. Ghetti and C. Tavernier, *Deliverable D611*, Projet Européen PULLING the limits of NANOCMOS electronics [PULLNANO]: Subproject 6 / Workpackage 6.1 -TCAD Device Simulation.

- [18] C. Jungemann, N. Subba, J. S. Goo, C. Riecobene, Q. Xiang and B. Meinerzhagen, "Investigation of strained Si/SiGe devices by MC simulation", *Solid-State Electronics*, vol.48, no.8, pp. 1417-1422 2004.
- [19] E. Fuchs, *Etude Théorique et Expérimentale du Transport Electronique dans les dispositifs nanométriques sur Silicium*, Thèse de doctorat: Ecole Doctorale Physique, Spécialité Electronique, 2006.
- [20] K. Kells, *General Electrothermal Semiconductor Device Simulation*, Series in Microelectronics, vol. 37, (Hartung-Gorre, 1994).
- [21] C. Fiegna, M. Braccioli, S. C. Brugger, F. M. Bufler, P. Dollfus, V. Aubry-Fortuna, C. Jungemann, B. Meinerzhagen, P. Palestri, S. Galdin-Retailleau, E. Sangiorgi, A. Schenk and L. Selmi, "Comparison of monte carlo transport models for nanometer-size mosfets", *SISPAD 2007: Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2007*, pp. 57-60 2007.
- [22] A. Abramo, L. Baudry, R. Brunetti, R. Castagne, M. Charef, F. Dessenne, P. Dollfus, R. Dutton, W. L. Engl, R. Fauquembergue, C. Fiegna, M. V. Fischetti, S. Galdin, N. Goldsman, M. Hackel, C. Hamaguchi, K. Hess, K. Hennacy, P. Hesto, J. M. Higman, T. Iizuka, C. Jungemann, Y. Kamakura, H. Kosina, T. Kunikiyo, S. E. Laux, H. C. Lim, C. Maziar, H. Mizuno, H. J. Peifer, S. Ramaswamy, N. Sano, P. G. Scorbohaci, S. Selberherr, M. Takenaka, T. W. Tang, K. Taniguchi, J. L. Thobel, R. Thoma, K. Tomizawa, M. Tomipzawa, T. Vogelsang, S. L. Wang, X. L. Wang, C. S. Yao, P. D. Yoder and A. Yoshii, "A comparison of numerical-solutions of the Boltzmann transport-equation for high-energy electron-transport silicon", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.41, no.9, pp. 1646-1654 1994.
- [23] K. Huet, *Modélisation du transport sous contrainte mécanique dans les transistors sub-65nm*, Thèse de doctorat: Ecole Doctorale Technologie de l'Information des Télécommunication et des Systèmes, Paris XI, Orsay, 2007.
- [24] K. Chen, C. Hu, P. Fang, M. R. Lin and D. L. Wollesen, "Predicting CMOS Speed with Gate Oxide and Voltage Scaling and Interconnect Loading Effects", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.44, no.11, pp. 1951-1957 1997.
- [25] C. Lombardi, S. Manzini, A. Saporito and M. Vanzi, "A physically based mobility model for numerical-simulation of nonplanar devices", *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol.7, no.11, pp. 1164-1171 1988.
- [26] C. Ortolland, *Etudes des effets des contraintes mécaniques induites par les procédés de fabrication sur le comportement électrique des transistors CMOS des noeuds technologiques 65 nm et en deçà*, Thèse de doctorat: Institut national des Sciences Appliquées de Lyon, 2006.
- [27] S. Saito, D. Hisamoto, Y. Kimura, Sugii, R. Tsuchiya, K. Tori and S. Kimura, "Origin of Drivability Enhancement in Scaled pMOSFETs with 45° Rotated <100> channels", *VLSI 2006: Symposium of the 19<sup>th</sup> international Conference on Very Large Scale Integration Technology*, Technical Digest, pp.150-151 2006.
- [28] F. Gilibert, *Modélisation des contraintes dans les dispositifs Si/SiGe basée sur l'analyse des structures de bandes*, Thèse de doctorat: Université de Provence, Ecole Doctorale Physique Modélisation et Sciences pour l'Ingénieur, 2005.
- [29] C. Canali, G. Majni, R. Minder and G. Ottaviani, "Electron and hole drift velocity-measurements in silicon and their empirical relation to electric-field and temperature", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.22, no.11, pp. 1045-1047 1975.
- [30] C. Canali, G. Ottaviani and A. Alberigi Quaranta, "Drift velocity of electrons and holes and associated anisotropic effects in silicon", *Journal of physics and Chemistry of solids*, vol. 32, no. 8, pp.1707-1720 1971.
- [31] H. Irie, K. Kita, K. Kyuno and A. Toriumi, "In-plane mobility anisotropy and universality under uni-axial strains in n- and p-MOS inversion layers on (100), (110), and (111) Si", *IEEE International Electron Devices Meeting 2004*, Technical Digest, pp. 225-228 2004.

- [32] X. F. Fan, L. F. Register, B. Winstead, M. C. Foisy, W. Q. Chen, X. Zheng, B. Ghosh and S. K. Banerjee, "Hole mobility and thermal velocity enhancement for uniaxial stress in Si up to 4 GPa", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.54, no.2, pp. 291-296 2007.
- [33] J. Saint-Martin, *Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultra-courts à grille multiple sur SOI*, Thèse de doctorat: spécialité électronique, Université Paris-Sud, Orsay, 2005.
- [34] X. Li, W. WU, G. Gildenblat, G.D.J. Smit, A.J. Scholten, D.B.M. Klaassen, R. van Langevelde, *PSP 102.3*, Arizona State University and NXP Semiconductors research, 2008.
- [35] J. H. Sim, "An analytical deep-submicron mos device model considering velocity overshoot behavior using energy-balance equation", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.42, no.5, pp. 864-869 1995.
- [36] L. X. Ge, J. G. Fossum and B. Liu, "Physical compact modeling and analysis of velocity overshoot in extremely scaled CMOS devices and circuits", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.48, no.9, pp. 2074-2080 2001.
- [37] H. Wang and G. Gildenblat, "Scattering matrix based compact MOSFET model", *International Electron Devices 2002 Meeting, Technical Digest*, pp. 125-128 2002.
- [38] M. S. Shur, "Low ballistic mobility in submicron HEMTs", *IEEE Electron Device Letters*, vol.23, no.9, pp. 511-513 2002.
- [39] S. E. Thompson, G. Y. Sun, Y. S. Choi and T. Nishida, "Uniaxial-process-induced strained-si: Extending the CMOS roadmap", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.53, no.5, pp. 1010-1020 2006.
- [40] F. M. Bufler and W. Fichtner, "Scaling of strained-si n-MOSFETs into the ballistic regime and associated anisotropic effects", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.50, no.2, pp. 278-284 2003.
- [41] K. Rim, S. Koester, M. Hargrove, J. Chu, P. M. Mooney, J. Ott, T. Kanarsky, P. Ronsheim, M. Jeong, A. Grill and H. S. P. Wong, "Strained siNMOSFETs for high performance CMOS technology", *2001 Symposium on VLSI Technology, Digest of Technical Papers*, pp. 59-60 2001.
- [42] N. Arora, *MOSFET Models for VLSI Circuit Simulation - Theory and Practice*, (Springer-Verlag, Wien, 1993).
- [43] K. Uchida, T. Krishnamohan, K. C. Saraswat and Y. Nishi, "Physical mechanisms of electron mobility enhancement in uniaxial stressed mosfets and impact of uniaxial stress engineering in ballistic regime", *IEEE International Electron Devices Meeting 2005, Technical Digest*, pp. 135-138 2005.
- [44] E. Ungersboeck, S. Dhar, G. Karlowatz, V. Sverdlov, H. Kosina and S. Selberherr, "The effect of general strain on the band structure and electron mobility of silicon", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.54, no.9, pp. 2183-2190 2007.
- [45] A. Lochtefeld and D. A. Antoniadis, "Investigating the relationship between electron mobility and velocity in deeply scaled nMOS via mechanical stress", *IEEE Electron Device Letters*, vol.22, no.12, pp. 591-593 2001.
- [46] F. Payet, *Modélisation et Intégration de Transistors à Canal de Silicium contraint pour les noeuds Technologiques CMOS 45nm et en deçà*, Thèse de doctorat: Ecole Doctorale Physique, Physique et Modélisation des Systèmes Complexes: Micro et Nanoélectronique, 2005.
- [47] F. Lime, F. Andrieu, J. Derix, G. Ghibaudo, F. Boeuf and T. Skotnicki, "Low temperature characterization of effective mobility in uniaxially and biaxially strained nmosfets", *Solid-State Electronics*, vol.50, no.4, pp. 644-649 2006.
- [48] J. S. Goo, Q. Xiang, Y. Takamura, H. H. Wang, J. Pan, F. Arasnia, E. N. Paton, P. Besser, M. V. Sidorov, E. Adem, A. Lochtefeld, G. Braithwaite, M. T. Currie, R. Hammond, M. T. Bulsara and M. R. Lin, "Scalability of strained-si nMOSFETs down to 25 nm gate length", *IEEE Electron Device Letters*, vol.24, no.5, pp. 351-353 2003.

- [49] D. Fleury, G. Bidal, A. Cros, F. Boeuf, T. Skotnicki and G. Ghibaudo, "New Experimental Insight into Ballisticity of Transport in Strained Bulk MOSFETs", 2009 Symposium on VLSI Technology, Digest of Technical Papers, accepté à la publication 2009.
- [50] G. Masetti, M. Severi and S. Solmi, "Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-doped, phosphorus-doped, and boron-doped silicon", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.30, no.7, pp. 764-769 1983.
- [51] H. Matthieu, "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques", Dunod, 5ème édition, 2001.

## **Simulateurs utilisés**

- [52] UTOX: D. Rideau, M. Feraille, M. Michailat, Y. M. Niquet, C. Tavernier and H. Jaouen, "*On the Validity of the effective mass approximation and the Luttinger  $k.p$  model in fully depleted SOI MOSFETs*", Solid-State Electronics, vol.53, no.4, pp.452-46 2008.
- [53] SPARTA, Sentaurus Device Monte Carlo, release 2007.03, TCAD Sentaurus, SYNOPSYS, 2007.
- [54] Sdevice, Sentaurus Device, release 2007.03, TCAD Sentaurus, SYNOPSYS, 2007.
- [55] MC++: A. Ghetti and D. Rideau, "3D Monte Carlo Device Simulation of NanoWire MOSFETs including Quantum Mechanical and Strain Effects", SISPAD 2006: Proceedings of the International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, pp. 67-70 2006.





# **CHAPITRE IV: Transport dans les systèmes confinés**



## **CHAPITRE IV: TRANSPORT DANS LES SYSTÈMES CONFINÉS**

### **IV.1. Introduction**

La réduction des dimensions des dispositifs s'accompagne d'une augmentation du champ électrique transverse au canal lié à la polarisation de grille. Par ailleurs, de nouvelles architectures apparaissent dans la conception des dispositifs avec notamment l'intégration de substrat non-conventionnel dans la fabrication des dispositifs MOSFETs (*Silicon On Insulator SOI*, *Silicon on Nothing SON*, ...)[1]. Les caractéristiques de ces dispositifs provoquent le confinement du gaz de porteurs de charge dans le canal. Les structures de bandes des matériaux confinés en sont profondément modifiées en comparaison de celles des matériaux massifs. Par conséquent, les propriétés de transport de ces systèmes confinés s'en trouvent également changées.

Ce chapitre répond aux objectifs suivants:

- Calculs de structures de bandes dans les systèmes confinés.
- Etude de la corrélation entre les effets de confinement et de contrainte dans le calculs des structures de bandes.
- Discussion sur le degré de précision des différents niveaux de modélisation de structures de bandes dans les systèmes confinés et contraints.
- Calculs des propriétés de transport dans les systèmes confinés et contraints.
- Etude de la corrélation entre les effets de contraintes et de confinement dans les propriétés de transport de couches d'inversion.

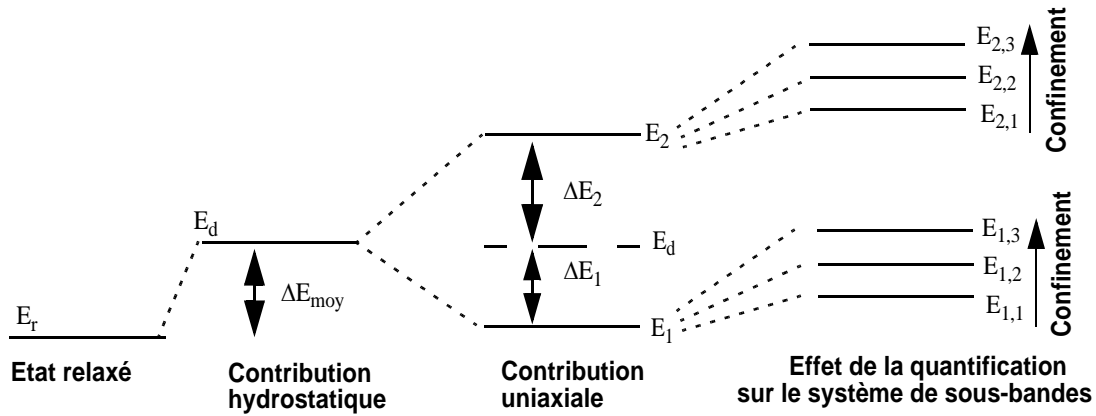
Ce chapitre est sectionné en quatre principales parties. La première partie introduit le confinement dans les calculs de structures de bandes par les modèles  $k.p$  EFA et approximation de la masse effective (Section IV.2.). La seconde partie montre des structures de bandes calculées dans le cadre d'un dispositif MOSFET Fully Depleted (FD) SOI non contraint (Section IV.3.). La troisième partie est dédiée aux résultats du même dispositif dont les effets de contraintes biaxiales ou uniaxiales ont été ajoutés (Section IV.4.). La quatrième partie concerne l'étude de l'impact de la contrainte dans les propriétés de transport stationnaire dans une couche d'inversion (Section IV.6.). Pour cette dernière étude, nous utilisons un simulateur basé sur la formule de transport de Kubo-Greenwood. Nous verrons que selon les directions de contrainte, les propriétés de transport dans les systèmes confinés peuvent énormément différer de celles des matériaux massifs.

### **IV.2. Introduction du confinement dans le calcul de structures de bandes.**

La présence d'un potentiel électrique à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, ou encore, d'hétérostructure SiO<sub>2</sub>/Si/SiO<sub>2</sub> dans les dispositifs MOSFETs SOI provoque un confinement des porteurs de charge. En effet, l'introduction d'un potentiel électrique externe, en supplément du champ cristallin, brise l'invariance par translation de l'énergie potentielle perçue par les porteurs de charge<sup>1</sup>. Le confinement apparaît lorsque l'épaisseur de la couche Si dans l'hétérostructure, ou bien la distance entre la barrière de potentiel de l'oxyde et le potentiel extérieur, est inférieure à la longueur de Broglie associée aux

<sup>1</sup>La symétrie dans une cellule élémentaire d'un matériau massif sans champ électrique est fixée par le champ cristallin des noyaux atomiques du cristal. Par ailleurs, l'invariance par translation dans le réseau cristallin, introduite dans le calcul de structures de bandes, mène à la description des états électroniques sous forme de fonctions d'onde de Bloch (voir chapitre II).

porteurs de charge. Sous ces conditions, la structure de bandes n'est plus un continuum de niveaux d'énergie, comme dans le cas du matériau massif (voir chapitre II). Les niveaux d'énergie accessibles aux porteurs sont quantifiés par la composante de vecteur d'onde dans la direction de confinement (voir Figure IV.1). Par ailleurs, la zone de Brillouin en 3 dimensions, sur laquelle est décrite la structure de bandes des matériaux massifs, passe en 2 dimensions dans le cadre des systèmes confinés.

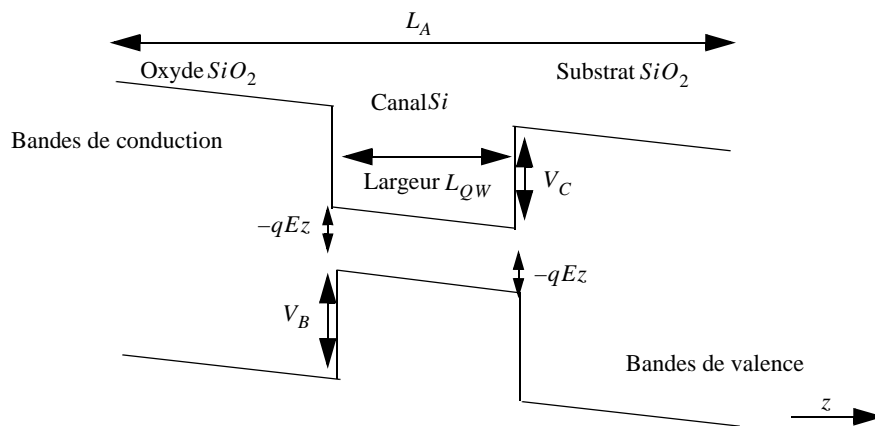


**Figure IV.1:** Représentation schématique de l'effet des contraintes et du confinement sur la structure de bandes. Le confinement provoque une quantification des niveaux d'énergie en sous-bandes.

L'objectif de cette section est de calculer ces niveaux d'énergie quantifiés, les *sous-bandes*, à la fois dans les systèmes relaxés et contraints. Par ailleurs, les fonctions d'onde du système ne peuvent plus être développées sous forme de fonctions de Bloch des matériaux massifs. Des approximations sur les fonctions d'onde sont donc nécessaires. Dans cette section, nous détaillons l'approximation de la fonction enveloppe de Luttinger-Kohn.

### IV.2.1. Potentiel de confinement

Dans les calculs de structures de bandes présentés dans cette chapitre, nous tenons compte de potentiels externes de confinement et la présence d'hétérostructures dans les systèmes étudiés, comme illustrés en Figure IV.2. Dans un premier temps, nous n'investiguons que l'application d'un champ constant, des calculs auto-cohérents seront présentés par la suite (Section IV.6.3.).



**Figure IV.2:** Représentation schématique d'un canal (de Si), de largeur  $L_{QW}$ , encastré dans de l'isolant ( $SiO_2$ ). La largeur totale du dispositif est de  $L_A$ . Les énergies des barrières de potentiel dans les bandes de valence et de conduction sont respectivement  $V_B$  et  $V_C$ . Le champ électrique transverse  $\vec{E}(z)$  constant impose des variations de potentiel en fonction de la distance:  $V(z) = -q|\vec{E}|z$ .

### IV.2.1.1. Hétérostructure

Dans des dispositifs MOSFETs FD SOI, la couche de Silicium formant le canal est insérée entre l'oxyde de grille et l'oxyde du substrat, constituant une hétérostructure  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$ . Dans cette structure, l'état électronique est confiné par les barrières de potentiel à l'interface  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ . Le confinement est modélisé par l'approximation du matériau unique. Dans le cadre de cette approximation, une énergie potentielle supplémentaire positive (négative) est ajoutée aux bandes de conduction (bandes de valence) d'une valeur de  $v_c = 3 \text{ eV}$  ( $v_B = -4 \text{ eV}$ ) qui imite les barrières de potentiel à l'interface  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ <sup>2</sup>:

$$V_{ox}(z) = \begin{cases} v_c & (-L_{QW}/2 < z < L_{QW}/2) \\ 0 & (\text{autrement}) \end{cases} \quad \text{Eq-IV.1}$$

$L_{QW}$  correspond à la largeur de la couche active de Si.

### IV.2.1.2. Champ électrique constant

Sous l'approximation d'un champ électrique constant  $\vec{E}$  dans le matériau étudié selon la direction transverse au canal  $z$ , l'énergie potentielle associée varie avec la distance selon l'expression suivante:

$$V(z) = -q|\vec{E}|z \quad \text{Eq-IV.2}$$

## IV.2.2. Approximation de la fonction enveloppe Luttinger-Kohn

Les fonctions d'onde du système confiné ne correspondent plus aux fonctions d'onde du matériau massif. Dans ce chapitre nous utilisons l'approximation de la fonction enveloppe (*Envelope Function Approximation*, EFA) de Luttinger-Kohn [2]. En préambule, notons que la structure de bandes du système confiné est maintenant décrite sur une zone de Brillouin 2D. Les énergies et les fonctions d'ondes accessibles par les porteurs de charge sont décrites sur la base des vecteurs d'onde  $\vec{k}_\perp = k_x\vec{x} + k_y\vec{y}$  et des vecteurs positions  $\vec{r} = \vec{r}_\perp + \vec{z}$ . Les vecteurs du réseau réciproque sont décrites par  $\vec{G}_\perp = G_x\vec{x} + G_y\vec{y}$ .

Les valeurs propres électroniques  $\psi$  des gaz 2D de porteurs de charge satisfont l'équation de Schrödinger:

$$[H_0 + V_{ox}(z) + V(z)]\psi = E\psi \quad \text{Eq-IV.3}$$

où  $H_0$  est l'Hamiltonien multibandes des semi-conducteurs massifs (voir chapitre II),  $v$  l'énergie associée au potentiel externe appliqué au système et  $v_{ox}$  est l'énergie associée au potentiel confinant de l'oxyde.

Une première résolution de l'équation Eq-IV.3 sur la base des fonctions d'onde de Bloch a été proposé par Luttinger et al. [6] et a été largement étudié par Esseni et al. [7] selon la méthode LCBB (*linear combination of bulk band*). La fonction d'onde inconnue du système est décrite par une combinaison linéaire des fonctions de Bloch  $u_{i,\vec{k}}(\vec{r})$  en tout point  $\vec{k}$  de la première zone de Brillouin 3D du matériau massif:

$$\psi(\vec{r}_\perp, z) = \sum_{l, (k_z, k_\perp)} C_n^l \exp(i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp) \exp(i\vec{k}_z \cdot \vec{z}) u_{l,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{Eq-IV.4}$$

<sup>2</sup>Dans le cadre de cette approximation, les paramètres du modèle  $\mathbf{k}, \mathbf{p}$  sont indépendants de la position. Ceci simplifie l'arrangement des opérateurs [3][4][5], et par exemple l'opérateur Ben-Daniel-Duke  $1/2(k_z\gamma(z) + \gamma(z)k_z)$  qui se réduit à  $k_z\gamma(z)$ .

Les fonctions  $u_{l,k}(\vec{r})$  étant périodiques dans l'espace réel, elles peuvent être développées au moyen des séries de Fourier avec les composantes de Fourier  $B_{lk_{\perp}k_z}$  :

$$u_{l,k}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_A(k_z, k_{\perp})}} \sum_{lk_{\perp}k_z} B_{lk_{\perp}k_z}(\vec{G}_{\perp}, \vec{G}_z) \exp(i\vec{G}_{\perp} \cdot \vec{r}_{\perp}) \exp(iG_z \cdot z) \quad \text{Eq-IV.5}$$

L'utilisation de la méthode de calcul de structure de bandes EPM dans l'estimation des énergies relatives aux fonctions de Bloch ( $\langle u_{l,k} | H_0 | u_{l,k} \rangle$ ) et des composantes de Fourier  $B_{lk_{\perp}k_z}$  permet la résolution de l'équation aux valeurs propres.

Dans ce travail nous avons adoptée l'approche de l'approximation de la fonction enveloppe de Luttinger-Kohn [6][8], les états électroniques des gaz 2D de porteurs de charge sont développés en termes de fonctions d'onde de Bloch centrées en  $\Gamma$ ,  $u_{l,\Gamma}(r)$ . La fonction enveloppe  $F_l(z)$  est supposée varier lentement le long de l'axe de quantification  $z$ :

$$\psi(r_{\perp}, z) = \sum_{l,k_{\perp}} F_l(z) \exp(ik_{\perp} \cdot r_{\perp}) u_{l,\Gamma}(\vec{r}) \quad \text{Eq-IV.6}$$

Le nombre de fonctions de Bloch  $N_B$  (indexé par  $i$ ) considéré dans les calculs dépend du modèle utilisé pour décrire le semi-conducteur massif. Les fonctions périodiques  $u_{l,\Gamma}(r)$  sont supposées identiques dans le puit quantique et dans la barrière de potentiel d'oxyde [9].

Comme noté par Foreman [10], les fonctions enveloppes  $F_l(z)$  sont des "fonctions quasicontinues" qui doivent être *strictement* limitées aux vecteurs d'onde dans la première zone de Brillouin. Cette contrainte est imposée afin d'établir une unique relation entre la théorie de la fonction enveloppe et la théorie microscopique  $\mathbf{k.p}$  30 bandes duquel il est dérivé [7][10]. Pour cette raison, les transformations dans l'espace réel  $k_z \rightarrow -i \frac{d}{dz}$  (menant à un ensemble d'équations différentielles locales [11]) font apparaître des termes non nuls de composants de Fourier de la fonction enveloppe  $F_l(k)$  en dehors de la Première Zone de Brillouin (PZB). Ceci génère des erreurs dans l'énergie cinétique [10].

En pratique, il est mal aisé de résoudre l'équation de Schrödinger multibandes dans l'espace réel car de nombreuses solutions erronées (dites *spurious*) sont engendrées lorsque les vecteurs d'onde ne sont pas limités à la PZB. Ces solutions sont associées au manque d'ellipticité de l'équation enveloppe [12]. En revanche, ceci n'est pas une limitation fondamentale lorsque la méthode  $\mathbf{k.p}$  est développée dans l'espace réciproque. Cette description permet de développer les fonctions  $F_l(z)$  sur la base tronquée des vecteurs limités dans la première zone de Brillouin 3D (voir Eq-IV.6):

$$F_l(z) = \sum_n \phi_n(z) C_n^l \quad \text{Eq-IV.7}$$

Où  $C_n^l$  sont les coefficients de développement.  $N$  correspond au nombre de fonctions trigonométriques pris en compte.

Dans ce travail, nous utilisons les fonctions trigonométriques [13][14]:

$$\phi_n(z) = \frac{\sqrt{2} \cdot \exp(ik_{ez}z)}{\sqrt{L_A}} \sin\left(\frac{n\pi z}{L_A}\right) \quad \text{Eq-IV.8}$$

où  $k_{ez}$  peut être centré au minimum d'une vallée où les porteurs peuvent être confinés [14] (par exemple,  $k_{ez} = 0,85(2\pi/a)$  pour les électrons  $\Delta_z$ ). La longueur  $L_A$  inclut l'oxyde de chaque côté de la couche de Si, elle est donc plus grande que  $L_{QW}$ . Sa valeur dépend du nombre de fonctions trigonométriques  $\phi_n(z)$  utilisées dans les calculs. Comme discuté en détail en [7], le développement de l'équation Eq-IV.7 devrait être effectué sur un volume de la première zone de Brillouin, tel que  $n\pi/L_A \leq 2\pi/a$  pour tout  $n \leq N$ , tel que  $L_A = Na/2$ . Les fonctions trigonométriques sont similaires aux fonctions d'onde d'une particule dans un puit quantique de barrière de potentiel infinie de largeur  $L_A^3$ . Ces fonctions s'annulent en  $z = 0$  et  $z = L_A$  [15]. De fait, la fonction enveloppe (déterminée sur l'intervalle  $[0, L_A]$ ) s'annule également  $F_l(0) = F_l(L_A) = 0$ .

Dans le cadre de l'approximation du matériau unique et de l'utilisation de la base des fonctions trigonométriques, l'équation Eq-IV.3 peut se développer telle que<sup>4</sup>:

$$\sum_{n,i} \{ \langle \phi_n | H_{i,j} | \phi_m \rangle - E_{k\perp} \delta_{nm} \delta_{ij} + \langle \phi_n | V_{ox}(z) | \phi_m \rangle \delta_{ij} + \langle \phi_n | V(z) | \phi_m \rangle \delta_{ij} \} C_n^i = 0 \quad \text{Eq-IV.9}$$

où  $H_{i,j} = \langle u_{i,0} | H_{k,p} | u_{j,0} \rangle$  est l'Hamiltonien de la méthode  $k,p$  dans un matériau massif. Les index  $i, j$  appartiennent à l'intervalle  $[1, N_B]$  dans le modèle  $k,p$ . Les index  $n, m$  appartiennent à l'intervalle  $[1, N]$ .

Sous l'approximation du matériau unique, tous les éléments de matrice sont indépendants de la position dans la structure et peuvent donc être factorisés. Le premier terme de l'équation Eq-IV.9 s'écrit comme suit:

$$H_{i,j} = -A_{i,j} \cdot \langle \phi_n | (d^2/dz^2) | \phi_m \rangle - iB_{i,j} \cdot \langle \phi_n | (d/dz) | \phi_m \rangle + C_{i,j} \cdot \delta_{nm} \quad \text{Eq-IV.10}$$

où les matrices  $A_{i,j}$ ,  $B_{i,j}$  et  $C_{i,j}$  sont obtenues de l'Hamiltonien  $k,p$  des matériaux massifs (chapitre II), exprimé sous la forme [17]:

$$H_{i,j} = -A_{i,j} \cdot k_z^2 - iB_{i,j} \cdot k_z + C_{i,j} \quad \text{Eq-IV.11}$$

Les produits scalaires de l'équation Eq-IV.10, calculés à  $k_{ez} = 0 [2\pi/a]$ , ont les expressions analytiques suivantes:

$$\langle \phi_n | (d^2/d^2z) | \phi_m \rangle = \left( \frac{n\pi}{L_A} \right)^2 \cdot \delta_{nm} \quad \text{Eq-IV.12}$$

$$\langle \phi_n | (d/dz) | \phi_m \rangle = \frac{2\pi}{L_A} \begin{cases} \frac{1}{(n+m)} & (a) \\ -\frac{1}{(n-m)} & (b) \\ \frac{1}{(n+m)} - \frac{1}{(n-m)} & (c) \end{cases} \quad \text{Eq-IV.13}$$

Ce dernier produit dépend de la parité de  $n+m$  et  $n-m$ . Il a une valeur non nulle si (a)  $n+m$  est impaire, (b)  $n-m$  est impaire et (c)  $n+m$  et  $n-m$  sont impaires. Les derniers termes de l'Eq-IV.9 sont respectivement les transformées de Fourier du potentiel d'oxyde  $V_{ox}(z)$  et du potentiel externe  $V(z)$ .

L'équation Eq-IV.9 est bien adaptée à l'implémentation dans un simulateur de dispositif. En effet, elle peut être couplée avec l'équation de Poisson. Par ailleurs, tous les termes de matrice ont une expression analytique (Eq-IV.10, Eq-IV.12 et Eq-IV.13), et à chaque cycle d'auto-cohérence, seule la transformée de Fourier a besoin d'être traitée numériquement. Les énergies des sous-bandes et les fonctions d'onde, nécessaires au calcul de la densité des porteurs de charge, sont définies par les valeurs propres et les fonctions propres des matrices  $N_B N \times N_B N$ . En général, cette équation doit être résolue en plusieurs itérations, typiquement sur un maillage dense de points  $k$  centrés aux extréma des sous-bandes dans l'espace réciproque [18]. Le temps de calcul de résolution des valeurs propres dépend du nombre de bandes  $N_B$  considéré dans le modèle  $k,p$  d'un matériau massif, mais aussi du nombre de fonctions trigonométriques  $N$  utilisé dans le calcul.

Nous résolvons l'équation Eq-IV.9 en utilisant trois différents modèles de calcul de structures de bandes. Toutes les simulations ont été réalisées avec le simulateur  $k,p$ -Poisson-Schrödinger UTOX développé à STMicroelectronics durant ma thèse [57]:

<sup>3</sup>. Rappelons que l'énergie dans un puit quantique de barrière de potentiel infinie de largeur  $L_A$  vaut:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \frac{n^2}{(L_A)^2}$$

où  $m^*$  est la masse effective de courbure dans la direction du confinement.



(i) Le modèle d'approximation de la masse effective (*Effective Mass Approximation*, EMA):

Le modèle à une bande ( $N_B = 1$ ) dépend de la masse de quantification  $m_z$ . Dans le cas d'un confinement selon la direction  $z$  ( $\langle 001 \rangle$ ), nous avons utilisé pour les électrons  $m_z = m_l = 0,916$  pour la vallée  $Z$ , et la masse  $m_z = m_t = 0,1905$  pour les vallées  $X, Y$ . Toutes les masses reportées dans ce travail sont exprimées en unité de la masse de l'électron libre  $m_0$ . Pour la même condition de confinement, nous avons utilisé les masses de confinement suivantes pour les bandes de valence ( $m_{hh} = 0,2772$ ,  $m_{lh} = 0,2015$ ,  $m_{so} = 0,2334$ ). Dans le cas des directions de confinement  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ , les masses de confinement suivantes ont été respectivement prises en compte ( $m_{hh} = 0,5689$ ,  $m_{lh} = 0,1468$ ,  $m_{so} = 0,2334$ ) et ( $m_{hh} = 0,7179$ ,  $m_{lh} = 0,1393$ ,  $m_{so} = 0,2334$ ). Le déplacement des bandes dû au confinement est calculé à partir de l'équation de Schrödinger usuelle.

(ii) Le modèle  $k.p$  Dresselhaus-Kip-Kittel:

L'Hamiltonien du  $k.p$  6 bandes [19] des trous dépend des paramètres de Luttinger déterminés par l'expérience ( $\gamma_1 = 4,285$ ,  $\gamma_2 = 0,339$  et  $\gamma_3 = 1,446$ ), et de trois potentiels de déformation de Bir et Pikus [20] ( $a_v = 2 \text{ eV}$ ,  $b_v = -2,1 \text{ eV}$  et  $d_v = -4,85 \text{ eV}$ )<sup>5</sup>.

(iii) Le modèle  $k.p$  30 bandes:

Par opposition aux deux précédents modèles, le modèle  $k.p$  30 bandes optimisé à partir des calculs *ab initio* (voir chapitre II) décrit la structure de bandes (bandes de conduction et de valence) sur l'intégralité de la première zone de Brillouin. Les valeurs des paramètres de Luttinger ( $\gamma_1 = 4,338$ ,  $\gamma_2 = 0,3468$  et  $\gamma_3 = 1,4451$ ), les masses effectives de courbure aux minima des vallées  $\Delta$  ( $m_l = 0,928$ ,  $m_t = 0,192$ ) et les potentiels de déformations sont issus du modèle  $k.p$  30 bandes. Ces valeurs sont proches des données expérimentales. La comparaison du modèle  $k.p$  30 bandes avec les modèles précédents est donc cohérente puisque les valeurs des données expérimentales sont celles utilisées dans les modèles précédents.

<sup>4</sup>Notons qu'après le développement de l'équation Eq-IV.3, le terme associé au potentiel extérieur est de la forme suivante:

$$\langle \psi_n | V(z) | \psi_m \rangle = \sum_{i,j} C_n^i \langle \phi_n(z) | V(z) | \phi_m(z) \rangle u_{i,\Gamma}^*(r) u_{j,\Gamma}(r)$$

où  $u_{i,\Gamma}(r) u_{j,\Gamma}(r)$ , étant périodique, peut être développé en série de Fourier, comme [6]:

$$u_{i,\Gamma}^*(r) u_{j,\Gamma}(r) = \sum_{G_z} B_{G_z}^{ij} \exp(-iG_z \cdot r)$$

où  $G_z$  est un vecteur du réseau réciproque.

En tenant compte de l'expression précédente, et après quelques manipulations mathématiques et simplifications [7], l'expression  $\langle \psi_n(r_\perp, z) | V(z) | \psi_m \rangle$  peut se séparer en deux termes:

$$\langle \psi_n(r_\perp, z) | V(z) | \psi_m(r_\perp, z) \rangle = \sum_i C_n^i \langle \phi_n(z) | V(z) | \phi_m(z) \rangle \delta_{ij} + \sum_i C_n^i \sum_{\substack{B \\ G_z \neq 0}}^{ij} \langle \phi_n(r_\perp, z) | V(z) | \phi_{n+G_z}(r_\perp, z) \rangle$$

Le premier terme correspond à  $G_z = 0$ , le second correspond aux  $G_z \neq 0$ .

Finalement, nous faisons l'approximation du 'gentle' potentiel de la Réf. [6]. Sous cette supposition, seul le premier terme de l'expression précédente est conservé dans l'expression Eq-IV.9. Toutefois, l'utilisation de la méthode LCBB [16] nous a permis de mesurer l'impact des termes négligés en fonction du confinement. Nous avons constaté que le terme devient non négligeable à mesure que la couche confinée diminue. Des couplages supplémentaires apparaissent entre les bandes. Ainsi, l'approximation du 'gentle' potentiel n'est plus valide pour des conditions ultimes de confinement.

### IV.2.3. Précision des résultats et temps de calcul

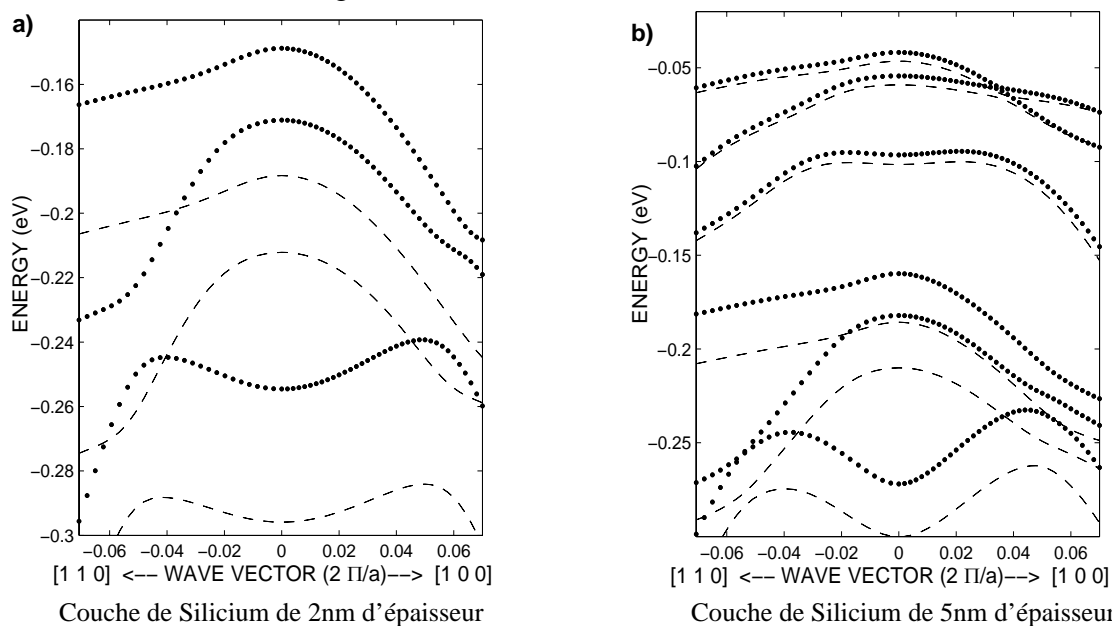
Les résultats de ce chapitre ont été obtenus avec un nombre suffisamment large de fonctions trigonométriques pour une précision satisfaisante des résultats de l'équation Eq-IV.9. La précision des calculs dépend du modèle  $k.p$  (6 bandes ou 30 bandes) et de l'épaisseur de la couche de Si. Une convergence rapide et satisfaisante (par exemple, pour une erreur  $< 0,1\%$ ) peut être obtenue avec un nombre relativement faible de fonctions trigonométriques ( $N \approx 50 - 100$ ). Pour cette raison, il est généralement plus efficace de résoudre l'équation de la fonction enveloppe dans l'espace réciproque que dans l'espace réel. La fonction enveloppe dans le cadre de la méthode  $k.p$  appliquée aux systèmes 2D se révèle même être efficace en comparaison d'autres méthodes (LCBB [7] et TB [21]). Typiquement sur un opteron de 2GHz, le modèle UTOX  $k.p$  30 bandes nécessite un peu moins d'une minute pour calculer une relation de dispersion de 50 points.

## IV.3. Structures de bandes dans un FD MOSFET non contraint

### IV.3.1. pMOSFETs

#### IV.3.1.1. Relation de dispersion des sous-bandes

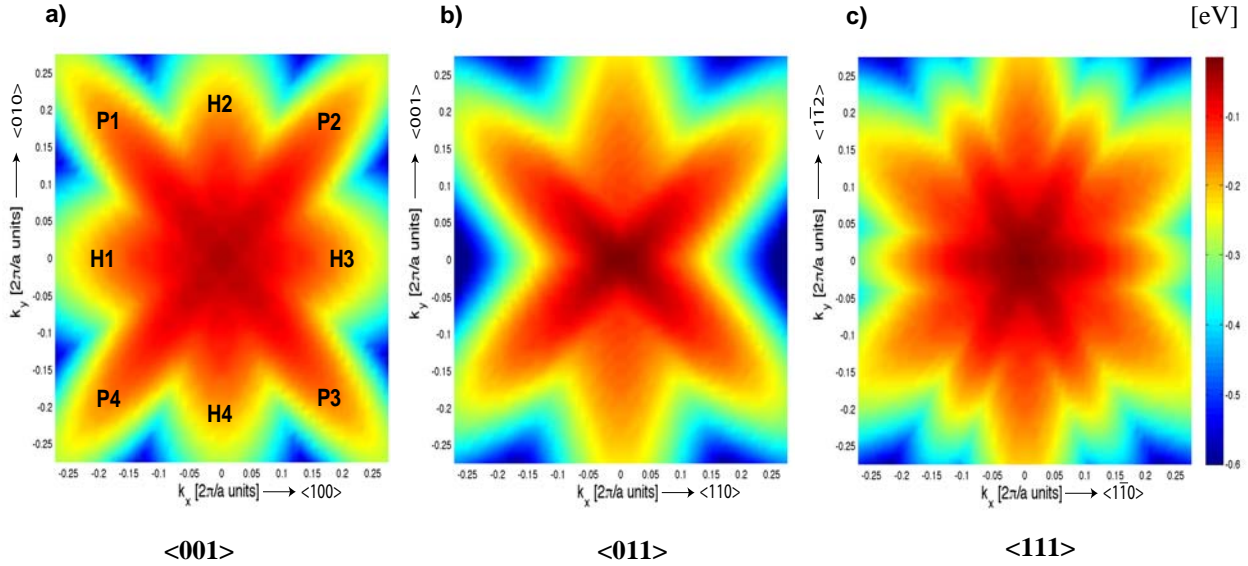
La Figure IV.3 montre nos résultats dans le cadre des sous-bandes de valence dans des structures dont les couches de Si ont une épaisseur de 2 nm et 5 nm d'épaisseur. Dans ces structures, la couche de Si encastrée dans l'oxyde est orientée selon la direction  $\langle 001 \rangle$ . Les relations de dispersion des plus hautes sous-bandes sont profondément non paraboliques selon les directions  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Les tirets se réfèrent au modèle  $k.p$  6 bandes, tandis que les calculs du modèle  $k.p$  30 bandes sont représentés en pointillés. Les deux modèles montrent des résultats comparables, bien que les énergies calculées par le modèle  $k.p$  6 bandes présentent des déplacements de bande plus importants dans les basses énergies (voir Section IV.3.1.2.).



**Figure IV.3:** Relations de dispersion des sous-bandes de valence dans le plan, le long des directions  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ , dans une couche de Si orientée  $\langle 001 \rangle$  selon deux épaisseurs, **a)** 2nm et **b)** 5nm, encastrée dans de l'oxyde: modèles  $k.p$  30 bandes (pointillés) et  $k.p$  6 bandes (tirets). Le champ électrique confinant est nul ( $|E| = 0$  MV/cm).

<sup>5</sup>La définition de ces potentiels est développée en ANNEXE II.B du chapitre II.

L'utilisation des matrices de rotation (voir ANNEXE II.A) sur les vecteurs d'onde, initialement exprimés dans le système SCC, permet d'étudier l'influence de l'orientation du confinement dans les calculs des sous-bandes. Nous montrons en Figure IV.4 les énergies de la première sous-bande d'une couche confinée de Si de 5 nm d'épaisseur orientée selon différentes directions de confinement. Par ailleurs, il est important de souligner que les branches hors-plan H1...H4 des structures de bandes 3D sont maintenant projetées dans la zone de Brillouin 2D. Pour la direction de confinement  $\langle 001 \rangle$ , ces branches sont visibles dans les directions  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 010 \rangle$  et en  $\Gamma$ . Elles ont la particularité d'être fortement couplées au champ électrique [22]<sup>6</sup>.



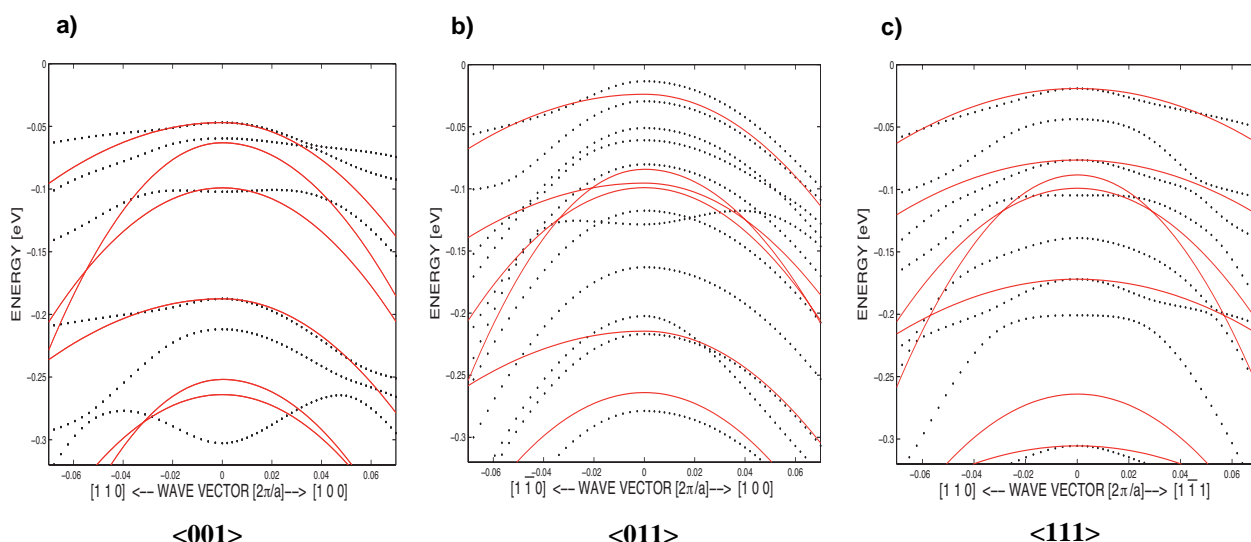
**Figure IV.4:** Énergies de la première sous-bande d'une couche de Si de 5 nm d'épaisseur encadrée dans de l'oxyde pour différentes directions de confinement **a)**  $\langle 001 \rangle$ , **b)**  $\langle 011 \rangle$  et **c)**  $\langle 111 \rangle$ . Le code couleur est associé à une échelle d'énergies dont l'origine correspond à l'énergie de la bande de valence hh des matériaux massifs en  $\Gamma$ .

Les relations de dispersion des premières sous-bandes de valence des modèles EMA et  $k.p$  6 bandes EFA sont comparées en Figure IV.5 dans une couche de Si de 5 nm d'épaisseur pour différentes directions de confinement. Alors que la première sous-bande est équivalente dans les calculs des deux modèles pour un confinement  $\langle 100 \rangle$ , ce n'est plus le cas pour les autres directions de confinement. Alors que les extréma des bandes hh et so restent découplés pour un confinement selon  $\langle 001 \rangle$ , des couplages supplémentaires entre hh et les autres sous-bandes apparaissent pour les autres directions de confinement.

### IV.3.1.2. Déplacement des sous-bandes en fonction du confinement

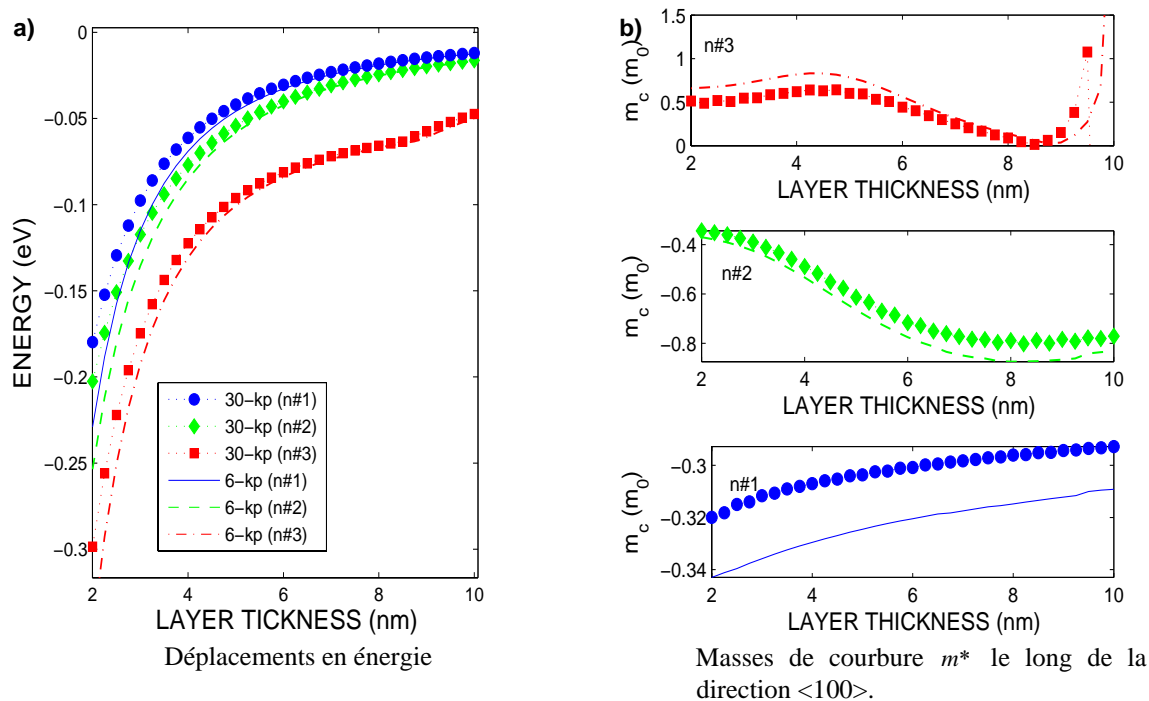
La Figure IV.6 a) présente les déplacements en énergie des trois plus hautes bandes de valence en fonction de l'épaisseur de la couche de Si. Une comparaison est donnée entre le modèle  $k.p$  6 bandes et le modèle  $k.p$  30 bandes. Bien que les prédictions des modèles  $k.p$  6 bandes se superposent aux résultats du modèle 30 bandes pour la structure la plus épaisse, il est clair qu'il surestime le déplacement en énergie dans les dispositifs les plus minces. Ces résultats ne peuvent être déduits des faibles différences dans les masses de confinement ( $\approx 1\%$ ). En effet, les différences en énergie entre les modèles de calcul 6 bandes et 30 bandes dans les structures les plus minces suggèreraient une plus grande différence dans les masses de confinement  $m_Q$ . Par exemple, pour la sous-bande la plus haute en énergie ( $m_Q = 1/(\gamma_1 - 2\gamma_2) = 0,2772$ ) avec les paramètres de Luttinger

<sup>6</sup> La redistribution des porteurs de charge dans ces branches, liée au champ électrique, participe à la variation de la mobilité sous champ électrique et sous contrainte [22][23][24][25][26]. Cependant, cette redistribution n'est pas l'unique moteur du changement de la mobilité. Le décalage des bandes, dû au confinement quantique, influence nettement la mobilité par les effets de transport et la variation des taux d'interaction qui lui sont associés [27].



**Figure IV.5:** Relations de dispersion des premières sous-bandes de valence pour différentes directions de confinement **a)**  $\langle 001 \rangle$ , **b)**  $\langle 011 \rangle$  et **c)**  $\langle 111 \rangle$  dans une couche de Si confinée de 5 nm d'épaisseur. Les relations de dispersion sont tracées selon les directions transverses au confinement. Modèles EMA (lignes continues) et  $k.p$  6 bande (pointillés).

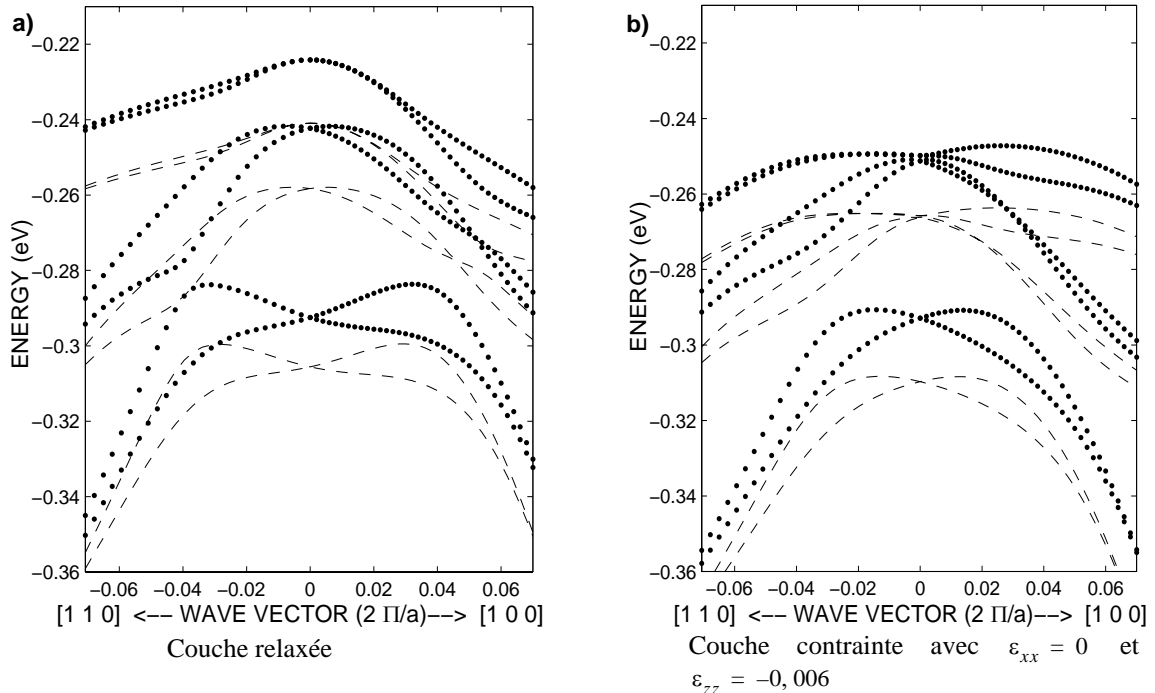
expérimentaux ( $m_Q = 0,2744$  avec ceux du modèle  $k.p$  30 bandes), alors que la masse de confinement extraite du déplacement en énergie calculé par le modèle  $k.p$  30 bandes est  $m_Q = 0,385$ . Ce comportement de la Figure IV.6 peut même être plus conséquent dans le cas des matériaux dont le gap est faible, comme le Ge [28]. La surestimation du modèle  $k.p$  6 bandes dans le déplacement en énergie des sous-bandes dans les dispositifs les plus minces est également visible en Figures IV.3 a) et b). Ceci est une conséquence directe du mélange des bandes de conduction et de valence dans les systèmes de confinement. Les différences en énergie entre les prédictions du modèle à 6 bandes et celles du modèle à 30 bandes doivent provenir du fait que, dans le premier modèle, l'influence des bandes manquantes n'est pas prise en compte dans les calculs [3][8][29].



**Figure IV.6:** **a)** Déplacement des plus hautes bandes de valence en fonction de l'épaisseur de couche de Si confinée. **b)** Masses associées le long de la direction  $\langle 100 \rangle$ ; Modèles  $k.p$  6 bandes (tirets) et  $k.p$  30 bandes (symboles).

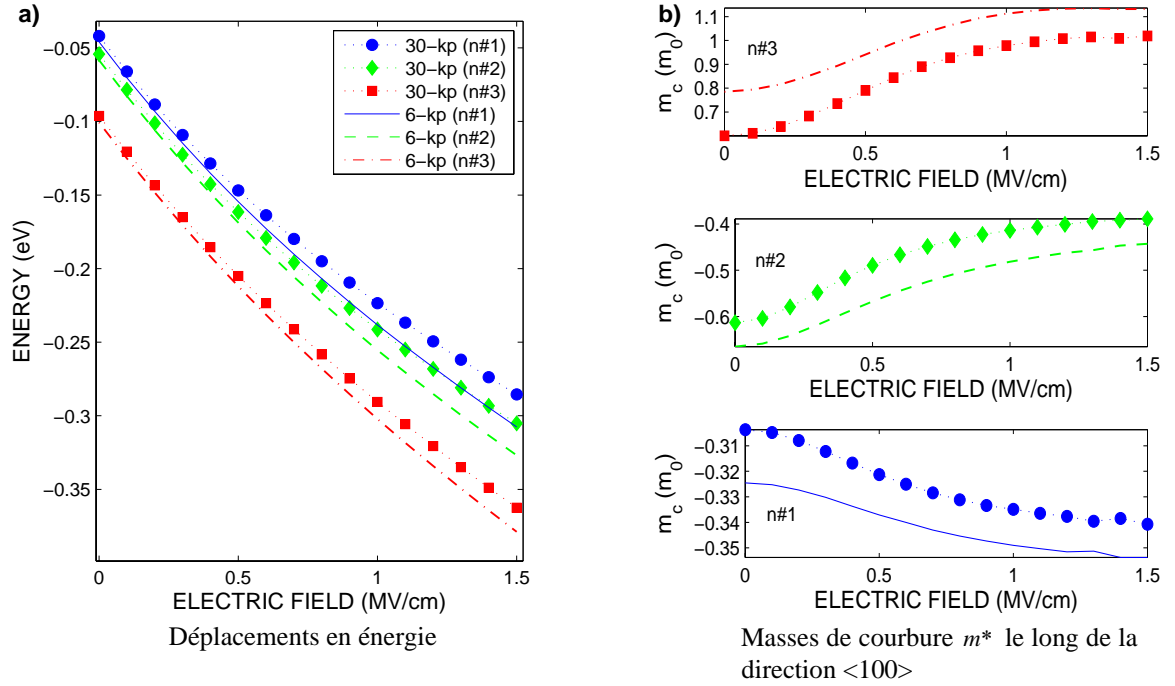
Bien que le modèle  $k.p$  6 bandes surestime le déplacement en énergie, la structure générale des sous-bandes (Figure IV.3) reste similaire à celle du modèle 30 bandes. Afin d'illustrer ce point, nous avons calculé, avec chaque modèle, la masse de courbure le long de la direction  $\langle 100 \rangle$  en  $\Gamma$  qui implique la dérivée seconde de la relation de dispersion. En Figure IV.6 b), nous pouvons voir que les masses de courbure des trois premières bandes dépendent de l'épaisseur de la couche de Si et peuvent changer significativement. Cela a déjà été reporté, par exemple, pour le puit quantique InGaAs/GaAs [4]. Il apparaît que le modèle 6  $k.p$  bandes reproduit le changement de courbure, même pour les petites structures. Par exemple, dans une couche confinée de 5 nm d'épaisseur, les masses de courbure des trous lourds, trous légers et trous de spin-orbite sont ( $m_{hh} = -0,322$ ,  $m_{lh} = -0,662$ ,  $m_{lh} = 0,735$ ) et ( $m_{hh} = -0,303$ ,  $m_{lh} = -0,616$ ,  $m_{lh} = 0,567$ ) en utilisant respectivement les méthodes  $k.p$  30 bandes et 6 bandes.

Les effets d'un champ électrique constant additionnel (puit triangulaire) dans un dispositif FD SOI MOSFET de 5 nm d'épaisseur orienté  $\langle 001 \rangle$  sont également étudiés. Les relations de dispersion des sous-bandes sont montrées en Figure IV.7 a). Les énergies des sous-bandes sous contrainte sont également montrées en Figure IV.7 b) (voir Section IV.4.2.1.). Aussi, il peut y être remarqué qu'un décalage des bandes en fonction du spin existe. En effet, le champ électrique brise l'inversion de symétrie dans les réseaux de zinc-blende. En raison des couplages entre sous-bandes, les états avec différents spin ne sont plus équivalents.



**Figure IV.7:** Relations de dispersion des sous-bandes de valence dans le plan, le long des directions  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ , dans une couche de Si orientée  $\langle 001 \rangle$  de 5 nm d'épaisseur, **a)** relaxée et **b)** contrainte, encadrée dans de l'oxyde avec un champ électrique de 1MV/cm; Modèles  $k.p$  30 bandes (pointillés) et  $k.p$  6 bandes (tirets).

Les déplacements des bandes de valence en fonction du champ électrique ont été reportés en Figure IV.8 a). Les valeurs des masses de courbure en  $\Gamma$  en fonction du champ électrique sont reportées en Figure IV.8 b). De façon similaire aux résultats obtenus précédemment, le modèle  $k.p$  6 bandes surestime légèrement les déplacements des bandes mais modélise correctement les variations de masse de courbure pour des valeurs de champ comprises entre  $|\vec{E}| = 0$  MV/cm et  $|\vec{E}| = 1,5$  MV/cm.



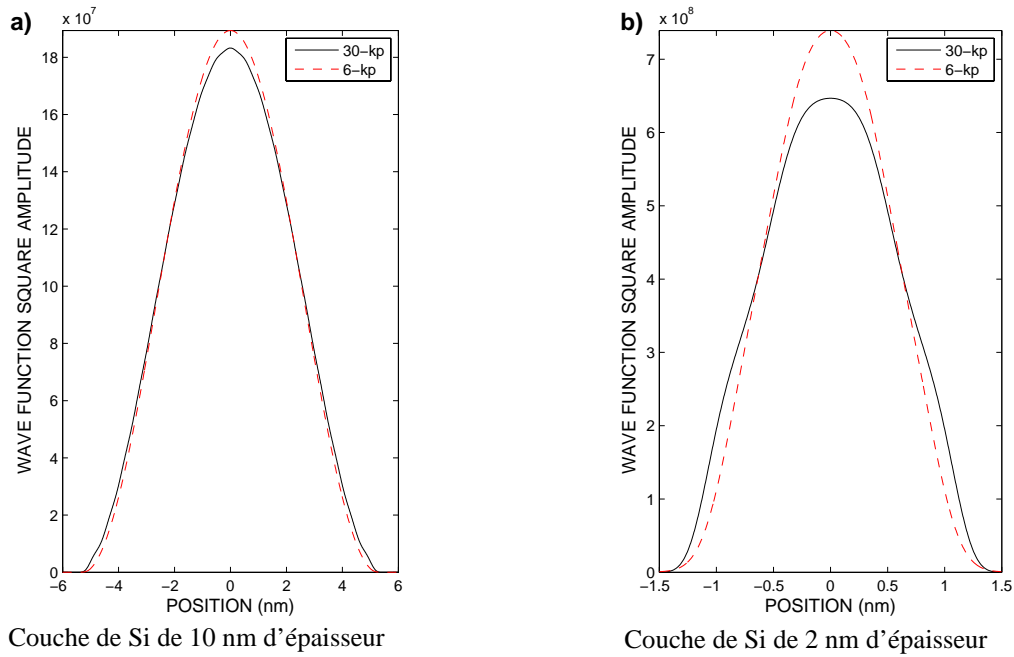
**Figure IV.8:** a) Déplacement des bandes BVs au point  $\Gamma$  en fonction du champ électrique appliqué dans une couche de Si confinée de 5nm d'épaisseur orientée  $\langle 001 \rangle$  et b) masses associées le long de la direction  $\langle 100 \rangle$ ; Modèles  $k.p$  6 bandes (tirets) et  $k.p$  30 bandes (symboles).

Il est intéressant de noter que l'accord global entre les modèles dépend de l'épaisseur de la couche confinée et du champ électrique appliqué. Pour des systèmes faiblement confinés, l'écart entre les modèles  $k.p$  6 bandes et 30 bandes disparaît. Il est particulièrement intéressant d'observer le déplacement de la bande hh en  $\Gamma$ . Le déplacement des bandes calculé avec la méthode EMA en utilisant la masse de confinement,  $m_z = 1/(\gamma_1 - \gamma_2)$ , se superpose exactement aux prédictions du modèle  $k.p$  6 bandes. En effet, dans ce modèle, le confinement dans la direction  $z$  laisse les bandes hh découplées en  $\Gamma$ , ce qui n'est pas le cas des bandes lh et so (voir Section IV.3.1.1.).

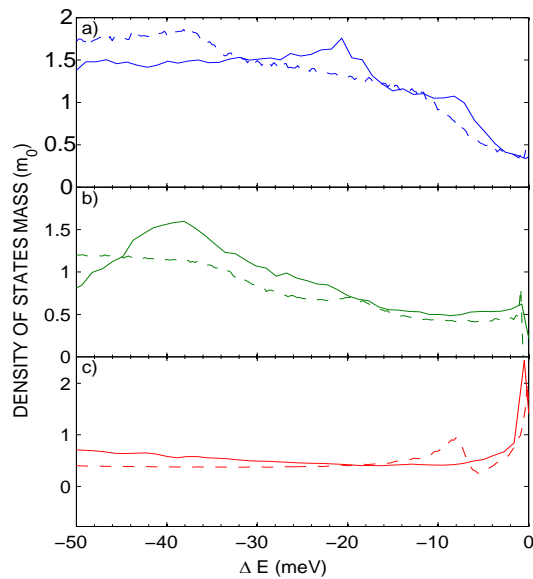
### IV.3.1.3. Fonctions d'onde et densités d'états

En Figure IV.9, les amplitudes des fonctions d'onde au carré pour les plus hautes bandes en  $\Gamma$  sont montrées pour les deux modèles  $k.p$  des couches de Si de 2 nm et 10 nm d'épaisseur. La fonction d'onde obtenue avec le modèle 30 bandes pénètre plus dans la région d'oxyde que celle obtenue par le modèle 6 bandes (ceci est particulièrement notable dans la couche de 2 nm d'épaisseur). Ce résultat est cohérent avec les déplacements d'énergie en Figure IV.6, qui sont plus faibles pour le modèle 30 bandes. Nous remarquons que pour les raisons mentionnées précédemment, les résultats obtenus avec le  $k.p$  6 bandes correspondent à ceux du modèle EMA.

Nous avons calculé la densité d'états 2D et les masses effectives DOS associées. Nos résultats, obtenus avec le modèle  $k.p$  30 bandes, sont montrés en Figure IV.10. en fonction de l'énergie avec et sans champ électrique. Comme reporté dans la littérature [30], les masses effectives DOS montrent de fortes déviations par rapport à la fonction marche, et plusieurs pics peuvent apparaître aux minima des sous-bandes. En effet, la densité d'états ne dépend pas seulement des énergies de bandes mais aussi de son gradient en fonction du vecteur d'onde. De plus, la masse de densité d'états peut aussi dépendre du champ électrique. Ceci est une conséquence directe de la variation des relations de dispersion montrées en Figure IV.3 b) (sans champ) et Figure IV.7 b) (avec champ  $|\vec{E}| = 1 \text{ MV/cm}$ ).



**Figure IV.9:** Somme de l'amplitude au carré des fonctions d'onde des bandes de valence en  $\Gamma$  dans des couches de Si de **a)** 10nm et **b)** 2nm d'épaisseur encadrées dans de l'oxyde. Modèles **k.p** 6 bandes (tirets ) et **k.p** 30 bandes (lignes).



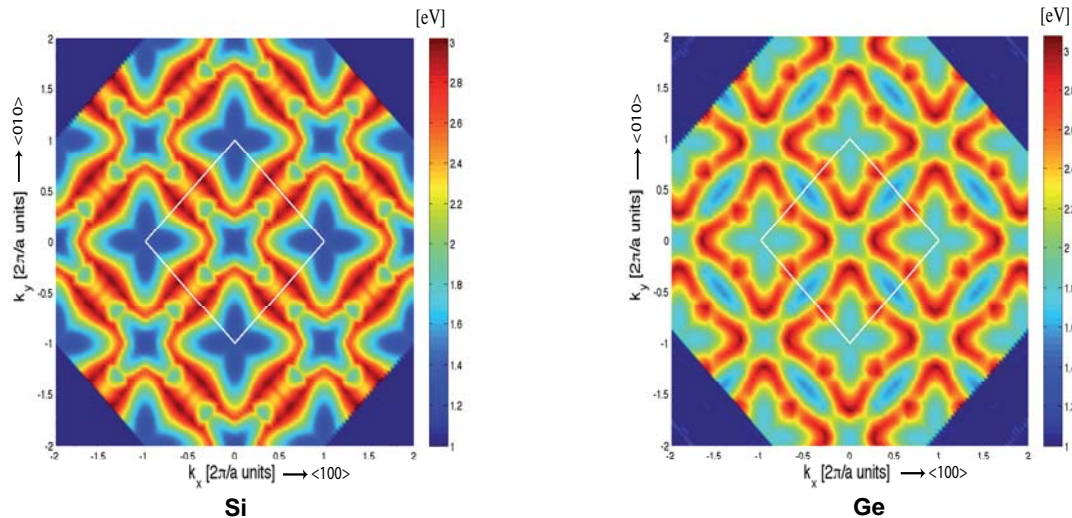
**Figure IV.10:** Masses de densité d'états en fonction de l'énergie en utilisant le modèle **k.p** 30 bandes avec (tirets) et sans (lignes) champ électrique (1MV/cm): bandes **a)** hh, **b)** lh et **c)** so. L'origine des énergies  $\Delta E$  est calculée du déplacement des bandes au point  $\Gamma$ .

## IV.3.2. nMOSFETs

### IV.3.2.1. Relation de dispersion des sous-bandes

Nous montrons en Figure IV.11 a) (et Figure IV.11 b)) les énergies de la première sous-bande en fonction des vecteurs d'onde dans le plan transverse à la direction de confinement  $\langle 001 \rangle$  d'une couche confinée de Si (et de Ge) de 5 nm d'épaisseur. Le carré blanc indique la première zone de Brillouin. Remarquons que le modèle **k.p** n'est pas périodique sur l'ensemble de l'espace réciproque [31]<sup>7</sup>. La périodicité est obtenue à l'aide d'une translation de la structure en dehors de la

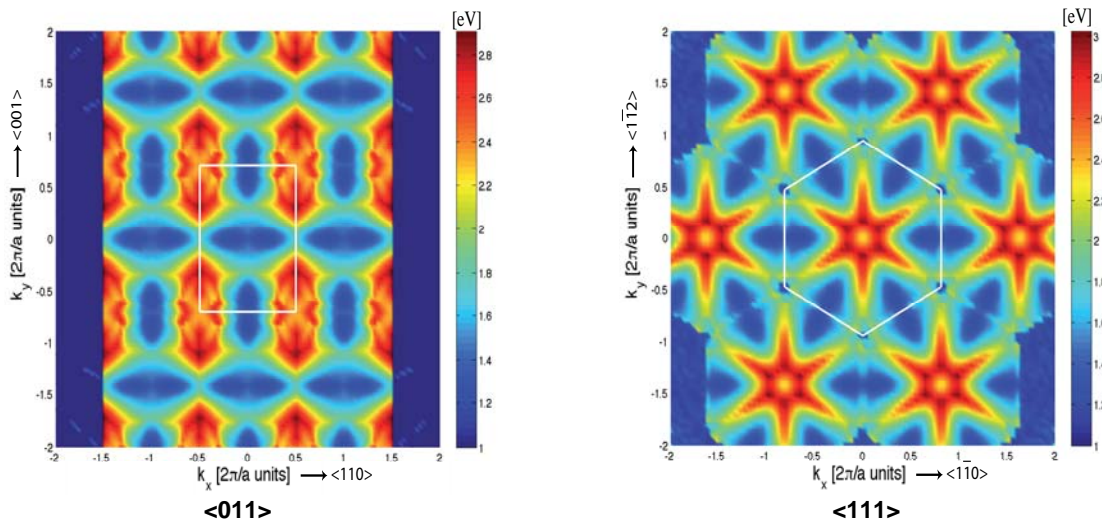




**Figure IV.11:** Energies de la première sous-bande d'une couche **a)** de Si et **b)** de Ge de 5nm d'épaisseur encadrée dans de l'oxyde pour une direction de confinement  $\langle 001 \rangle$ . Les carrés blancs indiquent la première zone de Brillouin de l'espace réciproque. Le code couleur est associé à une échelle d'énergies dont l'origine correspond à l'énergie de la bande de valence hh des matériaux massifs en  $\Gamma$ .

première zone de Brillouin. La périodicité, ainsi prise en compte, est pleinement cohérente avec le choix des vecteurs d'onde dans le calcul des sous-bandes (selon les considérations effectuées en Section IV.2.2.). Les Figures IV.12 a) et b) représentent respectivement les mêmes cartographies 2D d'une couche de Si de 5 nm d'épaisseur pour des orientations de confinement  $\langle 011 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . Ces résultats sont identiques à ceux trouvés avec la méthode LCBB [7].

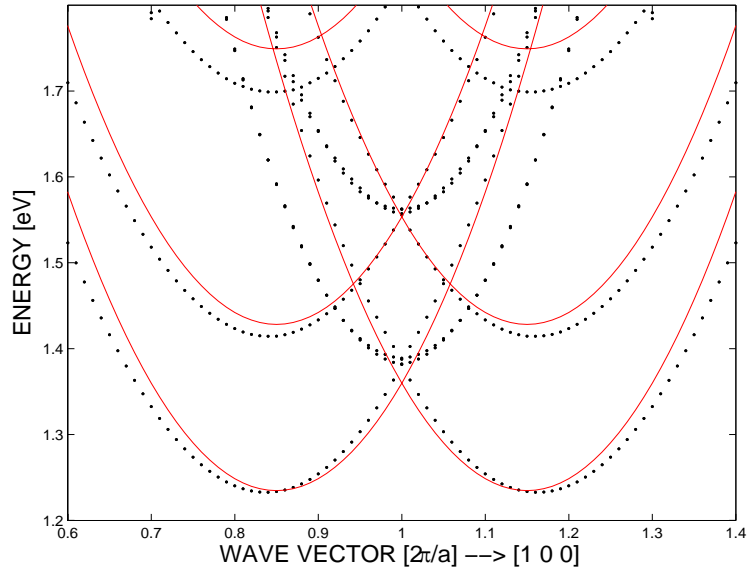
Comme reporté dans la littérature [7], la “troisième vallée” (ou “third valley”, en anglais) proche des minima  $\Delta_{x,y}$  ne peut être capturée par les simples modèles EMA. En Figure IV.13, les relations de dispersion obtenues avec le modèle EMA sont montrées et comparées aux prédictions des modèles  $k.p$ . Nous remarquons clairement que des bandes additionnelles sont manquantes dans la description du modèle EMA.



**Figure IV.12:** Energies de la première sous-bande d'une couche de Si de 5nm d'épaisseur encadrée dans de l'oxyde et pour des directions de confinement  $\langle 001 \rangle$  et  $\langle 011 \rangle$ . Les polygones blancs indiquent la première zone de Brillouin de l'espace réciproque. Le code couleur est associé à une échelle d'énergies dont l'origine correspond à l'énergie de la bande de valence hh des matériaux massifs en  $\Gamma$ .

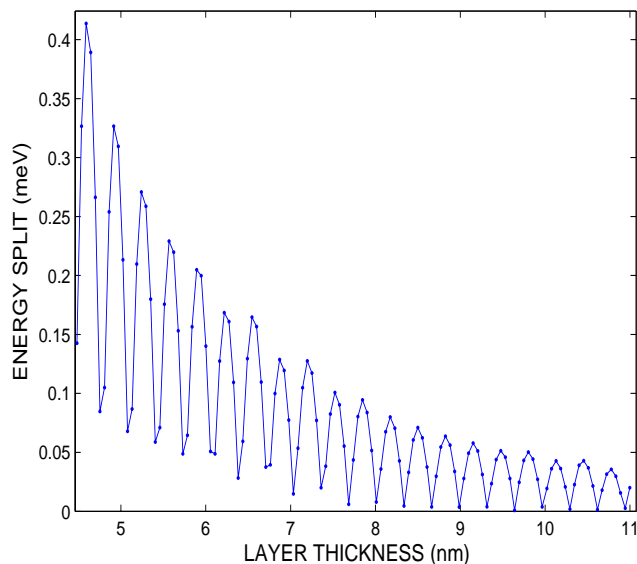
<sup>7</sup>En effet, la non-périodicité des solutions de la méthode  $k.p$  dans l'espace réciproque est également observable dans le cas des matériaux massifs [31]. Rappelons que l'approche perturbative de la méthode  $k.p$  étend le spectre d'énergie  $E(k)$  à l'ensemble des vecteurs d'onde de la première zone de Brillouin à partir d'un point spécifique, tel que  $k = 0$  (voir chapitre II).



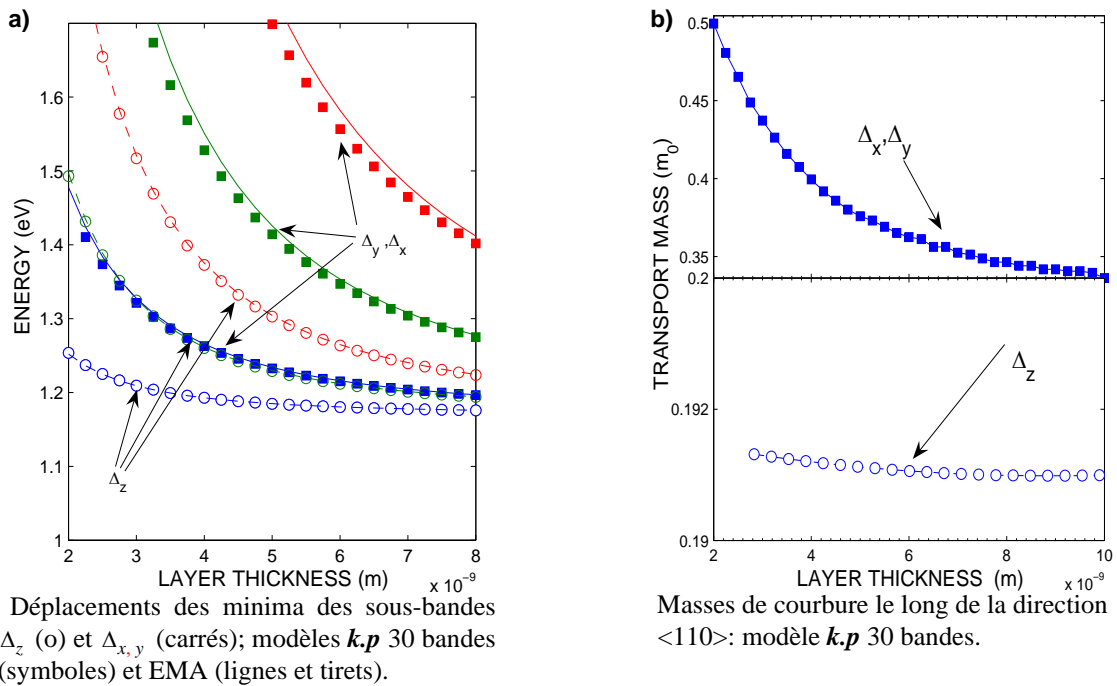


**Figure IV.13:** Les relations de dispersion des plus basses sous-bandes près des minima de vallée  $\Delta_x$  le long de la direction  $\langle 100 \rangle$  dans une couche de Si de 5nm d'épaisseur encastrée dans de l'oxyde. Modèle EMA (lignes continues) et modèle  $k,p$  30 bandes (pointillés).

L'importance du décalage des énergies de sous-bandes en  $\Gamma$ , lequel est connu sous le nom de "valleys splitting" [32], a récemment été soulignée. En effet, ce décalage en énergie (0.1-1 meV) est comparable à celui de l'effet Zeeman. Pour les technologies émergentes comme la spintronique dans le Si ou encore le calcul quantique, il est crucial de prendre en compte ces effets. L'effet de *Valleys splitting* est produit par le couplage entre les vallées  $\Delta_z$  (localisées en  $\Gamma$ ). Cet effet est une caractéristique particulière que le simple modèle EMA ne prend pas en compte [32]. La Figure IV.14 reporte les valeurs du *valleys splitting* obtenues avec le modèle  $k,p$  30 bandes en fonction de l'épaisseur du dispositif. Les valeurs reportées dans cette section sont en bon accord avec les résultats récemment calculés avec la méthode LCBB [33]. Les valeurs du *valleys splitting*, sont néanmoins faibles en comparaison de l'énergie thermique à température ambiante, et n'affectent pratiquement pas les propriétés de transport standard dans les dispositifs FD.



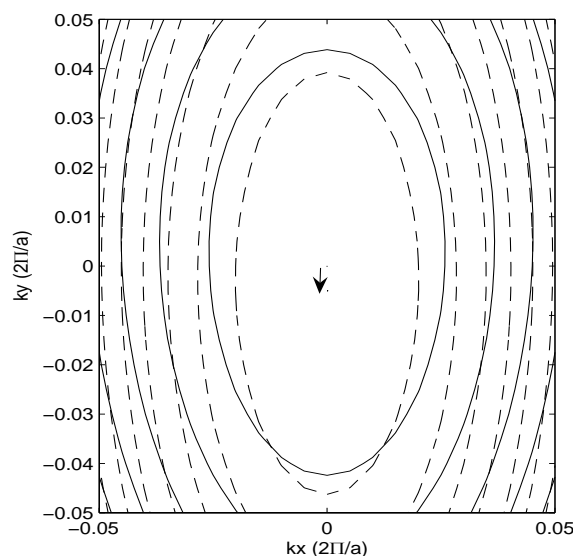
**Figure IV.14:** *Valleys splitting* des bandes de conduction  $\Delta_z$  en fonction de l'épaisseur des couches de Silicium.



**Figure IV.15:** a) Énergie des sous-bandes de conduction et b) des masses de courbure en fonction de l'épaisseur de la couche de Si orientée selon  $\langle 001 \rangle$ .

### IV.3.2.2. Déplacement des sous-bandes en fonction du confinement

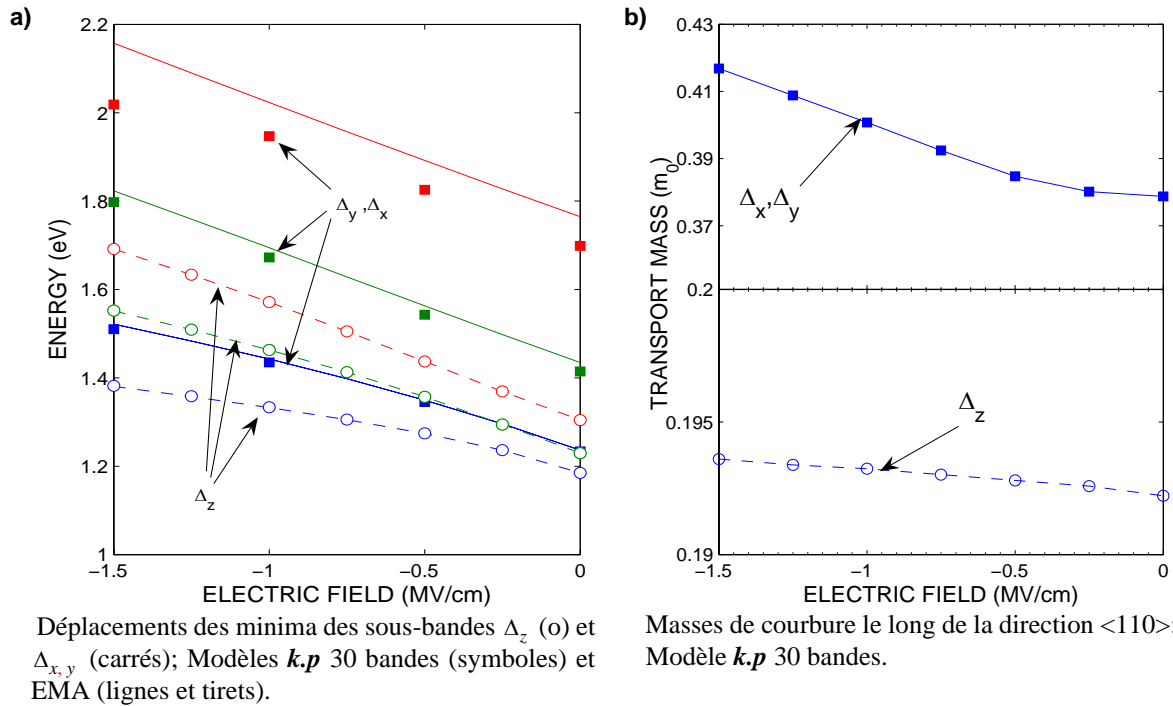
En Figure IV.15 a), le déplacement des minima des sous-bandes de conduction les plus basses en énergie  $\Delta_z$  (localisées au centre  $\Gamma$  de la zone de Brillouin [7]) et des sous-bandes  $\Delta_{x,y}$  est reporté en fonction de l'épaisseur de la couche. Comme montré, la méthode EMA reproduit les résultats des méthodes  $k.p$  (même pour de petits dispositifs). En considérant les masses de courbure dans la direction du canal, la situation semble néanmoins différente. Comme observé en Figure IV.15 b) certaines masses de courbure peuvent significativement augmenter avec la décroissance de l'épaisseur de couche. C'est notamment le cas des vallées  $\Delta_{x,y}$  qui montrent de larges variations dans les systèmes hautement confinés (jusqu'à 50%). Ce dernier résultat est cohérent avec les récents calculs LCBB [33]. La Figure IV.16 montre des distortions typiques des courbes isoénergies de la plus



**Figure IV.16:** Distortions typiques de la relation de dispersion des sous-bandes 2D de la vallée  $\Delta_y$ , dans des couches de Si de 10 nm (tirets) et 2nm (lignes). La flèche montre le déplacement de l'ellipsoïde. L'énergie zéro est prise au minimum de la vallée, et les contours isoénergies sont espacés de 10meV.

basse vallée  $\Delta_y$  pour des couches de 2 nm et 10 nm d'épaisseur. On peut de même noter un léger déplacement des ellipsoïdes le long de la direction  $\langle 010 \rangle$ .

Finalement, l'influence d'un champ électrique additionnel constant a été traitée. Nous avons trouvé des tendances similaires aux résultats montrés en Figure IV.15. La Figure IV.17 montre a) les énergies de sous-bandes et b) les masses de courbure  $\langle 110 \rangle$  en fonction des valeurs du champ électrique appliqué sur une couche confinée de Si de 5 nm d'épaisseur. Similairement aux résultats de la Figure IV.15, une bonne description en terme de déplacement de bandes est obtenue avec le modèle EMA. Toutefois, les masses de courbure peuvent montrer de fortes déviations en comparaison des valeurs des matériaux massifs.



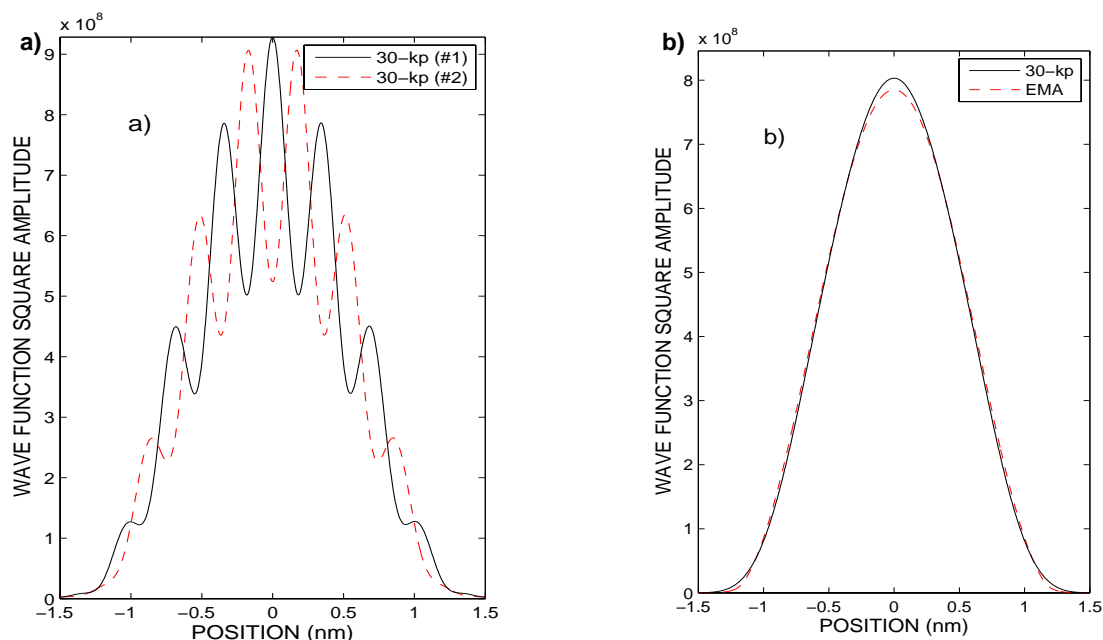
**Figure IV.17: a)** Déplacement des minima des premières sous-bandes de conduction en fonction de la valeur du champ électrique appliqué à une couche de Si de 5nm d'épaisseur orientée  $\langle 001 \rangle$  : modèles  $k.p$  30 bandes et EMA; **b)** Masses de courbure dans la direction  $\langle 110 \rangle$ : modèle  $k.p$  30 bandes.

### IV.3.2.3. Fonctions d'onde

En Figure IV.18, a), les amplitudes au carré des fonctions d'onde des deux plus basses bandes de conduction en  $\Gamma$  sont montrées dans une couche de Si de 2 nm d'épaisseur. Ces fonctions d'onde présentent des oscillations (avec une période déterminée par la position des vallées  $\Delta_z$  le long de l'axe  $\Gamma - z$ ), mais leur somme (montrée en Figure IV.18 b)) montre une forme lisse qui correspond aux prédictions du modèle EMA.

## IV.4. Structures de bandes dans un FD MOSFET contraint

L'impact de la contrainte dans la structure des sous-bandes de valence a déjà été étudié dans un puit quantique avec un modèle  $k.p$  6 bandes [11], [18] et [34]. La contrainte induit des couplages supplémentaires entre les bandes hh, lh et so. Ces couplages ont un fort impact sur la structure des sous-bandes. Le but de cette section est de comparer les résultats issus du modèle  $k.p$  6 bandes avec ceux obtenus à l'aide du modèle  $k.p$  30 bandes. Finalement, nous étudierons avec ces modèles l'évolution des masses de courbure en fonction de la contrainte.



**Figure IV.18:** Etats en  $\Gamma$  des électrons confinés dans une couche de Silicium de 2 nm d'épaisseur orientée selon  $\langle 001 \rangle$ : **a)** amplitude au carré des fonctions d'onde des 2 premiers niveaux (quasi-dégénérés), et **b)** somme de l'amplitude au carré des deux premiers niveaux.

## IV.4.1. Introduction de la contrainte dans le calcul de structures de bandes de systèmes confinés

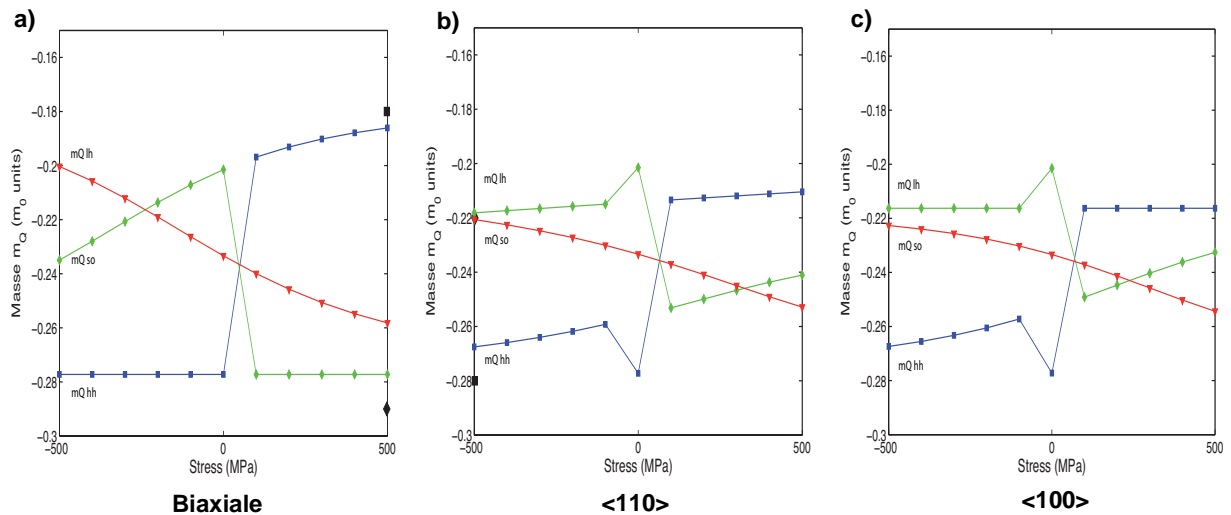
### IV.4.1.1. Présentation de la problématique du calcul de structures de bandes dans un système 2D contraint

L'Hamiltonien du matériau massif sous contrainte est intégré dans la méthode de calcul de structures de bandes des systèmes confinés. On s'attend à ce que la contrainte implique des déplacements des sous-bandes ainsi que la variation de leurs masses de courbures.

Comme nous l'avons vu en Section IV.3., le déplacement des bandes par le confinement peut être décrit à partir de la masse de courbure dans la direction du confinement (ou masse de quantification  $m_Q$ ). Or, la contrainte provoque, en plus des déplacements de bandes (voir chapitre II), des modifications de la masse de courbure dans la direction du confinement. Nous présentons en Figure IV.19, les valeurs des masses de confinement des premières sous-bandes de valence en fonction de contraintes biaxiales et uniaxiales  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$ . Les valeurs sont par ailleurs en adéquation avec les données de la littérature [27].

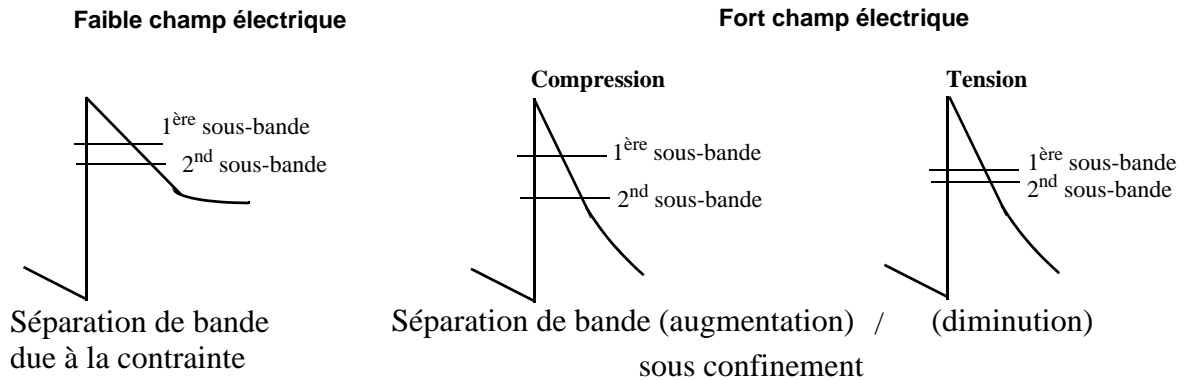
Un modèle, initialement proposé par Thompson et al. [27], tente d'analyser le déplacement des bandes dû au confinement dans les matériaux contraints. Dans ce modèle, le déplacement des bandes sous confinement est relié à la valeur de la masse de quantification modifiée par la contrainte. Par conséquent, le déplacement de bandes dû au confinement va augmenter ou réduire les écartements de bandes créés par la contrainte. Plus la masse calculée de la bande sera "légère", plus la bande sera déplacée en énergie par le confinement en comparaison de bandes avec des masses "lourdes". Dans le cas des bandes de valence, si la plus haute bande de valence a une masse plus faible en comparaison de la seconde bande, l'écartement entre les bandes est réduit. Ce modèle revient à additionner les effets de contrainte  $\varepsilon$  et de confinement  $Q$  dans le calcul du déplacement des bandes  $\Delta E_{tot}$ :

$$\Delta E_{tot}(\varepsilon, Q) = \Delta E(\varepsilon = 0, Q) + \Delta E(\varepsilon, Q = 0) \quad \text{Eq-IV.14}$$



**Figure IV.19:** Masses de courbure des trois premières bandes le long de la direction du confinement  $\langle 001 \rangle$ , appelées masses de quantification. Les valeurs ont été calculées pour des contraintes en tension et en compression: **a)** biaxiale dans le plan (001), **b)** uniaxiale  $\langle 110 \rangle$  (valeurs identiques pour des contraintes  $\langle \bar{1}10 \rangle$ ) et **c)** uniaxiale  $\langle 100 \rangle$ . Les valeurs des masses de quantification sont également comparées à la littérature [27] pour des contraintes biaxiale et uniaxiale  $\langle 110 \rangle$  pour des valeurs respective de 500 MPa et -500 MPa (symboles noirs).

Dans tous les cas de contraintes tensiles, observés en Figure IV.19, la première sous-bande de valence présente une masse légère en comparaison de sa seconde bande. Ainsi, l'écartement entre ces deux bandes devrait diminuer avec l'application d'un champ électrique (comme illustré en Figure IV.20). Par conséquent, la distribution des porteurs de charge devrait être fortement perturbée. Pour ces contraintes, le confinement devrait donc augmenter l'occupation des porteurs dans la seconde bande.



**Figure IV.20:** Schéma des décalages de bandes de valence occasionnés par les contraintes uniaxiales et biaxiale en fonction du champ électrique transverse au canal. Sur la base des variations des masses de quantification en fonction de la contrainte, les contraintes compressives renforceraient les décalages de bandes dus au confinement, les contraintes tensiles les diminueraient.

En ce qui concerne les contraintes en compression, la masse de la seconde bande est plus légère que celle de la première bande. Comme illustré en Figure IV.20, l'écartement entre ces bandes pour cette contrainte s'accroît avec le confinement. En définitif, le confinement devrait favoriser l'occupation de la première bande pour ces contraintes uniaxiales en compression.

L'objectif de cette section est de tester ce modèle à l'aide des calculs de structures de bandes  $k.p$  6 bandes EFA et EMA tenant compte des effets de contraintes<sup>8</sup>. Le but est d'étudier si les effets de contrainte s'ajoutent à ceux du confinement lors du calcul du déplacement des bandes.

### IV.4.1.2. Introduction de la contrainte dans les modèles $k.p$ et EMA

La contrainte est prise en compte par l'Hamiltonien  $H_0$  de l'Eq-IV.3 dans le calcul des structures de sous-bandes dans les systèmes confinés selon les considérations effectuées en chapitre II.

En ce qui concerne la méthode EMA, le déplacement des bande est calculé par les modèles analytiques présentés en chapitre II. Les déplacements des bandes de conduction et de valence en fonction de la contrainte sont respectivement calculées à partir de la théorie modifiée des potentiels de déformation et du modèle analytique  $k.p$  6 bandes.

### IV.4.1.3. Etude approfondie des bandes de valence d'un matériau semi-conducteur contraint sous confinement

Lorsque des contraintes biaxiales ou uniaxiales en tension sont appliquées à un matériau confiné, les effets sur les structures de bandes sont qualitativement différents. Dans le cas d'une contrainte biaxiale tensile, un effet de compensation peut apparaître entre les effets de confinement et de contrainte dans la description des bandes de valence amenant à la dégénérescence des bandes hh et lh en  $\Gamma$  (similairement à un matériau massif relaxé). Cet effet de compensation n'est pas reproduit lorsque des contraintes uniaxiales sont appliquées. Cette constatation va à l'encontre du modèle de Thompson et al. (Section IV.4.1.1.).

L'étude de cette compensation, présentée dans ce chapitre, est à l'état de l'art du domaine de calcul de structures de bandes dans les matériaux confinés. Dans ce paragraphe, nous baserons notre démonstration dans le cas d'un dispositif gravé sur un substrat orienté (001), le confinement des charges prendra donc effet selon la direction  $\langle 001 \rangle$ .

#### IV.4.1.3.1. Contrainte biaxiale tensile

Les valeurs des composantes du tenseur de déformation, pour lesquelles la compensation apparaît, peuvent s'estimer à partir de l'Hamiltonien  $k.p$  6 bandes de Chao et Chuang [34] (voir chapitre II). Si nous observons le déplacement des extrema des bandes de valence ( $k_x = k_y = 0$ ) en fonction de la contrainte, les différentes composantes de l'Hamiltonien s'écrivent de la manière suivante:

$$P = -av(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_1(k_z^2) \quad \text{Eq-IV.15}$$

$$Q = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) + \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_2(-2k_z^2) \quad \text{Eq-IV.16}$$

$$R = \frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy} \quad \text{Eq-IV.17}$$

$$S = -d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}) \quad \text{Eq-IV.18}$$

<sup>8</sup>Remarquons que le modèle Thompson et al. [27] présente une première approximation, déjà discutée en Section IV.3.1.. Si les couplages des bandes de conduction et de valence sont pris en compte (comme, par exemple dans la méthode  $k.p$  30 bandes EFA), le déplacement des bandes en fonction du confinement n'est pas directement proportionnel à la masse de courbure  $m_z$  des bandes de valence dans la direction du confinement. Toutefois, de manière globale, le comportement de la structure de bandes en fonction du confinement, dans le cas non contraint, reste similaire entre les modèles  $k.p$  6 bandes et 30 bandes.

Par ailleurs, nous nous plaçons dans le cas où les effets de cisaillement sont nuls  $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0$ . Pour que la compensation apparaisse, les termes de déformation uniaxiale doivent être identiques  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ . Notons que nous retrouvons cette configuration dans les contraintes biaxiales (par exemple, une couche de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  déposée sur le matériau massif relaxé  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ). Sous cette condition, les termes de couplage interbande  $R$  et  $S$  s'annulent.

Finalement, le seul couplage non-diagonal  $Q$  restant entre les bandes hh et so s'annule par la relation suivante entre opérateurs:

$$\bar{\varepsilon}_{xx} - \bar{\varepsilon}_{zz} = -\left(\frac{\hbar^2}{bm_0}\right)\gamma_2 \bar{k}_z^2 \text{ avec } \bar{k}_z = -i\frac{\partial}{\partial z} \quad \text{Eq-IV.19}$$

Sous ces conditions, l'expression de l'Hamiltonien du semi-conducteur s'apparente à celui du cas relaxé.

#### IV.4.1.3.2. Contrainte uniaxiale tensile

D'après les équations Eq-IV.16-Eq-IV.18, les contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  ne peuvent aucunement présenter les conditions nécessaires à l'apparition des effets de compensation<sup>9</sup>:

- Dans le cas des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ ,  $\varepsilon_{xx}$  et  $\varepsilon_{yy}$  sont identiques. Cependant les composantes de cisaillement  $\varepsilon_{xy}$  subsistent.

- Dans le cas de la contraintes  $\langle 100 \rangle$ ,  $\varepsilon_{yy} = -D_{\langle 100 \rangle} \varepsilon_{xx}$ . le coefficient de Poisson  $D_{\langle 100 \rangle} = \frac{C_{12}}{C_{12} + C_{11}}$  est strictement positif ( $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les composantes du tenseur d'élasticité). Les composantes  $\varepsilon_{xx}$  et  $\varepsilon_{yy}$  ne sont donc pas égales.

### IV.4.2. pMOSFETs sous diverses contraintes

#### IV.4.2.1. pMOSFETs sous déformation plane

Parmi les techniques d'ingénierie de contrainte, le dépôt de films de haute contrainte dans les dispositifs MOSFETs induit des contraintes uniaxiales tensiles ou compressives [35][36]. Nous étudions dans cette section un dispositif sous contrainte uniaxiale le long du canal  $\langle 100 \rangle$  (voir chapitre II). Lorsque les canaux sont significativement plus larges que longs<sup>10</sup>, la contrainte transverse à la direction du canal peut être négligée [37]. Le tenseur de déformation peut être approximé dans le Système de Coordonnées du Dispositif (SCD) comme tel:

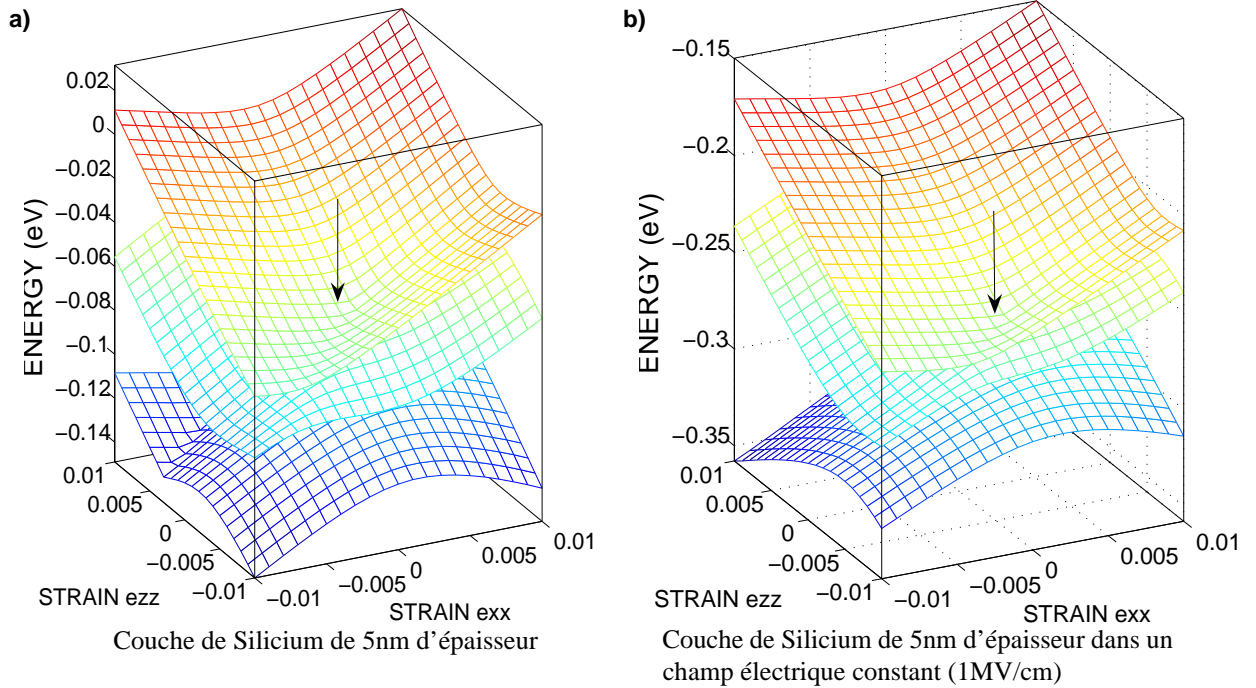
$$\varepsilon_{SCD} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-IV.20}$$

où les composantes  $\varepsilon_{xx}$  et  $\varepsilon_{zz}$  des tenseurs de contrainte sont exprimées dans le système des coordonnées du dispositif. Les valeurs des contraintes peuvent généralement être ajustées dans le système SCD par les procédés technologiques de contrainte [37]. Dans cette section, nous étudions l'impact d'une déformation plane sur le déplacement des bandes de valence d'une couche de Si encadrée dans de l'oxyde.

<sup>9</sup>Les tenseurs de déformation des contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  sont exprimés en ANNEXE II.A.

<sup>10</sup>La longueur est attribuée à la distance entre les extrémités des zones de source et de drain.

En Figure IV.21, les déplacements des trois premières sous-bandes de valence dans une couche confinée de Si de 5 nm d'épaisseur, obtenues avec le modèle  $k.p$  30 bandes, sont montrés en fonction des éléments de contrainte  $\varepsilon_{xx}$  et  $\varepsilon_{zz}$ , a) sans et b) avec champ électrique ( $|\vec{E}| = 1 \text{ MV/cm}$ ).



**Figure IV.21:** Déplacements des bandes de valence, obtenus avec le modèle  $k.p$  30 bandes, en fonction des éléments de tenseurs de déformation  $\varepsilon_{xx}$  et  $\varepsilon_{zz}$ . Les flèches indiquent les coordonnées sur lesquelles l'effet de confinement annule exactement le déplacement des sous-bandes causé par la contrainte.

Comme présenté en Figure IV.22, la dégénérescence des bandes 2D à l'état relaxé est levée. Par ailleurs, les flèches indiquent les coordonnées pour lesquelles les effets de contrainte sont annulés par les effets de confinement.

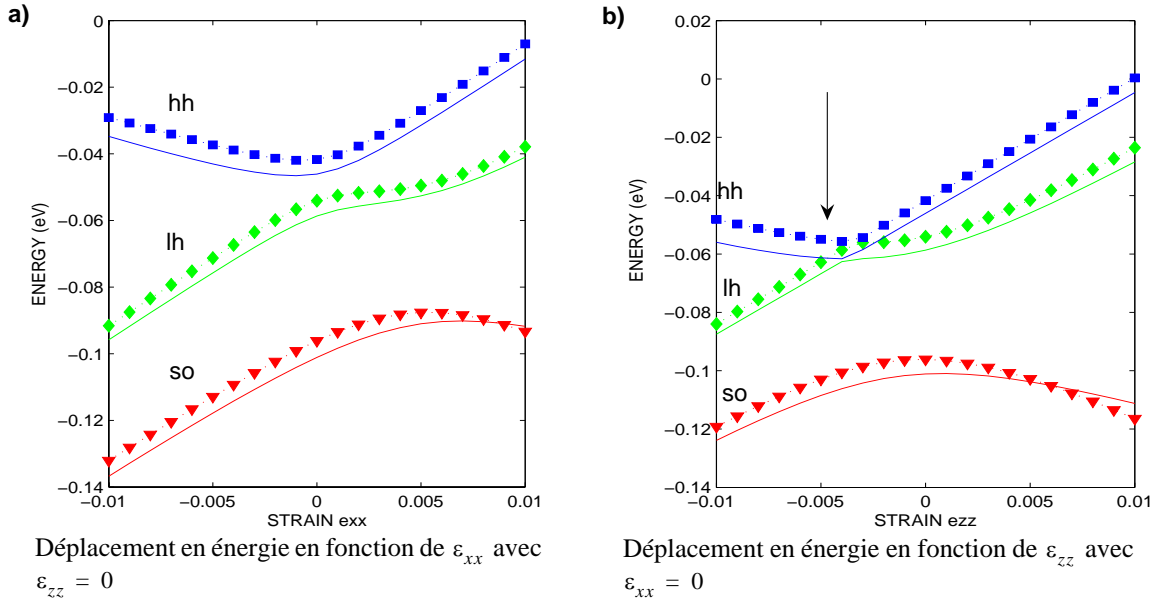
A partir de l'équation Eq-IV.19, la compensation en l'absence de champ électrique apparaît à des déformations proches de<sup>11</sup>:

$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0 \\ \varepsilon_{zz} \approx \frac{\hbar^2 \gamma_2}{b_v m_0} \left( \frac{\pi}{L_{QW}} \right)^2 = -0,0049 \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0 \end{cases} \quad \text{Eq-IV.21}$$

Afin de mieux appréhender l'annulation des effets de confinement par la contrainte, les coupes le long des axes  $(\varepsilon_{xx}, 0)$  et  $(0, \varepsilon_{zz})$  de la Figure IV.21 sont montrées en Figure IV.22. Nous pouvons noter que le déplacement des bandes est différent si la déformation est selon l'axe  $x$  ou  $z$ . En Figure IV.22 a), la déformation  $\varepsilon_{xx}$ , telle que  $\varepsilon_{zz}=0$  n'induit aucun croisement entre les deux premières sous-bandes. En revanche, dans la Figure IV.22 b), où  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0$ , nous observons un croisement entre les bandes hh et lh pour une certaine valeur de déformation négative  $\varepsilon_{zz}$ . Rappelons par ailleurs, que les composantes de déformations de cisaillement sont nulles sous ces conditions ( $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{xz} = 0$ ). Le positionnement relatif des bandes est alors similaire à celui du Si massif

<sup>11</sup>. La dérivée de la fonction trigonométrique Eq-IV.8 par l'opérateur  $k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$  donne  $k_z \rightarrow \frac{n\pi}{L_A}$  [38]. A partir de la formule analytique Eq-IV.19 appliquée à un puit quantique à barrières de potentiel infinies de largeur  $L_A = 5 \text{ nm}$ , la valeur  $\varepsilon_{zz}$  pour laquelle l'effet de compensation apparaît est estimée à  $\varepsilon_{zz} = -0,0049$ . Toutefois dans notre étude, les barrières de potentiel du  $\text{SiO}_2$  ne sont pas infinies (voir Eq-IV.1), la compensation des effets quantique et de contrainte ne se manifeste pas exactement à la valeur  $\varepsilon_{zz} = -0,0049$ .





**Figure IV.22:** Déplacement des premières sous-bandes de valence en fonction de la déformation d'une couche de Si de 5nm d'épaisseur orientée  $\langle 001 \rangle$  en l'absence de champ électrique appliqué; Modèles  $k.p$  6 bandes (lignes) et  $k.p$  30 bandes (symboles).

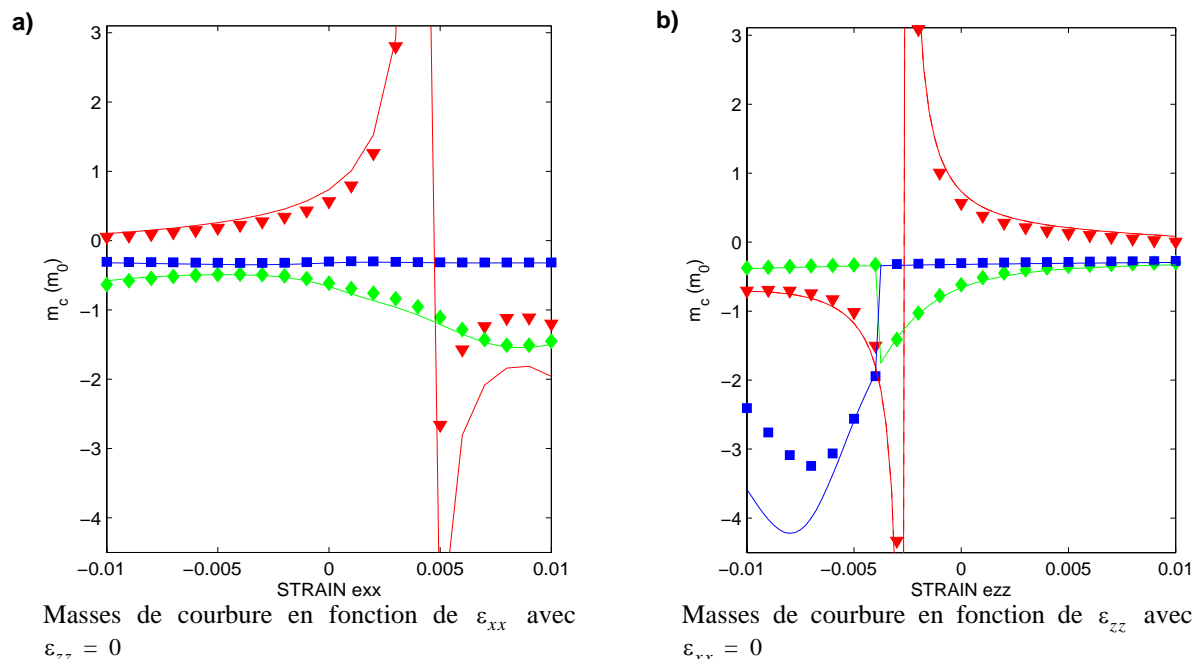
relaxé. De fait, les effets du confinement et de contrainte se compensent à cette valeur de déformation. Cette caractéristique va à l'encontre de ce qui est observé dans les coupes du matériau massif 3D Si contraint où le déplacement des bandes dû aux déformations  $\varepsilon_{xx}$  et  $\varepsilon_{zz}$  coïncide. Cet effet de compensation s'explique par les considérations faites en Section IV.4.1.3., le potentiel extérieur de confinement interagit avec la composante  $\varepsilon_{zz}$  du tenseur de déformation, induisant un couplage entre les bandes hh et so. Cette interaction peut être annulée pour une certaine valeur de déformation  $\varepsilon_{zz}$  avec  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ .

La Figure IV.7 b) montre des relations de dispersion dans un dispositif contraint avec  $\varepsilon_{xx} = 0$  et  $\varepsilon_{zz} = -0,006$ . Comparé à la Figure IV.7 a), l'impact de la contrainte est évident: les sous-bandes hh et lh fusionnent en  $\Gamma$ , et similairement au cas du matériau massif, les courbures des bandes de valence varient en fonction de la contrainte. La Figure IV.23 montre les masses de courbure le long de la direction  $\langle 100 \rangle$  en  $\Gamma$ , reliées aux déplacements des bandes montrés en Figure IV.22. Nous trouvons que dans les systèmes confinés, les variations de courbure dues aux déformations sont plus fortes que dans le cas 3D (non montré).

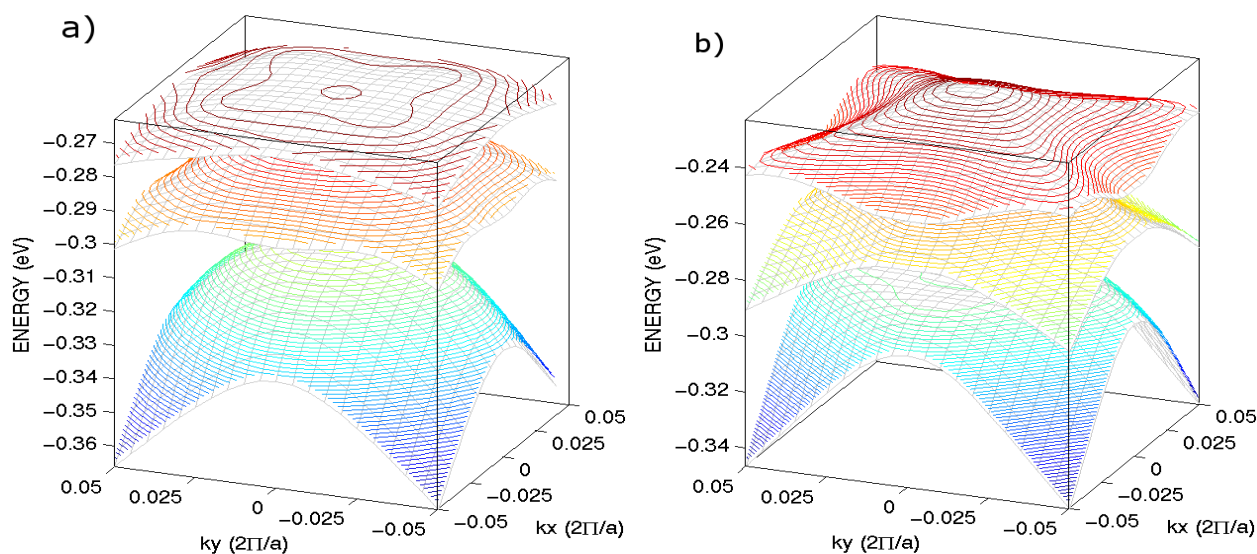
L'impact de la contrainte sur la courbure de bande apparaît clairement en Figure IV.24, qui montre les énergies en fonction des vecteurs d'onde  $k_{\perp}$  dans le plan (obtenu avec la méthode  $k.p$  30 bandes) pour: a) un dispositif contraint avec  $\varepsilon_{xx} = 0$  et  $\varepsilon_{zz} = -0,006$  et b) dans un dispositif relaxé. Dans chaque simulation, le champ électrique est mis à 1MV/cm. Nous observons un changement drastique des courbures de bande du cas non contraint (Figure IV.24 b)) au cas contraint (Figure IV.24 a)), particulièrement en ce qui concerne la plus haute sous-bande de valence, qui a un impact non-négligeable sur les propriétés de transport des trous.

#### IV.4.2.2. pMOSFETs sous contrainte biaxiale

Nous observons, de même, la compensation des effets de contrainte et de confinement en Figure IV.25 pour une contrainte biaxiale tensile de 380MPa appliquée à une couche confinée de Si de 5 nm d'épaisseur. La Figure IV.25 a) montre le déplacement des bandes en fonction de la contrainte. La compensation entre les effets de contrainte et de confinement est indiquée par une flèche. La Figure IV.25 b) présente la relation de dispersion associée.

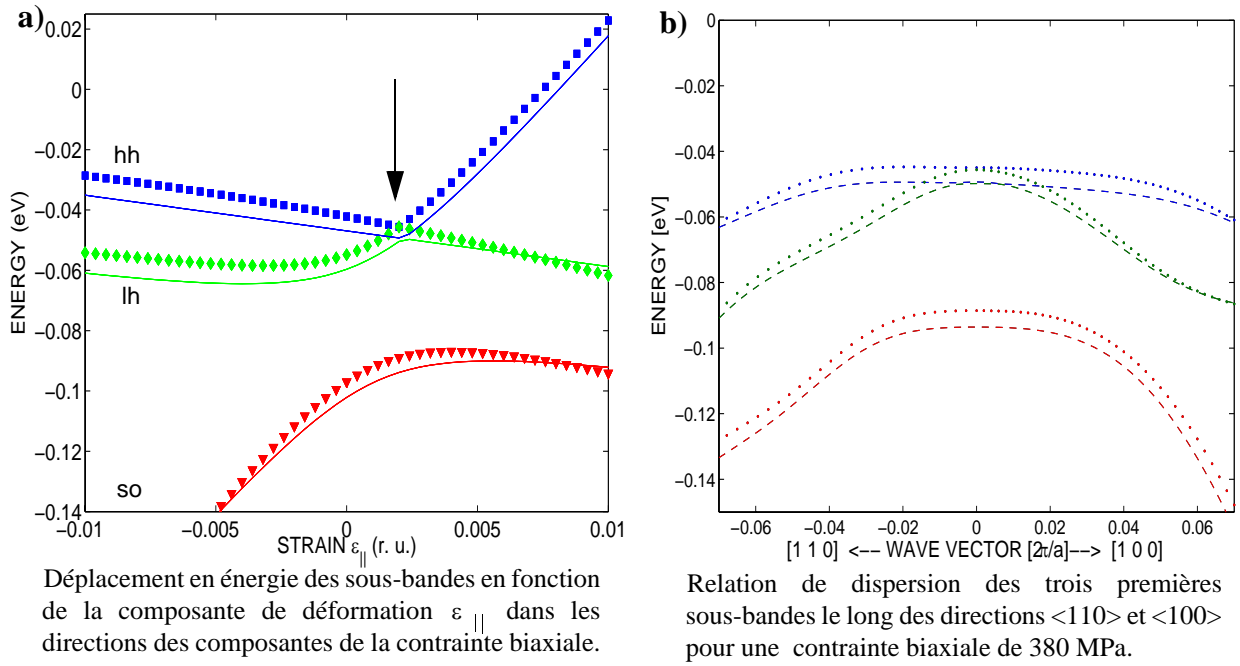


**Figure IV.23:** Masses de courbure des maxima des bandes de valence selon la direction  $\langle 100 \rangle$  en fonction de composantes de déformation **a)** transverse  $\epsilon_{xx}$  et **b)** parallèle  $\epsilon_{zz}$  à la direction du confinement dans une couche de Si de 5nm d'épaisseur orientée  $\langle 001 \rangle$ : modèles  $k.p$  6 bandes (lignes) et  $k.p$  30 bandes (symboles).



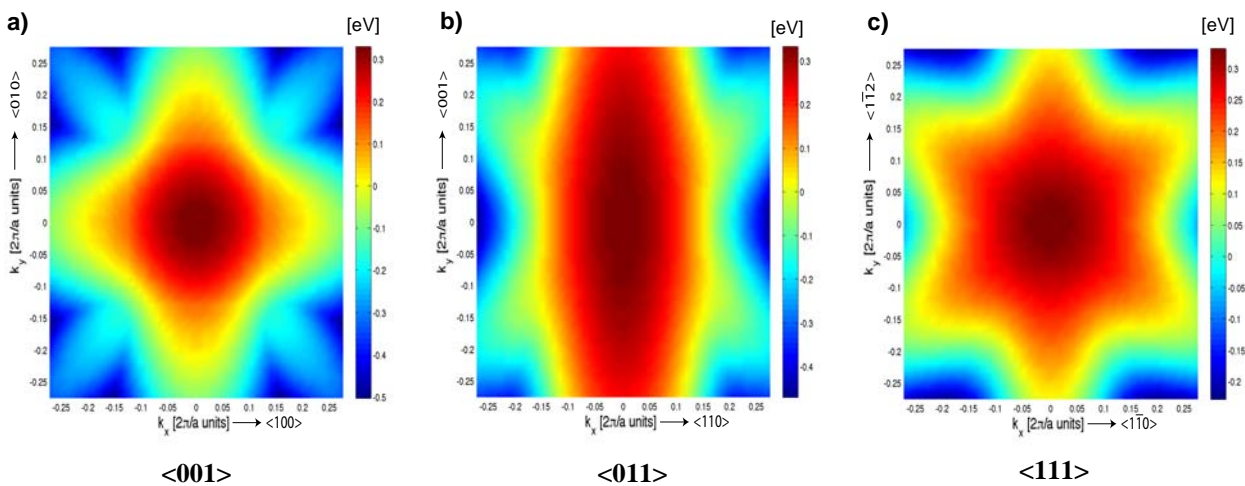
**Figure IV.24:** Energies des sous-bandes de valence d'une couche de Si de 5nm d'épaisseur orientée  $\langle 001 \rangle$ , confinée dans de l'oxyde en fonction des vecteurs d'ondes avec: **a)**  $\epsilon_{xx}=0$  et  $\epsilon_{zz}=-0.006$ , **b)** une couche relaxée. Dans les deux cas, un champ électrique de 1MV/cm a été appliqué.

L'effet de compensation apparaît pour  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = 0,0021$ ,  $\epsilon_{zz} = -0,0016$ , tel que les composantes de déformation de cisaillement soient nulles. En effet, sous cette configuration de contrainte, la compensation apparaît pour un tenseur de déformation similaire à celui des déformations planes (Section IV.4.2.1.), à la différence que les composantes  $\epsilon_{xx}$  et  $\epsilon_{yy}$ , telles que  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ , sont non nulles.



**Figure IV.25:** **a)** Déplacements en énergie des trois premières sous-bandes de valence en fonction de la déformation occasionée par une contrainte biaxiale dans une couche orientée  $\langle 001 \rangle$  de 5 nm d'épaisseur encadrée dans de l'oxyde:  $k.p$  30 bandes (symboles);  $k.p$  6 bandes (lignes). **b)** Relation de dispersion, associée à la compensation des effets de confinement et de contrainte, des trois premières sous-bandes de valence pour une contrainte biaxiale de 380 MPa: modèles  $k.p$  30 bandes (pointillés) et  $k.p$  6 bandes (tirets).

Les effets de contraintes biaxiales sur une couche de Si confinée de 5 nm d'épaisseur pour diverses directions de confinement sont présentés en Figure IV.26. Remarquons que pour une direction de confinement  $\langle 001 \rangle$ , la contrainte biaxiale tensile dans le plan transverse diminue les branches P1,...P4 tandis qu'elle augmente celles H1,...H4 (voir Figure IV.4). Nous nous attendons à ce que ces modifications affectent fortement le transport des trous dans une couche d'inversion.

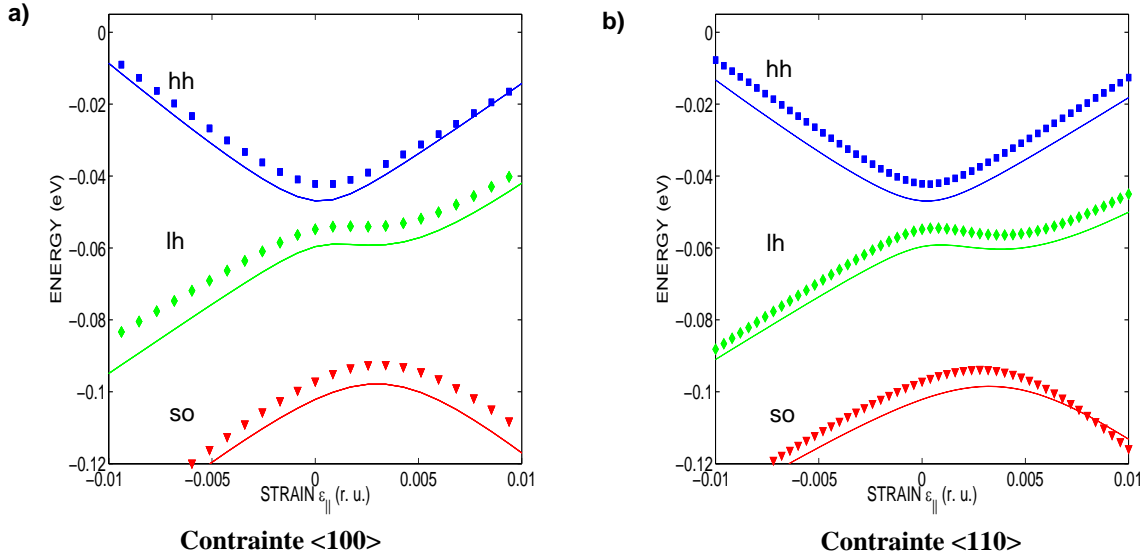


**Figure IV.26:** Energies de la première sous-bande d'une couche de Si de 5nm d'épaisseur sous contrainte biaxiale tensile. La couche est encadrée dans de l'oxyde pour différentes directions de confinement **a)**  $\langle 001 \rangle$ , **b)**  $\langle 011 \rangle$  et **c)**  $\langle 111 \rangle$ . La valeur de la contrainte appliquée est équivalente à celle d'une de Si déposée par épitaxie sur du matériau Ge massif. Les déformations parallèles équivalentes pour les trois directions de confinement sont respectivement **a)**  $\varepsilon_{\parallel} = 0,0418$ , **b)**  $\varepsilon_{\parallel} = 0,0102$ , **c)**  $\varepsilon_{\parallel} = 0,0217$ . Le code couleur est associé à une échelle d'énergies dont l'origine correspond à l'énergie de la bande de valence hh des matériaux massifs en  $\Gamma$ .

### IV.4.2.3. pMOSFETs sous contrainte uniaxiale

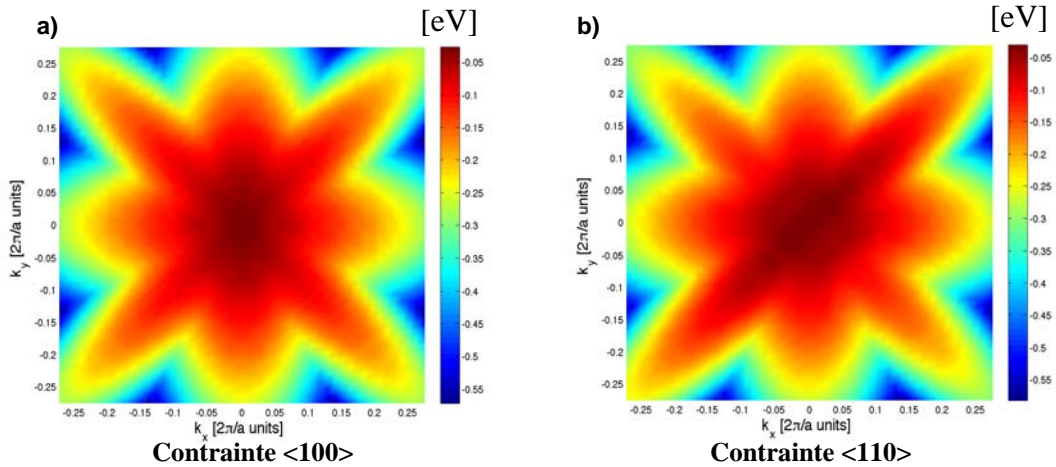
Cette section est consacrée au calcul de structures de bandes d'une couche de Si de 5 nm d'épaisseur encastrée dans de l'oxyde pour des contraintes uniaxiales appliquées le long des directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ .

Dans le cadre de ces contraintes uniaxiales, la Figure IV.27 montre le déplacement des trois premières sous-bandes en fonction des déformations occasionnées par des contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Nous remarquons qu'aucune compensation entre les effets de contrainte et de confinement n'apparaît. Cette observation reste en désaccord avec les considérations effectuées en Section IV.4.1.1., bien que les masses des premières sous bandes soient plus légères que celles des secondes sous-bandes lors de contraintes tensiles. Le déplacement des sous-bandes  $\Delta E_{tot}$  ne peut donc être déduit de l'influence cumulative des effets de contrainte  $\varepsilon$  et de confinement  $Q$ .



**Figure IV.27:** Déplacement des premières sous-bandes de valence en fonction de la déformation pour des contraintes uniaxiales a)  $\langle 110 \rangle$  et b)  $\langle 100 \rangle$  dans une couche de Si orientée  $\langle 001 \rangle$  de 5nm d'épaisseur, encastrée dans de l'oxyde. Les mêmes déplacements sont observés pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Les composantes de déformation sont exprimées selon la direction de la contrainte; modèles  $k.p$  6 bandes (lignes) et  $k.p$  30 bandes (symboles).

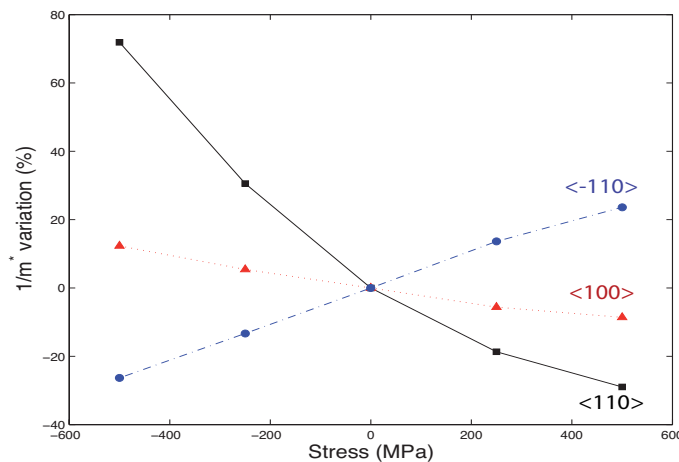
Les contours isoénergies, séparés de 40meV, pour la première bande de valence sont montrés en Figure IV.28 pour le cas relaxé et sous contrainte compressive de 1GPa dans les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . A l'instar des structures de bandes 3D des matériaux massifs, nous trouvons des brisures de



**Figure IV.28:** Energies de la première sous-bande d'une couche de Si orientée  $\langle 001 \rangle$  de 5nm d'épaisseur sous contraintes tensiles de 1GPa selon les directions a)  $\langle 100 \rangle$  et b)  $\langle 110 \rangle$ . Le code couleur est associé à une échelle d'énergies dont l'origine correspond à l'énergie de la bande de valence hh des matériaux massifs en  $\Gamma$ .

symétrie sur les courbes isoénergies présentées. La modification des bandes près du centre  $\Gamma$  va particulièrement influencer les propriétés de transport des trous.

Par ailleurs, nous avons calculé la variation de la moyenne thermique de la masse de courbure<sup>12</sup> dans la direction de transport  $\langle 110 \rangle$  adaptée au gaz 2D confiné dans une couche de Si de 5nm d'épaisseur. Les variations de masse sont reportées en Figure IV.29 pour les trois directions de contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . En comparaison des calculs effectués à l'aide de structures de bandes du matériau massif Si (Figure II.42 du chapitre II), les variations moyennes thermiques de l'inverse de la masse sont plus prononcées dans le gaz de trous confinés. Notamment, dans le cas d'un gaz de trous confinés, nous observons une décroissance de l'inverse de la masse en fonction de la contrainte  $\langle 100 \rangle$ . Nous nous attendons donc à une dégradation de la mobilité des trous sous confinement sous contrainte tensile  $\langle 100 \rangle$ .



**Figure IV.29:** Variations de la moyenne thermique de l'inverse de la masse de courbure dans la direction de transport  $\langle 110 \rangle$  pour les trois directions de contrainte  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . La moyenne thermique est effectuée à partir de structures de bandes 2D d'une couche confinée de Si de 5nm d'épaisseur orientée  $\langle 001 \rangle$ . En utilisant la structure de bandes 2D dans le cas du matériau Si relaxé, l'inverse de la moyenne thermique de la masse vaut -0.686 fois la valeur de l'inverse de la masse de l'électron libre. Les calculs ont été réalisés à l'aide de la méthode **k.p** 6 bandes EFA.

#### IV.4.2.4. Bilan sur les pMOSFETs

Nous avons prouvé dans ce paragraphe que les effets de confinement et de contrainte dans le déplacement des sous-bandes de valence ne peuvent être dissociés. Nos résultats sont, de fait, plus précis que ceux exposés par Thompson et al. [27] fondés sur des considérations qualitatives basées sur la méthode EMA.

La contrainte biaxiale dans le plan (001) permet une compensation entre les effets de contrainte et de confinement au point  $\Gamma$  (Section IV.4.1.3.). Pour des conditions particulières de déformation, la structure de bandes est même équivalente à celle du Silicium relaxé où les bandes hh et lh sont dégénérées en  $\Gamma$ .

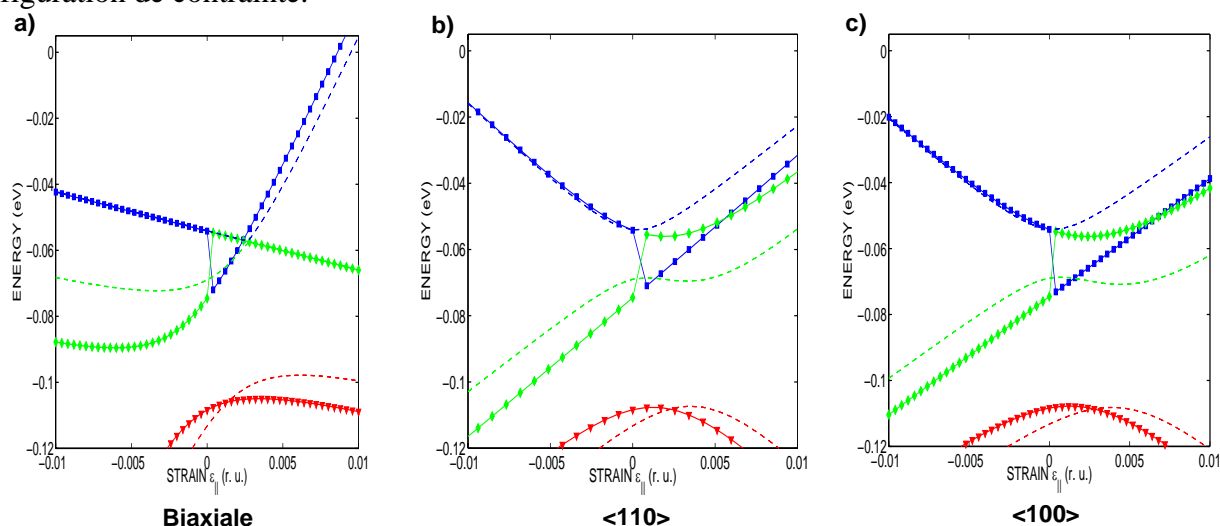
Les calculs des modèles **k.p** pour les contraintes uniaxiales en tension ne montrent pas de croisement entre les deux premières sous-bandes, bien que la masse de la première bande soit plus légère que celle de la seconde bande. En effet, des couplages entre les sous-bandes subsistent au point  $\Gamma$  quelque soit la valeur de contrainte uniaxiale appliquée<sup>13</sup> (voir Section IV.4.1.3.). L'influence de

<sup>12</sup>La notion de la variation de la moyenne thermique de l'inverse de la masse de courbure est définie en chapitre II dans le cadre des structures de bandes 3D. Nous adaptons ici cette notion au cas des structures de bandes 2D.

<sup>13</sup>Rappelons, par ailleurs, que le couplage complexe entre les bandes est d'autant plus critique que les bandes sont proches (voir chapitre II). Lorsque les contraintes uniaxiales sont tensiles, les bandes hh et lh ont tendance à se rapprocher. Le couplage entre les bandes hh et lh est donc amplifié pour ces contraintes tensiles.



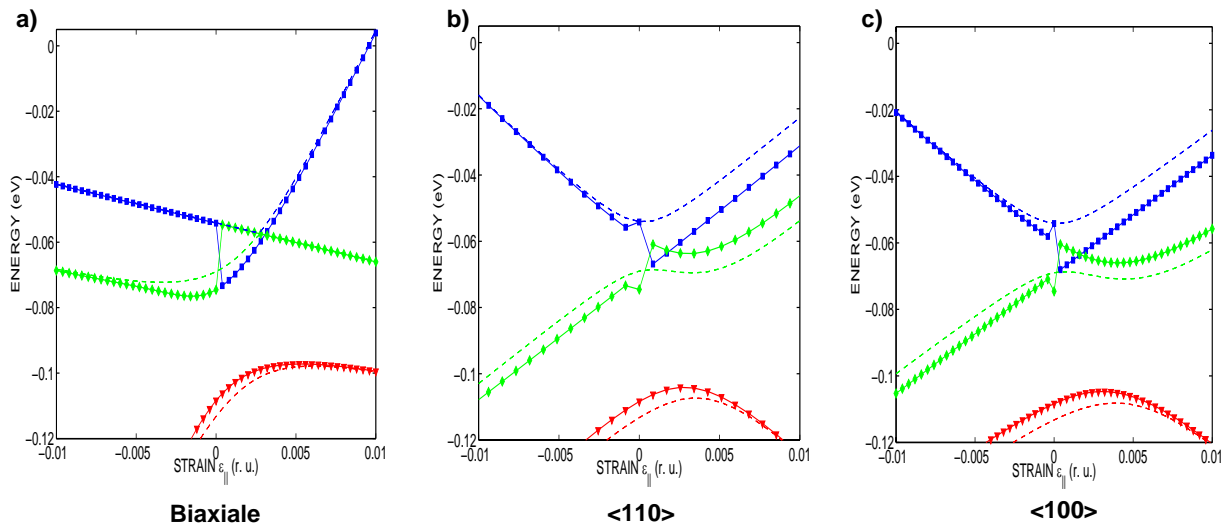
ces couplages entre sous-bandes est mise en évidence en Figure IV.30 par le déplacement des maxima des sous-bandes de valence calculé avec un modèle de type EMA et le modèle  $k.p$  6 bandes EFA pour des contraintes biaxiales dans le plan (001) et uniaxiales dans les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Les déplacements de bandes, provenant de la contrainte, pris en compte dans la méthode EMA sont issus de calculs  $k.p$  6 bandes dans le matériau massif Si. Dans la méthode EMA, les énergies des minima de bandes sont calculées à partir des expressions d'un puit quantique avec des barrières de potentiels infinies (voir note 3. de ce chapitre). Remarquons que les effets de contraintes et de confinement sont théoriquement dissociés dans le modèle EMA. Nous observons que de fortes différences dans le déplacement des bandes sont notables entre les résultats des deux méthodes quelque soit la configuration de contrainte.



**Figure IV.30:** Déplacement des sous-bandes de valence en fonction de la déformation dans une couche de Si orientée  $\langle 001 \rangle$  de 5nm d'épaisseur. Les valeurs sont calculées pour des contraintes en tension et en compression: **a)** biaxiale dans le plan (001), **b)** uniaxiale  $\langle 110 \rangle$  (des déplacements identiques sont observés pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$ ) et **c)** uniaxiale  $\langle 100 \rangle$ . Modèle  $k.p$  6 bandes (tirets) et modèle EMA (symboles). La composante de déformation parallèle est exprimée selon la direction de la contrainte. Les déplacements de bandes sous contrainte pris en compte dans le modèle EMA sont issus de calculs  $k.p$  6 bandes. Les masses de quantification nécessaires aux calculs du déplacement des bandes restent constantes à celles de la configuration non-contrainte.

L'influence de la variation de masse de quantification dans le déplacement des sous-bandes de la méthode EMA est ajoutée en Figure IV.31. Les masses de quantification du modèle EMA à chaque valeur de contrainte sont obtenues à partir des courbures de bandes dans la direction  $\langle 001 \rangle$  issues des calculs de la méthode  $k.p$  6 bandes dans un matériau massif (Figure IV.19). Notons, dans le cas de la contrainte biaxiale dans le plan (001), le bon comportement des résultats de la méthode EMA en comparaison des solutions de la méthode  $k.p$  6 bandes EFA. Dans le cas des contraintes uniaxiales, la méthode EMA présente des discontinuités dans le déplacement des bandes à l'état de relaxation, qui ne sont pas observables dans les solutions de la méthode  $k.p$  6 bandes EFA. Ces discontinuités sont liées aux variations des masses de courbures (Figure IV.19). Par ailleurs, les résultats du modèle EMA, pour ces directions de contrainte, présentent des croisement de bandes à l'encontre des résultats du modèle  $k.p$  6 bandes.

Les différences dans les résultats des deux méthodes provient du fait que le couplage entre les effets de confinement et de contrainte n'est pas pris en compte dans la méthode EMA, contrairement à la méthode  $k.p$ . Afin de conforter cette analyse, notons en Figure IV.31 que l'énergie en  $\Gamma$  de la première sous-bande de la méthode EMA est identique à celle du  $k.p$  6 bandes uniquement lorsque la contrainte est nulle. En effet, lorsque seul le confinement intervient dans le déplacement des bandes, calculé par la méthode  $k.p$  6 bandes, la bande hh est découplée des autres bandes (voir Section IV.3.1.).

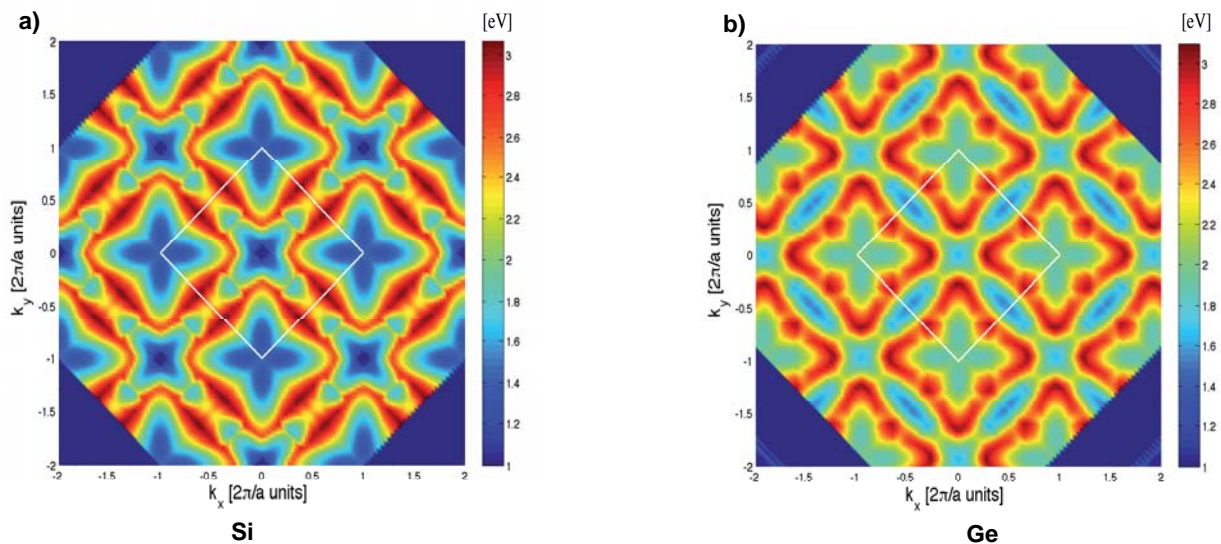


**Figure IV.31:** Même légende qu'en Figure IV.30 à la différence que les masses de quantification prises en compte dans les solutions du modèle EMA sont également calculées pour chaque valeur de contrainte à l'aide du modèle  $k.p$  6 bandes.

### IV.4.3. nMOSFET sous diverses contraintes

#### IV.4.3.1. nMOSFET sous contraintes biaxiales

Nous montrons en Figure IV.32, a) (et Figure IV.32 b)) les énergies de la première sous-bande en fonction des vecteurs d'onde dans le plan transverse à la direction de confinement  $\langle 001 \rangle$  dans une couche confinée de Si (et de Ge) de 5 nm d'épaisseur. Des contraintes biaxiales équivalentes à 1% de déformation ont été appliquée sur les couches confinées Si et Ge dans le plan (001). En comparaison du cas non contraint (Section IV.3.2.1.), nous notons que des déplacements de bandes notables s'opèrent au point  $\Gamma$  pour le Si et dans les vallées L pour le Ge.

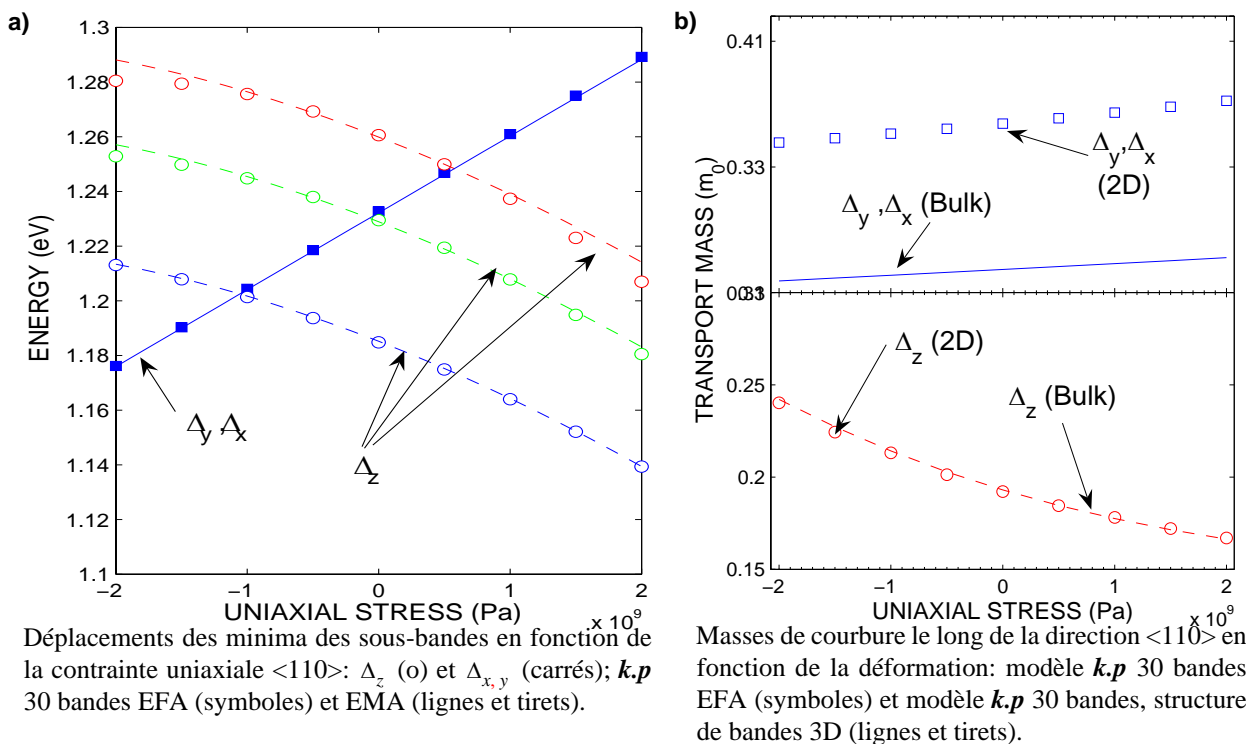


**Figure IV.32:** Energies de la première sous-bande de conduction d'une couche a) de Si et b) de Ge orientée  $\langle 001 \rangle$  de 5nm d'épaisseur encadrée dans de l'oxyde pour une direction de confinement  $\langle 001 \rangle$ . Une contrainte biaxiale de 1.8 GPa a été appliquée, équivalente à une déformation  $\epsilon_{xx}$  de 1%. Le carré blanc indique la première zone de Brillouin de l'espace réciproque. Le code couleur est associé à une échelle d'énergies dont l'origine correspond à l'énergie de la bande de valence hh des matériaux massifs en  $\Gamma$ .

### IV.4.3.2. nMOSFET sous contraintes uniaxiales

Comme démontré en chapitre III, et en accord avec la littérature [39], la contrainte uniaxiale a un fort impact sur les propriétés de transport  $\langle 110 \rangle$ . Ceci est notamment dû à la large variation des masses de courbure qui apparaissent avec les contraintes de cisaillement. C'est particulièrement le cas dans un canal orienté selon  $\langle 110 \rangle$ , lorsque la contrainte uniaxiale est appliquée dans la direction du canal. Les composantes de déformation non-nulles  $\varepsilon_{xy} \neq 0$  impactent les masses de courbure au minimum de la vallée  $\Delta_z$  (chapitre II). Toutefois, les contraintes uniaxiales le long de la direction  $\langle 110 \rangle$  ont un impact moindre dans les vallées  $\Delta_x$  et  $\Delta_y$  car les composantes de cisaillement valent  $\varepsilon_{yz} = 0$  et  $\varepsilon_{xz} = 0$ .

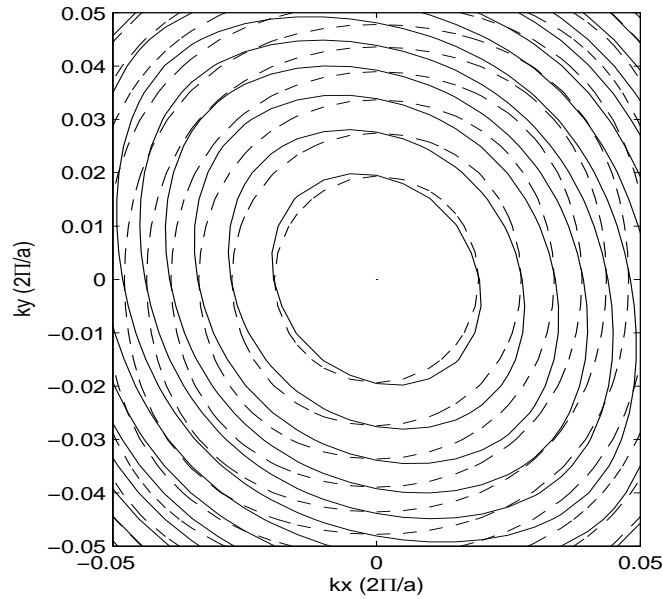
Nous avons calculé les énergies des états confinés d'un dispositif de 5 nm d'épaisseur pour différentes valeurs de contrainte. En Figure IV.33 a), nous comparons les déplacements des minima de bandes de conduction calculés par les modèles  $k.p$  EFA et EMA. Dans un cristal contraint, il est connu que les minima des bandes sont déplacés de leur position initiale relaxée dans l'espace réciproque. Afin d'effectuer une comparaison cohérente, nous avons calculé les énergies des états confinés avec le modèle standard EMA (avec les masses de confinement fixées). Puis, nous avons ajouté les déplacements en énergie des bandes dus à la contrainte (initialement calculés avec le modèle  $k.p$  30 bandes 3D dans le matériaux massif; voir chapitre II). Comme il peut être vu, cette méthode reproduit le déplacement des bandes obtenu avec un modèle  $k.p$  EFA.



**Figure IV.33:** a) Déplacements des énergies des sous-bandes de conduction en fonction de la contrainte uniaxiale  $\langle 110 \rangle$  et b) masses de courbure dans une couche confinée de Si orientée selon  $\langle 001 \rangle$  de 5 nm d'épaisseur.

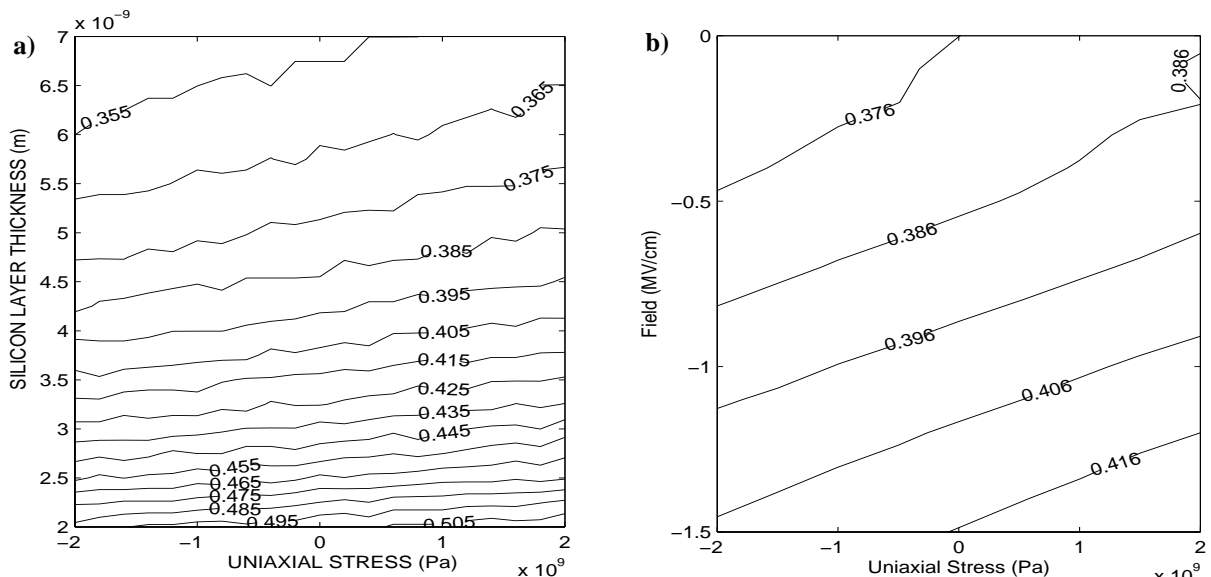
Les masses de courbure sont reportées en Figure IV.33 b) en fonction de la valeur de contrainte. La masse de la vallée  $\Delta_z$  varie entre de  $0.160 m_0$  à  $+200\text{MPa}$  et  $0.245 m_0$  à  $-200\text{MPa}$ . Comme attendu, le changement de masse de la vallée  $\Delta_z$  est mis en évidence par des distortions des isoénergies des bandes de conduction dans le plan  $k_x-k_y$  (montrées en Figure IV.34). Toutefois, la variation de masse reste comparable aux variations observées avec la méthode  $k.p$  30 bandes 3D dans le matériau massif Si.





**Figure IV.34:** Distortion typique de la relation de dispersion des sous-bandes 2D de la vallée  $\Delta_z$  dans une couche orientée  $\langle 001 \rangle$  de 5 nm d'épaisseur relaxée (tirets) et sous contrainte uniaxiale de 2 GPa dans la direction  $\langle 110 \rangle$  (lignes solides). L'énergie zéro est prise au minimum de la vallée, et les contours isoénergies sont espacés de 10 meV.

Dans ce dispositif, le confinement est relativement faible, et le comportement montré en Figure IV.33 b) est principalement dû à la contrainte. Néanmoins, la situation est différente dans les systèmes fortement confinés. Les Figure IV.35 a) et Figure IV.36 a) présentent les masses de courbure aux minima des sous-bandes, le long de la direction  $\langle 110 \rangle$ , en fonction de l'épaisseur et de la valeur de contrainte  $\langle 110 \rangle$  appliquée à la couche de Si. Les Figures IV.35 b) et IV.36 b) montrent également les masses de courbure  $\langle 110 \rangle$  aux minima des sous-bandes en fonction du champ électrique et de la contrainte  $\langle 110 \rangle$  appliquée à une couche confinée de Si de 5 nm d'épaisseur. Nous observons que la variation des masses de courbure présente un couplage entre les effets de confinement et de contrainte. Si nous nous focalisons par exemple, sur les vallées  $\Delta_z$ , nous remarquons que la variation de masse



Masses de courbure  $\langle 110 \rangle$  en fonction de l'épaisseur de la couche confinée et de la contrainte uniaxiale  $\langle 110 \rangle$ . Le champ électrique de confinement est nul ( $|\vec{E}| = 0$  MV/cm).

Masses de courbure  $\langle 110 \rangle$  en fonction du champ électrique et de la contrainte uniaxiale  $\langle 110 \rangle$ . La couche de Si simulée est de 5 nm d'épaisseur.

**Figure IV.35:** Masses de courbure des vallées  $\Delta_{x,y}$  selon la direction  $\langle 110 \rangle$  en fonction de la contrainte uniaxiale  $\langle 110 \rangle$  appliquée le long du canal et a) de l'épaisseur de la couche confinée; b) du champ électrique.



en [3][40][41]). Ces études démontrent les limites actuelles des approches conventionnelles, notamment dans le calcul des décalages en énergie dus aux mélanges de bandes (Section IV.3.2.1.), ou du couplage des bandes de valence et de conduction (Section IV.3.1.2.). L'analyse se base sur la redistribution des porteurs de charge à l'interface entre les deux matériaux. Des avancées dans la modélisation de ces mélanges de bandes aux interfaces ont récemment été obtenues à partir de calculs *ab initio* sur des hétérostructures [3][40][41]. L'Hamiltonien d'interface ainsi que des règles de connection des fonctions enveloppes à l'interface ont été déterminés. Cependant, de tels calculs sont difficiles à produire de le cas des interfaces Si/SiO<sub>2</sub>, principalement parce que l'oxyde est amorphe. L'exacte nature de cet état n'est pas connue.

Le traitement de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, modélisé par l'ajout supplémentaire de potentiel confinant (voir Section IV.2.1.1.), nous semble adapté à l'analyse des états confinés dans un dispositif de type FD SOI MOSFET, bien que les effets microscopiques des changements cristallographiques aux interfaces soient négligés. De fait, les décalages de bandes à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> sont suffisamment importants pour que la fonction d'onde disparaisse rapidement dans la région SiO<sub>2</sub>. Par conséquent, les couplages de bandes de différentes symétries à l'interface sont négligés.

## IV.5.2. Comparaisons avec d'autres méthodes: LCBB et TB

Dans ce qui suit, nous comparons brièvement notre modélisation avec les approches *Linear Combination of Bulk Band* (LCBB) [7][16][29][33] et *Tight Bending* (TB) [21][42][43].

### IV.5.2.1. Comparaison avec la méthode LCBB

Les méthodes LCBB [7][33], basées sur la méthode semi-empirique des pseudo-potentiels, peuvent être appliquées aux électrons [7][16][29][33] et aux trous [16][29]. Comme mentionné ci-dessus, la méthode LCBB appliquée à un transistor à effet de champ, gravé sur du Si, donne des résultats en bon accord avec nos calculs *k.p* EFA. Néanmoins, nous notons que la méthode LCBB, telle que présentée en Réfs. [7][33], ne prend pas en compte les couplages entre les bandes de conduction et de valence. Pour cette raison, dans les systèmes hautement confinés, ou avec un petit gap de semi-conducteur, tel que le Ge, cette méthode surestime le déplacement des bandes dû au confinement. (voir, par exemple, notre comparaison entre les méthodes LCBB et le *k.p* 30 bandes en Ref. [29]). D'un point de vue théorique, la méthode repose sur le développement des termes de la fonction-enveloppe sur la base des ondes planes. La convergence est atteinte avec un grand nombre d'ondes planes. Les temps de calcul des modèles *k.p* EFA sont donc moindres que ceux de la méthode LCBB. En effet, la méthode LCBB nécessite le calcul de facteurs d'overlap pour chaque vecteur d'onde  $k$  [7][16][33]<sup>14</sup>, ce qui implique de lourds calculs numériques. Ainsi, sur la base de notre implémentation de ces deux méthodes, la méthode *k.p* 30 bandes nécessite dix fois moins de temps de calcul que la méthode LCBB.

### IV.5.2.2. Comparaison avec la méthode TB

Il doit être mentionné que des simulateurs de transport, basés sur les méthodes de calculs TB sont de plus en plus utilisés dans le calcul des propriétés de transport dans les MOSFETs [43]. L'utilisation de la base des orbitales atomiques avec les interactions limitées aux premiers voisins, permet le calcul des fonctions d'onde de systèmes atomiques de millions d'atomes. Cette méthode est adaptée au calcul de transport quantique. De fait, le temps de calcul de la méthode TB dans les systèmes 2D est proche de celui de la méthode *k.p* 30 bandes EFA. Toutefois, peu de comparaisons

<sup>14</sup>.En revanche, la méthode *k.p* 30 bandes ne nécessite que le calcul des overlaps qu'au point de haute symétrie  $\Gamma$  ( $k = 0$ ) de la première zone de Brillouin (voir également note 4. de la Section IV.2.2.). Ainsi les temps de calcul de la méthode *k.p* sont moindres que ceux de la méthode LCBB.

ont été effectuées entre ces méthodes (approche continue vs. atomistique) dans le cadre de nano-transistors à effet de champ sous contrainte. Par son approche atomistique, l'approche TB permet de définir des détails atomiques, tels que la levée de dégénérescence de spin dans les puits quantiques avec un nombre impair de couches atomiques. L'inconvénient d'utiliser l'approche TB est qu'un large nombre de paramètres est nécessaire à la description précise de la structure de bandes sur l'intégralité de la PZB, spécialement dans le cas des semi-conducteurs contraints. Afin de comparer les approches  $k.p$  EFA et TB dans les systèmes confinés, leurs relations de dispersion doivent être aussi proches que possible dans le Silicium massif relaxé et contraint. Une étude complémentaire a été menée, à partir du modèle TB  $sp^3d^5s^*$  [42], incluant un nouveau modèle de contrainte intersite<sup>15</sup> [21]. Nous avons comparé les prédictions du modèle  $k.p$  30 bandes EFA à celles du TB. Les résultats obtenus de ces deux modèles sont en bon accord dans différents systèmes confinés 2D. Néanmoins, des comparaisons complémentaires entre ces deux méthodes sont en cours dans les MOSFETs FD SOI [44], dans le puit quantique Ge [29] et les hétérostructures Si/SiGe [45].

### IV.5.3. Conclusion sur l'introduction du confinement dans le calcul de structures de bandes

Le calcul de structures de bandes dans des systèmes confinés 2D sous contrainte implique des couplages supplémentaires entre sous-bandes. Ces structures de sous-bandes peuvent modifier drastiquement les propriétés de transport dans les dispositifs MOSFETs.

Le mélange des bandes de valence dû au confinement a été étudié à l'aide de deux modèles  $k.p$  dans l'approximation de la fonction enveloppe: le modèle  $k.p$  6 bandes de Dresselhaus-Kip-Kittel et le modèle  $k.p$  30 bandes. Les déplacements des bandes ainsi que les variations de masses de courbure ont été systématiquement comparés dans un dispositif pMOSFET FD. Nous observons que dans ce dispositif, constitué de Si, le modèle  $k.p$  6 bandes reste un bon compromis entre le temps de calcul et la précision.

Les effets de *valleys splitting* des bandes de conduction dus aux couplages entre vallées  $\Delta_z$  ont été étudiés avec le modèle  $k.p$  30 bandes. Par ailleurs, l'impact des contraintes de cisaillement et de confinement dans les masses de courbure a été étudié dans le cadre d'un dispositif nMOSFETs sous contrainte uniaxiale. Cette dernière étude soulève d'importantes remarques. Premièrement, dans le cadre non contraint, les sous-bandes les plus hautes en énergie obtenues avec le modèle EMA sont en bon accord avec les prédictions du modèle  $k.p$  30 bandes. Ce bon accord provient du fait que le Si a un gap relativement élevé et que les couplages entre les bandes de valence et de conduction peuvent être négligés dans de tels dispositifs. En revanche, si nous considérons les masses de courbure dans la direction du transport, les conclusions semblent substantiellement différentes. En effet, la contrainte introduit des couplages supplémentaires entre les bandes, menant à une faible adéquation entre les modèles EMA et  $k.p$ . Ceci prouve l'importance de calculer les propriétés de transport dans les systèmes 2D sous contrainte en considérant des structures de bandes calculées sur l'intégralité de la première zone Brillouin.

<sup>15</sup>Le nouveau modèle TB  $sp^3d^5s^*$  [21] inclut une nouvelle calibration et un nouveau modèle de contrainte intersite (les paramètres ont été ajustés afin de reproduire les résultats de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT, chapitre II). Les masses effectives aux minima des vallées et les potentiels calculés avec ce modèle sont en très bon accord avec ceux du modèle  $k.p$  30 bandes. De même, la structure de bandes dans sa globalité est bien reproduite avec ce modèle (même à haute énergie dans les systèmes contraints).

## IV.6. Modélisation des propriétés de transport de gaz de trous par la formule de Kubo-Greenwood

### IV.6.1. Présentation de la problématique

Dans un transistor à effet de champ, un gradient de potentiel de grille proche de l'interface Si/SiO<sub>2</sub> suffisamment fort forme un puit quantique de type triangulaire (voir Figure IV.20). Les porteurs de charges sont donc quantifiés selon la direction de la normale à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. Le mouvement des électrons est donc considéré libre dans les directions transverses au confinement. Le transport des charges s'opère dans un espace réciproque à deux dimensions. Les équations de transport et les taux d'interaction doivent être modifiés pour prendre en compte cette quantification.

Dans cette section, nous étudions les propriétés de transport d'une couche d'inversion dans le Silicium contraint<sup>16</sup>. L'altération de la structure de bandes par la contrainte est calculée à l'aide de la méthode  $k.p$  6 bandes. Cette structure de bandes est par la suite intégrée dans le simulateur de transport Kubo-Greenwood.

Un premier ensemble de simulations utilise la structure de bandes du Silicium massif. Les effets de confinement dans la couche d'inversion sont inclus dans un second ensemble de simulations par le couplage auto-cohérent de la structure de bandes du  $k.p$  6 bandes avec l'équation de Poisson.

### IV.6.2. Formule de transport Kubo-Greenwood

Nous avons vu que l'estimation des courants dans le régime linéaire Ilin par la méthode Monte Carlo nécessite des temps de calcul plus importants que dans le régime de saturation (voir chapitre III). En outre, les simulateurs Monte Carlo "classique" ne prennent pas en compte les effets de confinement. Nous présentons dans cette section, un modèle de transport Kubo-Greenwood "Full band" appliqué au cas d'une couche d'inversion de gaz 2D de trous. Ce modèle de Kubo-Greenwood a été développé au cours de cette thèse [46]. Comme pour les simulations Monte Carlo, ce modèle nécessite l'apport d'une structure de bandes tabulée. Cette dernière est calculée de façon auto-cohérente en couplant la structure de bandes  $k.p$  avec l'équation de Poisson.

#### IV.6.2.1. Transport des trous sous confinement

Cette partie quantifie l'impact des taux d'interaction et du confinement sur les propriétés de transport des trous dans les pMOSFETs. A cette fin, la mobilité est calculée avec la formule de Kubo-Greenwood, démontrée en chapitre I, adaptée au gaz de trous 2D [47]:

$$\mu \cdot \vec{E} = \frac{|q|}{(2\pi)^2 p_s k_B T} \sum_n \int_{ZB} \tau_n(k) \vec{v}_n(k) \times \vec{v}_n^\dagger(k) f_0(1-f_0) dk^2 \cdot \vec{E} \quad \text{Eq-IV.22}$$

où  $f_0$  est la distribution de Fermi-Dirac des trous,  $v_n$  et  $\tau_n(k)$  sont respectivement la vitesse et le temps de relaxation total des sous-bandes  $n$ . Le temps de relaxation total s'obtient par la loi de Mathiessen.

Dans ce travail, les mécanismes de relaxation pris en compte dans les simulations Kubo-Greenwood sont limités aux interactions trous-phonons (acoustiques élastiques et optiques non polaires inélastiques). En effet, comme souligné par [48], ces couplages sont les mécanismes déterminants des MOSFETs planaires. Les taux de relaxation sont calculés à partir des expressions de

<sup>16</sup>Les simulations présentées dans ce chapitre ne sont pas des simulations de dispositifs dans leur ensemble (avec par exemple la prise en compte des zones de source/drain).

Fischetti [11] pour chaque niveau  $n$ . Ces formules se basent sur des approximations isotropiques [47]:

- En ce qui concerne les taux d'interaction avec les phonons acoustiques:

$$\frac{1}{\tau_n^{acou}(k)} = \frac{2\pi k_B T (\Xi_{eff})^2}{h\rho u_l^2} \sum_m F_{nm} g_m(E_m(k) - \Delta E_{mn}) \quad \text{Eq-IV.23}$$

où  $g_n(E)$  est la densité d'états à l'énergie  $E$ ,  $\Delta E_{mn}$  est l'écart énergétique entre deux niveaux,  $\rho$  est la densité du cristal,  $u_l$  est la vitesse longitudinale et  $\Xi_{eff}$  est le potentiel de déformation acoustique.

Enfin,  $F_{mn}$  correspond à l'intégrale de recouvrement entre les niveaux  $n$  et  $m$ . Cette intégrale s'exprime en ne considérant que les fonctions d'onde  $\psi_0(z)$  de chaque niveau en  $k = 0$  [11]<sup>17</sup>:

$$F_{nm} = \int_0^W dz |\psi_0^n(z) \psi_0^{m\dagger}(z)|^2 \quad \text{Eq-IV.24}$$

où  $z$  est la position dans la couche d'inversion et  $W$  est l'épaisseur à partir de laquelle les structures de bandes sont calculées.

- En ce qui concerne les taux d'interaction des phonons optiques non polaires:

$$\frac{1}{\tau_n^{opt}(k)} = \frac{\pi D_{opt}}{\rho \omega_{op}} \sum_m \left( N_p + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) F_{nm} g_m(E_n(k) \mp h\omega_{op} - \Delta E_{mn}) \frac{1 - f_0(E_n(k) \mp h\omega_{op})}{1 - f_0(E_n(k))} \quad \text{Eq-IV.25}$$

où  $\omega_{op}$  est la pulsation du phonon optique polaire,  $N_p$  est l'occupation des phonons et  $D_{op}$  est le potentiel de déformation optique non polaire.

Les valeurs des potentiels, ainsi que de la vitesse longitudinale du son dans la direction  $\langle 110 \rangle$ , utilisées dans ces taux d'interaction proviennent de Wang et al. [22]. Ces valeurs sont reportées en Tableau IV.1.

**Tableau IV.1:** Paramètres des taux d'interaction trous-phonons issus de Wang et al. [22].

Paramètres (unités)	Valeurs
$u_l$ (m/s)	9180
$\Xi_{eff}$ (eV)	9,64
$D_{op}$ ( $10^8$ eV/cm)	12,72
$h\omega_{op}$ (meV)	65

Durant la simulation, le tenseur de mobilité est calculé en utilisant un maillage  $100 \times 100$  de points  $k$  appartenant à l'intervalle  $[-0.25, 0.25] \times 2\pi/a$ . Toutes les sous-bandes dont les fractions d'occupation excédant  $10^{-4}$  ont été prises en compte.

<sup>17</sup>L'approximation, inspirée de la Ref. [11], consiste à négliger la dépendance des fonctions d'onde  $\psi_k(z)$  au vecteur d'onde  $k$ . Comme souligné par l'auteur, ces approximations ne reposent sur aucune considération physique. Cette approximation n'a pour unique but que d'alléger la charge numérique des calculs. Les erreurs numériques liées à cette approximation restent relativement faibles [11].

### IV.6.2.2. Utilisation de la formule Kubo-Greenwood

La formule Kubo-Greenwood permet une estimation rapide de la densité de courant à faible champ. En revanche, cette approche est à proscrire dans l'estimation des courants dans les dispositifs courts soumis à de fortes différences de potentiel. En effet, intrinsèquement, cette méthode ne tient pas compte des effets physiques liés aux régimes de transport hors équilibre (non stationnaire et quasi-balistique, voir Section III.2.3.2. du chapitre III).

La formule Kubo-Greenwood, à l'instar de la méthode Monte Carlo, est un outil qui assure la liaison entre la structure de bandes modifiée par la contrainte (et éventuellement par le confinement) et son impact sur le transport du système. Elle tient compte des interactions microscopiques entre les porteurs de charge et leur environnement.

Les simulations Kubo-Greenwood 3Dk et 2Dk présentées dans ce manuscrit sont obtenues en utilisant deux ensembles de structures de bandes issues des calculs de la méthode  $k.p$  6 bandes: 3D d'un matériau massif (voir chapitre I, [17]); 2D d'un matériau sous confinement lié à un potentiel extérieur (développement sur la base des fonctions enveloppes, Section IV.2., [2]).

La prise en compte d'une structure de bandes 2D, issue d'un couplage auto-cohérent avec l'équation Poisson, est une condition indispensable à la bonne précision des simulations Kubo-Greenwood de couches d'inversion. Il doit être mentionné que les approches publiées antérieurement à ces travaux, à la notable exception de [48], n'utilisent pas de tels schémas dans leurs calculs de mobilité [11][22][27]. Le niveau de Fermi est alors simplement ajusté afin de conserver une densité d'inversion constante. La Figure IV.37 explique schématiquement la mise en place de l'auto-cohérence adaptée de la méthode de Trellakis et al. [49]. La convergence pour une couche d'inversion d'un pMOSFET est atteinte après 10 mn de calcul sur Opteron de 2.3 GHz.

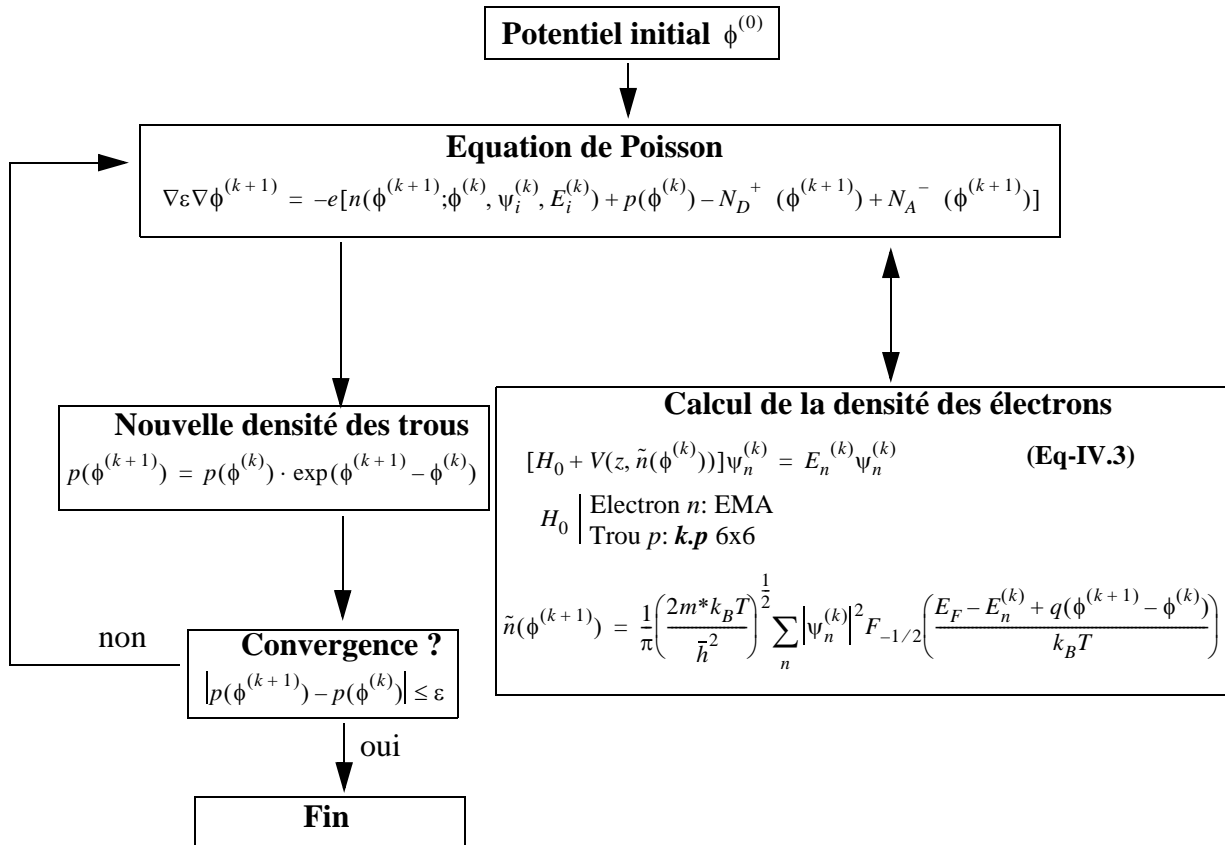
Enfin, les résultats des simulations Kubo-Greenwood d'un gaz 2D de trous, issus de la formule Eq-IV.22, concernent la mobilité dans une couche d'inversion. Le calcul du couplage  $k.p$ -Poisson-Schrödinger est 1D. En effet, le profil du potentiel n'est estimé que dans la direction transverse à l'interface  $SiO_2$ . Par ailleurs, ce potentiel est supposé invariant par translation le long du canal. L'influence de la structure complète d'un dispositif MOSFET (zone de source, drain, extensions,...) n'est donc pas prise en compte par un couplage  $k.p$ -Poisson-Schrödinger. Les calculs Kubo-Greenwood de ce manuscrit sont donc valides dans le cas d'un MOSFETs de longueur de canal infini.

### IV.6.3. Application du couplage auto-cohérent $k.p$ -Poisson-Schrödinger à une structure MOSFET.

Les calculs sont appliqués aux couches d'inversion de deux architectures de transistors de type  $p$ :

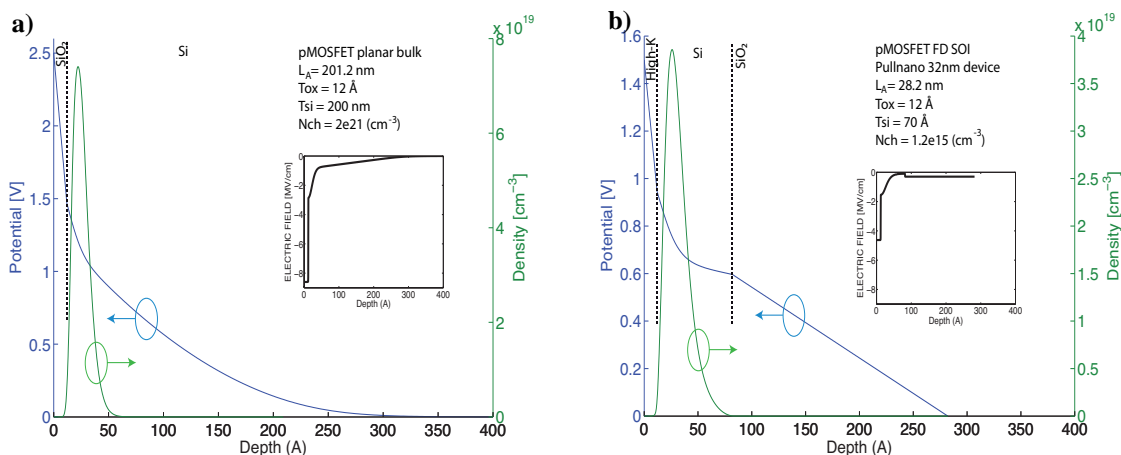
- Un dispositif pMOSFET Bulk dont l'épaisseur d'oxyde  $SiO_2$  est  $T_{ox} = 1.2$  nm. Le dopage canal est simulé à  $N_{ch} = 2 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .
- Un dispositif FD SOI de référence conforme aux spécifications du délivrable D6451 du projet européen PULLNANO [50]. La structure pMOS simulée est similaire à celle du dispositif de type  $n$  présenté dans le projet européen. Le dispositif est constitué d'une couche de Silicium de  $T_{Si} = 7$  nm encastrée par l'oxyde de grille ( $T_{ox} = 1.2$  nm) et par un substrat de  $SiO_2$ . Le dopage canal est simulé à  $N_{ch} = 1.2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

La densité de charge et la valeur du potentiel dans la direction transverse au plan du transport sont respectivement tracées en Figure IV.38 a) et Figure IV.38 b) pour les deux architectures de



**Figure IV.37:** Procédure de convergence du  $k.p$ -Poisson-Schrödinger adaptée du schéma de convergence prédictor/correcteur [49]. En première étape, le nouveau potentiel  $\phi^{(k+1)}$  calculé est à la fois présent dans l'équation de Poisson et dans l'expression de la densité des électrons. Dans une seconde étape, ce nouveau potentiel est introduit dans l'estimation de la nouvelle densité des trous  $p(\phi^{(k+1)})$ . Au final, la convergence est atteinte lorsque la différence de la densité des trous entre deux itérations est inférieure à une valeur  $\varepsilon$ .  $N_D^+$  et  $N_A^-$  correspondent aux concentrations des ions donneurs et accepteurs.  $E_n^{(k)}$  et  $\psi_n^{(k)}$  sont les valeurs et les vecteurs propres de l'Hamiltonien total à l'itération  $k$ .

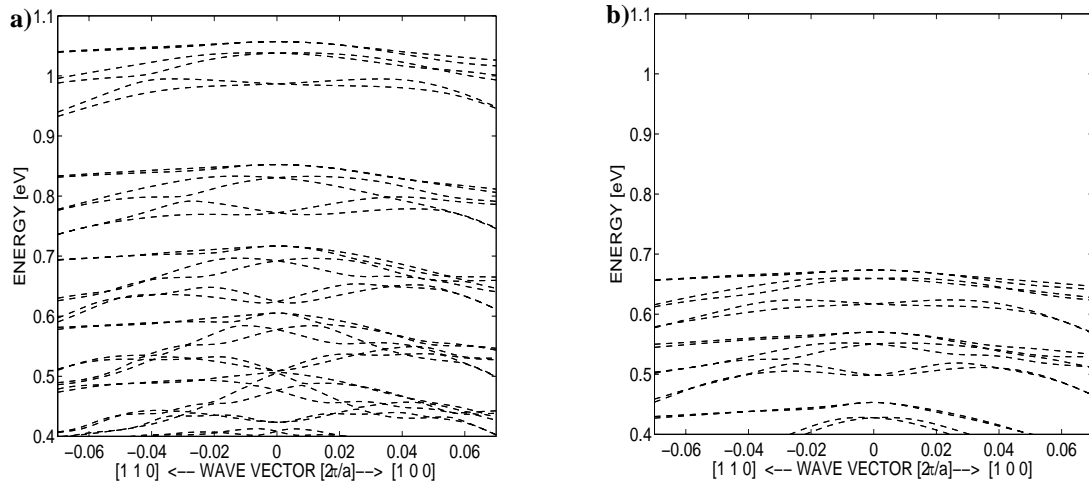
transistors pMOSFET planaire et FD SOI. Les valeurs de champ électrique dans la profondeur du canal sont également reportées. Dans les deux configurations, nous observons nettement l'espace vide de charges à proximité de l'interface Si/oxyde de grille. Cette espace vide est à l'origine du décalage de la tension de seuil  $V_{th}$  dans les dispositifs sous confinement (voir Section I.4.2.4. du chapitre I).



**Figure IV.38:** Profils de la densité de porteurs de charge et du potentiel dans la direction transverse au plan de transport d'un pMOSFET pour deux architectures de transistors **a)** planaire et **b)** FD SOI. Ces profils sont issus du couplage  $k.p$ -Poisson-Schrödinger. Le profil du champ électrique dans la profondeur du canal est également reporté.

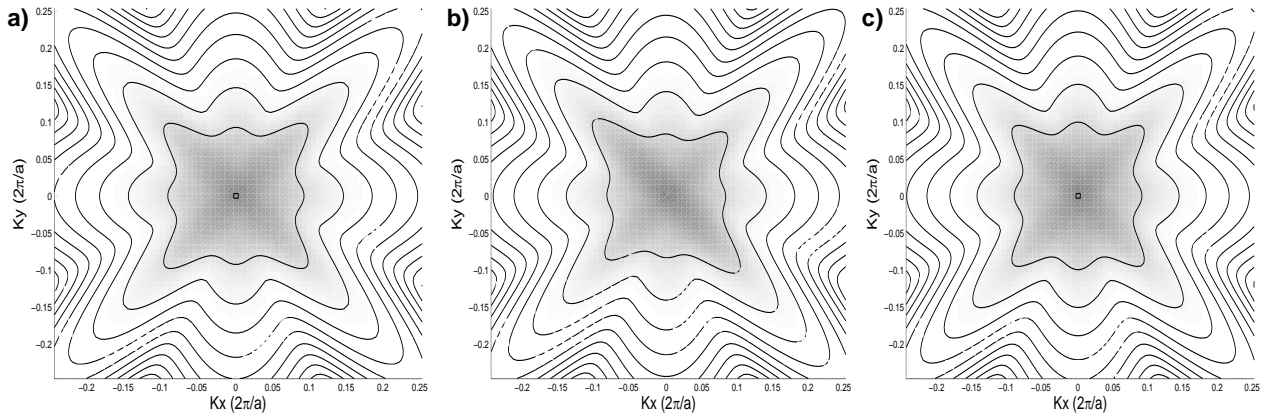


Le profil de potentiel électrique, issu du couplage auto-cohérent, permettent de calculer les structures de bandes du Si confiné dans le canal dans les deux architectures pMOSFET planaire et FD SOI (respectivement Figure IV.39 a) et Figure IV.39 b).



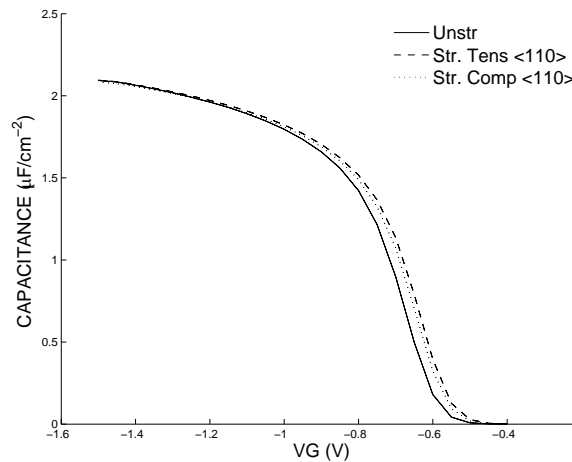
**Figure IV.39:** Relations de dispersion des premières sous-bandes de valence le long des directions  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  dans les transistors pMOSFETs **a)** planaire et **b)** FD SOI. Ces relations de dispersion ont été calculées à partir des profils de potentiel montrés en Figure IV.38, issus du couplage auto-cohérent  $k.p$ -Poisson-Schrödinger. Modèle  $k.p$  6 bandes (tirets).

Des contours isoénergies, séparés de 40meV, de la première bande de valence sont montrés en Figure IV.40 dans le cadre de la structure planaire pMOSFET. Ces contours sont tracés dans les configurations relaxée et sous contrainte compressive de 200MPa dans les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ .



**Figure IV.40:** Contours des isoénergies séparés de 40mV de la première bande de valence 2D sous confinement (1MV / cm) et **a)** non contrainte, mais aussi pour des contraintes de 200 MPa compressives appliquées dans les directions **b)**  $\langle 110 \rangle$  et **c)**  $\langle 100 \rangle$ . Les zones ombragées représentent la distribution de Fermi de la densité des porteurs de charge  $f_0(k)$ .

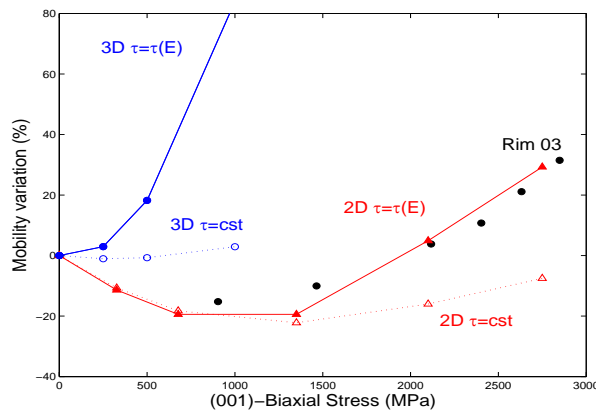
A titre d'exemple, les capacités du dispositif pMOS PULLNANO FD SOI, issues du couplage auto-cohérent sont montrées en Figure IV.41 en fonction de la tension de grille appliquée. Les configurations relaxées et sous contraintes uniaxiales compressive et tensile dans la direction  $\langle 110 \rangle$  ont été prises en compte.



**Figure IV.41:** Capacités du dispositif pMOS PULLNANO FD SOI de 32nm de longueur de grille à l'état relaxé et sous contraintes compressive et tensile  $\langle 110 \rangle$  de 2GPa.

#### IV.6.4. Transport des trous dans une couche d'inversion sous contrainte biaxiale

La Figure IV.42 présente les variations de mobilité calculées en fonction de contraintes biaxiales tensiles dans le plan cristallographique (001). Les simulations, utilisant les approches 3Dk et 2Dk, sont comparées aux expériences de Rim et al. [23]. Les symboles liés fermés représentent les solutions obtenues avec des temps de relaxation dépendant de l'énergie  $E(k)$ . Les variations de mobilité sous contrainte liées aux gains de masse effective sont étudiées en considérant des temps de relaxation constants (symboles ouverts).



**Figure IV.42:** Variations de mobilité sous contraintes tensiles biaxiales: les triangles correspondent aux simulations 2Dk; les cercles bleus correspondent aux simulations 3Dk; les cercles fermés noirs correspondent aux expériences de Rim et al. [23]; les symboles ouverts se réfèrent aux simulations avec les temps de relaxation constants; les symboles fermés se rapportent aux simulations avec les temps de relaxation  $\tau$  dépendants de l'énergie. Le champ électrique appliqué est de  $|E| = 1 \text{ MV/cm}$ .

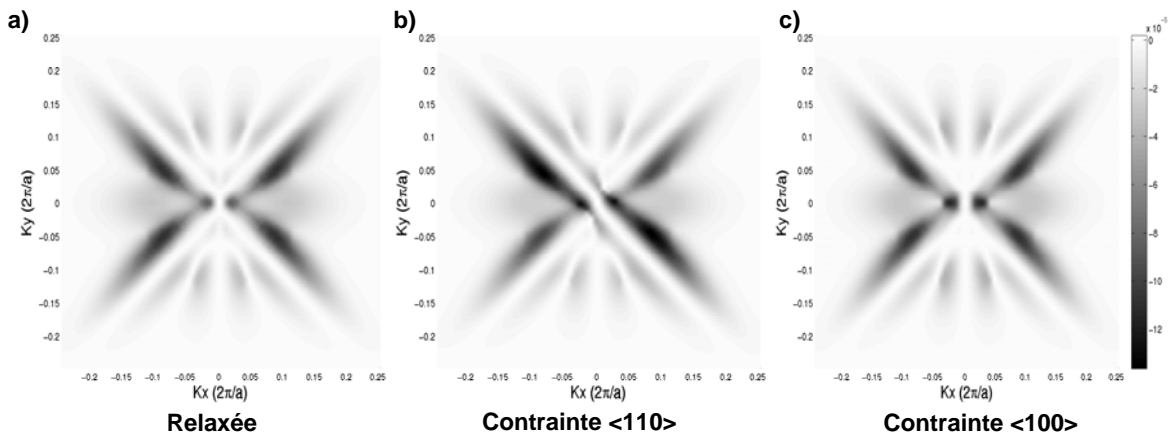
Avec l'utilisation d'une structure de bandes 3D, les prédictions du modèle Kubo-Greenwood dans les couches d'inversion présentent de larges déviations par rapport à l'expérience de Rim et al. [23]. Les simulations du gaz de trous 3D (cercles bleus) surestiment la réduction des taux d'interaction induite par la levée de dégénérescence avec la contrainte et sous-estiment les effets de la modification des structures de bandes. Donc, les simulations utilisant des structures de bandes 3D échouent à reproduire la décroissance de la mobilité expérimentale dans les cas spécifiques de contraintes biaxiales faibles.

Avec l'utilisation d'une structure de bandes 2D, la chute de mobilité jusqu'à des contraintes d'environ 1GPa est principalement due à la modification des structures de bandes 2D (triangles ouverts). Ces conclusions ont de même été soulignées par Wang et al. [22]. Les effets des interactions intervallées deviennent uniquement importants à de fortes valeurs de contrainte (triangles fermés). En effet, la contrainte biaxiale tensile réduit l'écart entre les deux premières bandes de valence<sup>18</sup>. Les interactions intervallées ne sont pas réduites de façon drastique comme dans le cas du gaz 3D. Par ailleurs, nous avons une variation de la structure de bandes. En Figure IV.24 a), dans le cas idéal de contrainte avec  $\varepsilon_{xx} = 0$  et  $\varepsilon_{zz} = -0,006$ , une inversion de courbe est même visible dans la zone proche du centre de zone  $\Gamma$ . Pour de faibles contraintes biaxiales dans le plan (001), la forte variation de la masse non prise en compte dans les simulations Kubo-Greenwood 3D, engendre une baisse de la mobilité des trous dans les couches d'inversion. Pour des intensités supérieures de contrainte, les couplages interbandes s'affaiblissent et les interactions intervallées se réduisent.

## IV.6.5. Transport des trous dans une couche d'inversion sous contrainte uniaxiale

### IV.6.5.1. Intégrandes

Les intégrandes de l'Eq-IV.22 dans la direction de transport  $\langle 110 \rangle$  sont représentées en Figure IV.43 a) dans le cas non contraint, ainsi qu'en Figure IV.43 b) et Figure IV.43 c) dans les cas de contraintes en compression  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  à 200MPa. La cartographie de l'intégrande permet de localiser la contribution de chaque zone de l'espace réciproque à la mobilité.



**Figure IV.43:** Intégrandes de la mobilité ( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) de la première sous-bande de valence dans le cadre de gaz de trous 2D de la couche confinée Si **a)** relaxée et sous contraintes compressives de 200 MPa dans les directions **b)**  $\langle 110 \rangle$  et **c)**  $\langle 100 \rangle$ . Les régions grisées correspondent aux régions de plus forte mobilité.

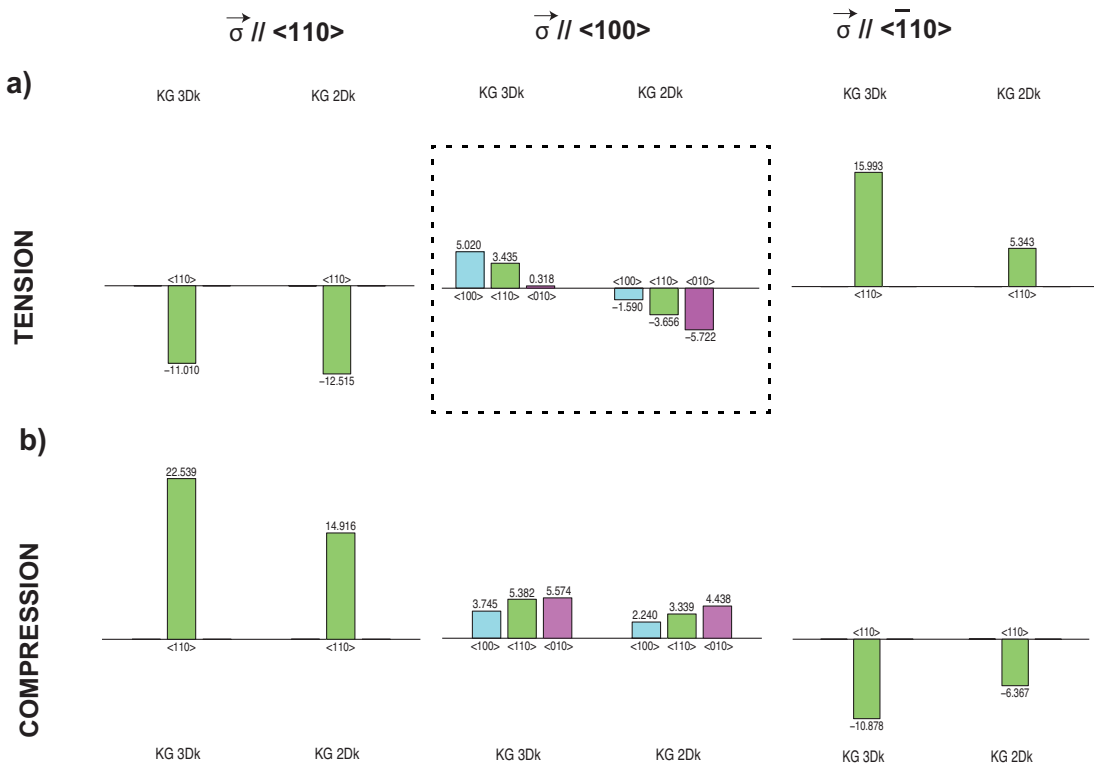
Notons la forte perturbation de l'intégrande occasionnée par la contrainte  $\langle 110 \rangle$ . Pour cette contrainte, nous observons que ce sont principalement les "lobes" dirigés selon les directions  $\langle \bar{1}10 \rangle$  qui contribuent à la mobilité.

D'autre part, il est intéressant de souligner que la contribution à la mobilité ne s'effectue pas au point  $\Gamma$  (les zones les plus grisées ne se situant pas en  $k = 0$   $2\pi/a$ ). De fait, les porteurs de charge contribuant au transport sont principalement localisés dans les zones d'énergie proches de  $kT$ . La faible participation à la mobilité des porteurs de charge à proximité du point  $\Gamma$  peut être liée avec le principe d'exclusion de Pauli.

<sup>18</sup>Une réduction significative entre les deux premières bandes de valence qui ne se produira pas sous contrainte uniaxiale comme expliqué en Section IV.6.5..

### IV.6.5.2. Variation de mobilité

Les variations de mobilité dans une couche d'inversion d'un pMOSMETs sous contraintes en compression et tension sont montrées en Figure IV.44. Nous avons simulé les trois cas de contrainte  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  pour une orientation de canal  $\langle 110 \rangle$ . Par ailleurs, les directions de canal  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$  ont été prises en considération dans le cas des contraintes  $\langle 100 \rangle$ . Les mobilités sont calculées à l'aide d'un simulateur Kubo-Greenwood utilisant des structures de bandes 2D (voir Section IV.6.2.). Afin de comparer les propriétés de transport dans une couche d'inversion confinée avec celles dans un matériau massif, nous montrons également les calculs Kubo-Greenwood effectués à l'aide de structures de bandes 3D.



**Figure IV.44:** Variations de mobilité dans une couche d'inversion de trous en fonction de contraintes **a)** tensile et **b)** compressive pour des directions de contrainte  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  de 200 MPa. Le champ effectif appliqué dans la structure est de 1MV / cm. Pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , la direction de canal  $\langle 110 \rangle$  (vert) est prise en compte. Dans le cas de la contrainte  $\langle 100 \rangle$ , les directions de canal  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  (bleu) et  $\langle 010 \rangle$  (magenta) sont prises en compte. Le cadre en pointillés souligne la différence qualitative de comportement entre les simulations 2Dk et 3Dk utilisant respectivement des structures de bandes 2D et 3D.

Quelques remarques peuvent être évoquées sur les variations de mobilité en fonction de la contrainte:

- En ce qui concerne les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , les comportements des variations de mobilité issues des simulations Kubo-Greenwood 3Dk et 2Dk sont similaires bien que des différences sur l'amplitude soient observables.

- En ce qui concerne la contrainte  $\langle 100 \rangle$ , il est important de remarquer que dans le cas de contrainte tensile  $\langle 100 \rangle$ , les variations de mobilité calculées par le Kubo-Greenwood sont qualitativement différentes si la structure de bandes associée au calcul est 3D ou 2D. Si la structure de bandes prise en compte est 3D, nous observons une augmentation de la mobilité à la fois pour les contraintes compressive et tensile, quelque soit la direction du canal. Les simulations associées à la structure de bandes 2D sous confinement montrent une diminution continue de la variation de mobilité en fonction de la contrainte: dans le cas du canal  $\langle 110 \rangle$ , la mobilité augmente sous compression (la variation de mobilité est de 3,4% pour une contrainte compressive de -200MPa). Le comportement opposée est observé sous tension (la variation de mobilité est de -3,6% pour une contrainte tensile de 200MPa).

### IV.6.5.3. Analyse

Les propriétés de transport sous contrainte des gaz 2D et 3D des trous doivent être considérées sur l'ensemble de la région proche du point  $\Gamma$  [22].

Les variations de la mobilité calculées à partir de structures de bandes 3D sont conformes aux attentes théoriques formulées en chapitre II. Pour les cas de contrainte  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , une forte similitude existe entre la variation de la moyenne thermique de l'inverse de masse de courbure et les variations de mobilité dans la direction de transport  $\langle 110 \rangle$  (voir chapitre II, Figure II.42)<sup>19</sup>. Remarquons qu'un accroissement marqué de la mobilité pour un canal  $\langle 110 \rangle$  est observé sous contraintes compressive et tensile  $\langle 100 \rangle$ , non reproduit par la moyenne thermique de l'inverse de la masse. En effet, ces variations attestent d'une forte variation des taux d'interaction en fonction de la contrainte. Ces derniers jouent également un rôle prépondérant dans les propriétés de transport.

Les variations de mobilité des gaz 2D sous contrainte sont en adéquation avec les variations des moyennes thermiques de l'inverse des masses de courbure en fonction des contraintes uniaxiales pour une direction de transport  $\langle 110 \rangle$  (voir Figure IV.29). Cette analogie est particulièrement remarquable dans le cas de contrainte tensile  $\langle 100 \rangle$ , à l'encontre des simulations 3Dk. Ceci dénote la forte influence des masses de courbure dans les propriétés de transport des systèmes confinés.

Finalement les variations de mobilité sont principalement dues à une redistribution des porteurs de charges au grès de la modification des branches de la sous-bandes hh<sup>20</sup>. Les porteurs se répartissent principalement dans les branches dont les densité d'états sont les plus élevées. La mobilité va fortement dépendre des courbures de bande dans la direction du transport des bandes les plus fortement occupées.

Cette description est particulièrement valable pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  pour lesquelles les porteurs de charges vont se répartir différemment entre les paires branches P1-P3 et P2-P4 dont les valeurs des masses de courbures dans la direction  $\langle 110 \rangle$  sont plus ou moins élevées (voir Figure IV.40). Notons pour la contrainte compressive  $\langle 110 \rangle$ , la forte corrélation entre la cartographie des intégrandes (Figure IV.43) et la redistribution des porteurs de charge dans les lobes de faibles masses de courbure  $\langle 110 \rangle$  observé en Figure IV.40. L'augmentation de la mobilité n'en est que davantage renforcée.

La variation de mobilité dans la direction  $\langle 110 \rangle$  sous contrainte  $\langle 100 \rangle$  est impactée par la modification des branches hors plans  $(H1, \dots, H4)^{21}$ . Ces dernières présentent une large courbure de bande sous tension. L'ensemble de ces caractéristiques va contribuer à la détérioration de la mobilité sous contrainte  $\langle 100 \rangle$  tensile.

## IV.7. Discussion sur le Transport des électrons dans les couches d'inversion sous contrainte

Nous avons observé que les valeurs de la masse effective de courbure des vallées  $\Delta_z$  en fonction de contraintes  $\langle 110 \rangle$  et du confinement (Figures IV.36 a) et b)) peuvent être scindées en deux parties distinctes. Pour des faibles valeurs de confinement, la variation des masses de transport

<sup>19</sup>Voir également l'ANNEXE II.C du chapitre II, les contraintes uniaxiales perturbent fortement les branches P1...P4 et H1...H8 des bandes hh.

<sup>20</sup>En effet, quelle que soit la contrainte uniaxiale appliquée, les premières sous-bandes sont bien séparées par le confinement en fonction de la déformation (voir Figure IV.30). La première sous-bande a donc une importance cruciale dans l'étude des propriétés de transport.

<sup>21</sup>Les branches dans le plan P1, ..., P4 sont modifiées de manière similaire aussi bien pour des contraintes compressives que tensiles selon la direction  $\langle 100 \rangle$ .

des vallées  $\Delta_z$  est similaire à celle des matériaux massifs (voir Section IV.4.3.2., Figure IV.33). Pour de fortes valeurs de confinement, nous observons une variation marquée de la masse effective.

Les variations des propriétés de transport à faible champ effectif, essentiellement liées aux vallées  $\Delta_z$  sur une large gamme de contrainte (Figure IV.33 a)), d'un gaz 2D d'électrons sont donc attendues ne pas fortement différer de celle des matériaux massifs. Ainsi les simulations Monte Carlo "full band" de gaz 3D d'électrons sont justifiées dans l'étude des propriétés de transport dans un transistor nMOSFETs planaire (chapitre III) et leurs comparaisons à des données expérimentales de Wafer Bending (effectuées en chapitre V).

Toutefois, notons que les propriétés de transport à fort champ effectif d'un gaz 2D d'électrons sous contrainte sont largement discutées au sein de la communauté scientifique de la simulation. Les simulateurs Monte Carlo multi sous-bandes à "l'état de l'art" ne parviennent pas à reproduire les courbes expérimentales de mobilité effective sous contrainte à fort champ effectif [51][52][53]<sup>22</sup>. Les variations simulées sont plus faibles que celles observées expérimentalement. Rappelons que la mobilité à fort champ dans un transistor MOSFET est principalement liée aux interactions de rugosité de surface à l'interface Si / SiO<sub>2</sub> (Section I.1.3. du chapitre I). Afin de reproduire les variations de mobilité effective à fort champ effectif pour une majorité de configurations de contrainte, plusieurs solutions théoriques sont actuellement envisagées<sup>23</sup>:

- Une nouvelle calibration des potentiels de déformations associés aux interactions intervallées de type  $f$  des simulateurs afin de maximiser leur contribution et augmenter la variation de la mobilité à fort champ [51][52][53]. Toutefois, cette procédure ne semble pas être une solution satisfaisante puisqu'il ne possède qu'une étroite marge de manoeuvre au risque d'une modification profonde de l'ensemble des potentiels de déformation du simulateur [51][52][53]. Ceci afin de conserver une simulation qualitativement et quantitativement correcte de la mobilité effective dans la configuration relaxée. Par ailleurs, la calibration actuelle des simulateurs reproduisent correctement les variations expérimentale de mobilité sous contrainte uniaxiale  $\langle 100 \rangle$ , [52]<sup>24</sup>.
- Les simulations multi sous-bandes les plus avancées se basent sur le modèle d'interactions de rugosité de surface d'Ando [54][55]. Ces modèles tiennent compte des paramètres de longueur de corrélation  $\Lambda$  et de "hauteur de marche"  $\Delta$ . En synthétisant les données de la littérature, Fischetti et al. en sont venus à la supposition 'ad hoc' que les effets de contrainte pourraient réduire les interactions de rugosité de surface à l'interface Si / SiO<sub>2</sub>. Cette supposition est soutenue par Evans et al. qui ont étudié par la méthode *ab initio* DFT, les effets de contrainte sur le potentiel d'interaction de défauts présents à l'interface Si / SiO<sub>2</sub>. Tandis que la valeur du paramètre  $\Lambda$  semble être peu influencée par les effets de contrainte [51][56], une modification de la valeur  $\Delta$  semble être justifiée par l'altération du potentiel d'interaction [56]. Toutefois, les récentes simulations Monte Carlo multi sous-bandes restent réticentes à une modification de la valeur  $\Delta$  en fonction de la contrainte [52], contestant une modification de la rugosité de surface avec l'application de contrainte externe<sup>25</sup>. La pertinence de l'utilisation du modèle d'Ando dans ces configurations de contrainte peut être remise en

<sup>22</sup>. Bien que ce soit les outils de simulations les plus appropriés pour ces études.

<sup>23</sup>. Notons que Uchida et al. ont pu reproduire des données expérimentales de variations de mobilité sous contraintes uniaxiales, sur une large gamme de champ électrique effectif, à l'aide de l'équation de Boltz [39]. Toutefois, ce simulateur ne tient pas compte des interactions de rugosité de surface. Les résultats à fort champ effectif sont donc à considérer avec précaution.

<sup>24</sup>. Enfin, les valeurs des potentiels de déformation des simulateurs Monte Carlo sont déterminées au prix d'efforts significatifs [51].

<sup>25</sup>. Comparone et al. comparent leurs simulations de Monte Carlo multi sous-bandes à des données expérimentales de Wafer Bending (voir chapitre IV) [52]. Selon les auteurs, aucune preuve à l'heure actuelle ne permet de prouver que les structures cristallines à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> des configurations relaxé et contrainte par Wafer Bending soient différentes.

question.

- Les simulations Monte Carlo multi sous-bandes présentées dans la littérature utilisent des structures de bandes issues du modèle simple EMA afin d’alléger la charge des calculs numériques. Le confinement induit de larges décalages entre les sous-bandes. A partir d’un certain degré de confinement, les décalages “supplémentaires” engendrés par les effets de contrainte ne peuvent justifier une augmentation significative de la mobilité sous contrainte, même à fort champ [52]. Comparone et al. émettent l’hypothèse que le déplacement entre les sous-bandes dû au confinement serait plus faible si les simulations tiennent compte de structure de bandes sur l’intégralité de la PBZ [52]<sup>26</sup>. En effet, les couplages interbandes sont pris en compte dans des modèles plus évolués, tel que le modèle *k.p* 30 bandes EFA (Section IV.2.2.). Toutefois, nous avons démontré en Section IV.3.2.2. que les solutions du modèle EMA reproduisaient, sur l’ensemble des configurations de confinement présentées, le déplacement des sous-bandes de conduction obtenu par le modèle *k.p* 30 bandes EFA.

## IV.8. Conclusion sur l’étude des propriétés de transport dans les systèmes confinés

Dans le but d’étudier les propriétés de transport des trous dans les couches d’inversion, nous avons élaboré durant cette thèse un simulateur *k.p*-Poisson-Schrödinger à l’état de l’art. Il a été observé que le confinement introduit de larges modifications dans la description des structures de bandes.

Par la suite, des simulations de transport 2Dk et 3Dk, basées sur la formule de Kubo-Greenwood, nous ont permis de quantifier l’impact de la contraintes dans des gaz de trous 3D et 2D d’une couche d’inversion. Des variations de mobilités ont été obtenues pour des contraintes tensiles et compressives appliquées selon les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Les simulations 2Dk présentent une diminution de la mobilité pour de faibles valeurs de contraintes tensiles biaxiales (001) et uniaxiales  $\langle 100 \rangle$ , non reproduite par les simulations 3Dk. Au contraire, ces dernières présentent une augmentation de la mobilité pour ces valeurs de contrainte. Nous avons montré au cours de ce chapitre qu’une forte corrélation existe entre les variations de mobilité et les larges modifications des courbures de bande à proximité du point  $\Gamma$  de l’espace réciproque.

Finalement, dans le cadre des dispositifs Pullnano pMOSFETs FD SOI et planaires, les conditions usuelles de polarisation induisent un fort confinement des porteurs de charges. Il semble donc être crucial pour une modélisation quantitativement et qualitativement correcte du transport dans les pMOSFETs, que le confinement soit prise en compte. Cette approche sera validée en chapitre V où des variations de mobilité seront extraites de caractéristiques électriques des dispositifs MOSFETs contraints par la technique de *Wafer Bending*. Cette dernière technique présente l’avantage d’appliquer, sur les dispositifs étudiés, des contraintes homogènes à des valeurs parfaitement déterminées. Par ailleurs, la contribution des taux d’interaction intervallées dans la variation de la mobilité sous contrainte sera étudiée au cours de ce chapitre.

---

<sup>26</sup>Cette hypothèse tient son origine du fait que les simulations Monte Carlo de gaz 3D d’électrons, moins évoluées que celles multi sous-bandes, réussissent à reproduire les variations de mobilité sous contrainte. Or, ces simulations ne tiennent pas compte des effets de confinement. Le déplacement des extréma de bande est alors plus faible.

## Références

- [1] T. Skotnicki, "Silicon-On-Nothing Nanodevices", ESSDERC 2007: SINANO Workshop, 14 sept. 2007.
- [2] D. Rideau, M. Feraille, M. Michailat, Y. M. Niquet, C. Tavernier and H. Jaouen, "On the Validity of the effective mass approximation and the Luttinger  $k,p$  model in fully depleted SOI MOSFETs", Solid-State Electronics, vol.53, no.4, pp.452-46 2008.
- [3] B. A. Foreman, "Valence-band mixing in first-principles envelope-function theory", Physical Review B, vol.76, no.4, pp. 045327-045243 2007.
- [4] B. A. Foreman, "Effective-mass hamiltonian and boundary-conditions for the valence bands of semiconductor microstructures", Physical Review B, vol.48, no.7, pp. 4964-4967 1993.
- [5] S. De Franceschi, J. M. Jancu and F. Beltram, "Boundary conditions in multiband  $k,p$  models: A tight-binding test", Physical Review B, vol.59, no.15, pp. 9691-9694 1999.
- [6] J. M. Luttinger et W. Kohn, "Motion of Electron and Holes in Perturbed Periodic Fields", Physical Review, vol.97, no.4, pp. 869-883 1955.
- [7] D. Esseni and P. Palestri, "Linear combination of bulk bands method for investigating the low-dimensional electron gas in nanostructured devices", Physical Review B, vol.72, no.16, pp.165342-165356 2005.
- [8] L. W. Wang and A. Zunger, "Pseudopotential-based multiband  $k,p$  method for similar to 250000-atom nanostructure systems", Physical Review B, vol.54, no.16, pp. 11417-11435 1996.
- [9] G. Bastard, "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", (les Editions de Physique, les Ulis,1988).
- [10] B. A. Foreman, "Exact effective-mass theory for heterostructures", Physical Review B, vol.52, no.16, pp. 12241-12259 1995.
- [11] M. V. Fischetti, Z. Ren, P. M. Solomon, M. Yang and K. Rim, "Six-band  $k,p$  calculation of the hole mobility in silicon inversion layers: Dependence on surface orientation, strain, and silicon thickness", Journal of Applied Physics, vol.94, no.2, pp. 1079-1095 2003.
- [12] R. G. Veprek, S. Steiger and B. Witzigmann, "Ellipticity and the spurious solution problem of  $k,p$  envelope equations", Physical Review B, vol.76, no.16, pp.165320-165329 2007.
- [13] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers", Physical Review B, vol.48, no.4, pp. 2244-2274 1993.
- [14] S. Richard, F. Aniel and G. Fishman, "Band diagrams of Si and Ge quantum wells via the 30-band  $k,p$  method", Physical Review B, vol.72, no.24, pp. 245316-245323 2005.
- [15] S. Richard, *Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques*. Thèse de doctorat: Discipline Physique, Paris XI, Orsay, 2004.
- [16] M. Feraille, D. Rideau, C. Tavernier and H. Jaouen, "Electronic bandstructure of two dimensional strained semiconductor", GDR Nano, Journée - Simulation et Caractérisation , pp.11 2006.
- [17] D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini, M. Minondo, C. Tavernier, H. Jaouen and A. Ghetti, "Strained Si, Ge, and Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> alloys modeled with a first-principles-optimized full-zone  $k,p$  method", Physical Review B, vol.74, no.19, pp. 195208-195228 2006.
- [18] K. Huet, M. Feraille, D. Rideau, R. Delamare, V. Aubry-Fortuna, M. Kasbari, S. Blayac, C. Rivero, A. Bournel,



- C. Tavernier, P. Dollfus and H. Jaouen, "Experimental and theoretical analysis of transport in uniaxially strained pMOSFETs", ESSDERC 2008: Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference, pp. 234-237 2008.
- [19] G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel, "Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium", *Physical Review*, vol.98, no.2, pp. 368-384 1955.
- [20] E. Pikus and G. L. Bir, "Effect of deformation on the hole energy spectrum of germanium and silicon", *Soviet Physics - Solid State*, vol.1, pp. 1502-1517 1959, [*Fiz. Tverd. Tela* 1, pp.1642 1959].
- [21] Y. M. Niquet, D. Rideau, C. Tavernier, H. Jaouen and X. Blase, "Model for the on-site matrix elements of the tight-binding hamiltonian of a strained cristal: Application to silicon germanium and alloys", Submitted to *Physical Review B*, arXiv:0902.0491, 2009.
- [22] E. X. Wang, P. Matagne, L. Shifren, B. Obradovic, R. Kotlyar, S. Cea, M. Stettler and M. D. Giles, "Physics of hole transport in strained silicon MOSFET inversion layers", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.53, no.8, pp. 1840-1851 2006.
- [23] K. Rim, J. Chu, H. Chen, K. A. Jenkins, T. Kanarsky, K. Lee, A. Mocuta, H. Zhu, R. Roy, J. Newbury, J. Ott, K. Petrarca, P. Mooney, D. Lacey, S. Koester, K. Chan, D. Boyd, M. Leong and H. S. Wong, "Characteristics and device design of sub-100 nm strained si n- and pMOSFETs", 2002 Symposium on VLSI Technology, Digest of Technical Papers, pp. 98-99 2002.
- [24] M. L. Lee, E. A. Fitzgerald, M. T. Bulsara, M. T. Currie and A. Lochtefeld, "Strained Si, SiGe, and Ge channels for high-mobility metal-oxide-semiconductor field-effect transistors", *Journal of Applied Physics*, vol.97, no.1, pp. 011101-011128 2005.
- [25] C. K. Maiti, L. K. Bera and S. Chattopadhyay, "Strained-Si heterostructure field effect transistors", *Semiconductor Science and Technology*, vol.13, no.11, pp. 1225-1246 1998.
- [26] H. Irie, K. Kita, K. Kyuno and A. Toriumi, "In-plane mobility anisotropy and universality under uni-axial strains in n- and p-MOS inversion layers on (100), (110), and (111) Si", *IEEE International Electron Devices Meeting 2004*, Technical Digest, pp. 225-228 2004.
- [27] S. E. Thompson, G. Y. Sun, Y. S. Choi and T. Nishida, "Uniaxial-process-induced strained-si: Extending the CMOS roadmap", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.53, no.5, pp. 1010-1020 2006.
- [28] E. Batail, S. Monfray, D. Rideau, M. Szczap, N. Loubet, T. Skotnicki, C. Tabone, J. M. Hartmarm, S. Borel, G. Rabille, J. F. Damlencourt, B. Vincent, B. Previtali, L. Clavelier, M. Bescond and G. Ghibaudo, "Germanium-on-nothing (GeON): An innovative technology for ultrathin Ge film integration", *Essderc 2007: Proceedings of the 37th European Solid-State Device Research Conference*, pp. 450-453 2007.
- [29] D. Rideau, E. Batail, S. Monfray, C. Tavernier and H. Jaouen, "Modeling study of ultra-thin ge layers using tight-binding, LCBB and kp methods", *SISPAD 2007: Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2007*, pp. 145-148 2007.
- [30] Y. T. Hou and M. F. Li, "A simple and efficient model for quantization effects of hole inversion layers in MOS devices", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.48, no.12, pp. 2893-2898 2001.
- [31] F. Gilibert, *Modélisation des contraintes dans les dispositifs Si/SiGe basée sur l'analyse des structures de bandes*, Thèse de doctorat: Université de Provence, Ecole Doctorale Physique Modélisation et Sciences pour l'Ingénieur, 2005.
- [32] M. Friesen, S. Chutia, C. Tahan and S. N. Coppersmith, "Valley splitting theory of SiGe/Si/SiGe quantum wells", *Physical Review B*, vol.75, no.11, pp.115318-115330 2007.
- [33] J. van der Steen, D. Esseni, P. Palestri, L. Selmi and R. J. E. Huetting, "Validity of the parabolic effective mass approximation in silicon and germanium n-MOSFETs with different cristal orientations", *IEEE Transactions*

---

on Electron Devices, vol.54, no.8, pp. 1843-1851 2007.

- [34] C. Y. P. Chao and S. L. Chuang, "Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum-wells", Physical Review B, vol.46, no.7, pp. 4110-4122 1992.
- [35] S. Ito, H. Namba, K. Yamaguchi, T. Hirata, K. Ando, S. Koyama, S. Kuroki, N. Ikezawa, T. Suzuki, T. Saitoh and T. Horiuchi, "Mechanical stress effect of etch-stop nitride and its impact on deep submicron transistor design", International Electron Devices Meeting 2000, Technical Digest, pp. 247-250 2000.
- [36] A. Shimizu, K. Hachamine, N. Ohki, H. Ohta, M. Koguchi, Y. Nonaka, H. Sato and F. Ootsuka, "Local Mechanical-Stress Control (LMC): A new Technique for CMOS-Performance Enhancement", International Electron Devices Meeting 2001, Technical Digest, pp. 433-436 (2001).
- [37] C. Ortolland, *Etudes des effets des contraintes mécaniques induites par les procédés de fabrication sur le comportement électrique des transistors CMOS des noeuds technologiques 65 nm et en deçà*, Thèse de doctorat: Institut national des Sciences Appliquées de Lyon, 2006.
- [38] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique Tome 1 et 2*, (Edition Hermann, Paris, 1973).
- [39] K. Uchida, T. Krishnamohan, K. C. Saraswat and Y. Nishi, "Physical mechanisms of electron mobility enhancement in uniaxial stressed MOSFETs and impact of uniaxial stress engineering in ballistic regime", IEEE International Electron Devices Meeting 2005, Technical Digest, pp. 135-138 2005.
- [40] B. A. Foreman, "Accurate quadratic-response approximation for the self-consistent pseudopotential of semiconductor nanostructures", Physical Review B, vol.76, no.4, pp. 045326-045350 2007.
- [41] B. A. Foreman, "First-principles envelope-function theory for lattice-matched semiconductor heterostructures", Physical Review B, vol.72, no.16, pp.165345-165368 2005.
- [42] J. M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram and F. Bassani, "Empirical sp<sup>3</sup>d<sup>5</sup>s\* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters", Physical Review B, vol.57, no.11, pp. 6493-6507 1998.
- [43] M. Luisier, A. Schenk, W. Fichtner and G. Klimeck, "Atomistic simulation of nanowires in the sp(3)d(5)s(\*) tight-binding formalism: From boundary conditions to strain calculations", Physical Review B, vol.74, no.20, pp.205323-205335 2006.
- [44] D. Rideau, M. Feraille, M. Michailat, C. Tavernier and H. Jaouen, "Transport masses in strained silicon mosfets with different channel orientations", SISPAD 2008: International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, pp. 105-108 2008.
- [45] D. Rideau, Y. M. Niquet, S. Monfray, C. Tavernier and H. Jaouen, "Band Edge Alignment and Confined States in SiGe Based Quantum Wells", IWCE 2007: Proceedings of the 12<sup>th</sup> International Workshop on Computational Electronics, 201 (2007).
- [46] K. Huet, M. Feraille, D. Rideau, R. Delamare, V. Aubry-Fortuna, M. Kasbari, S. Blayac, C. Rivero, A. Bournel, C. Tavernier, P. Dollfus and H. Jaouen, "Experimental and theoretical analysis of transport in uniaxially strained pMOSFETs", ESSDERC 2008: Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference, pp.234-237 2008.
- [47] K. Huet, *Modélisation du transport sous contrainte mécanique dans les transistors sub-65nm pour la microélectronique CMOS*, Thèse de doctorat: Université Paris-Sud 11, Ecole Doctorale Sciences et Technologies de l'Information des Télécommunications et des Systèmes, Spécialité: Physique, 2008.
- [48] A. T. Pham, C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "Physics-based modeling of hole inversion-layer mobility in strained-SiGe-on-insulator", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.54, no.9, pp. 2174-2182 2007.
- [49] A. Trellakis, A. T. Galick, A. Pacelli and U. Ravaioli, "Iteration scheme for the solution of the two-dimensional

- schrodinger-Poisson equations in quantum structures", *Journal of Applied Physics*, vol.81, no.12, pp. 7880-7884 1997.
- [50] D. Rideau, A. Poncet and C. Tavernier, *Deliverable D6113*, Projet Européen PULLing the limits of NANOCMOS electronics [PULLNANO]: Subproject 6 / Workpackage 6.1 -TCAD Device Simulation.
- [51] M. V. Fischetti, F. Gámiz and W. Hänsch, "On the enhanced electron mobility in strained-silicon inversion layer", *Journal of Applied Physics*, vol.92, no.12, pp. 7320-7324 2002.
- [52] G. Comparone, P. Palestri, D. Esseni, L. Lucci and L. Selmi, "A Better Understanding of the Requirements for Predictive Modeling of Strain Engineering in nMOS Transistors", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol.5, no.6, pp. 1106-1114 2008.
- [53] D. Ponton, L. Lucci, P. Palestri, D. Esseni and L. Selmi, "Assessment of the Impact of Biaxial Strain on the Drain Current of Decanometric n-MOSFET", *ESSDERC 2006: Proceedings of the 36th European Solid-State Device Research Conference*, pp.166-169 2006.
- [54] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, "Electronic properties of two-dimensional systems", *Reviews of Modern Physics*, vol.54, no.2, pp. 437-672 1982.
- [55] D. Esseni, "On the modeling of surface roughness limited mobility in SOI MOSFETs and its correlation to transistor effective field", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol.51, no.3, pp. 394-401 2004.
- [56] M. H. Evans, M. Caussanel, R. D. Schrimpf and S. T. Pantelides, "First-Principles Modeling of Double-Gate UTSOI MOSFETs", *IEEE International Electron Devices Meeting 2005, Technical Digest*, pp. 600-603 2005.

## Simulateurs utilisés

- [57] UTOX: D. Rideau, M. Feraille, M. Michailat, Y. M. Niquet, C. Tavernier and H. Jaouen, "On the Validity of the effective mass approximation and the Luttinger  $k \cdot p$  model in fully depleted SOI MOSFETs", *Solid-State Electronics*, vol.53, no.4, pp.452-46 2008.
- [58] Kubo-Greewood, K. Huet, M. Feraille, D. Rideau, R. Delamare, V. Aubry-Fortuna, M. Kasbari, S. Blayac, C. Rivero, A. Bournel, C. Tavernier, P. Dollfus and H. Jaouen, "Experimental and theoretical analysis of transport in uniaxially strained pMOSFETs", *ESSDERC 2008: Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference*, pp.234-237 2008.

# **CHAPITRE V: Données expérimentales du transport dans les MOSFETs sous contraintes**



## **CHAPITRE V: DONNÉES EXPÉRIMENTALES DU TRANSPORT DANS LES MOSFETs SOUS CONTRAINTES**

### **V.1. Introduction**

Le modèle de piezorésistance est couramment utilisé dans les simulateurs de type Dérive-Diffusion. Ce modèle semi-empirique bien connu prédit les variations de mobilité dans les matériaux massifs ainsi que dans les dispositifs MOSFETs après ajustement des coefficients du modèle de piezorésistance. Ce chapitre s'inscrit dans une procédure de validation de ce modèle et d'extraction d'un nouvel ensemble de coefficients de piezorésistance directement utilisable dans le schéma fonctionnel industriel de la modélisation des dispositifs MOSFETs. Dans cette perspective, les objectifs de ce chapitre sont les suivants:

- Extraire un ensemble unique et cohérent de coefficients du modèle de piezorésistance.
- Confronter les variations des mobilités théoriques calculées à l'aide des simulateurs Kubo-Greenwood et Monte Carlo avec celles extraites des expériences de Wafer Bending.
- Analyser le modèle de piezorésistance sur la base de considérations effectuées sur le calcul de structures de bandes.

Les variations de mobilité dans une couche d'inversion sont extraites des variations de courant dans des MOSFETs sous l'application de trois contraintes uniaxiales complémentaires. Les mesures ont été effectuées à l'aide de la technique de flexion à quatre pointes de Wafer Bending sur des dispositifs nMOSFETs et pMOSFETs pour différentes orientations de canal. De ces données expérimentales, un jeu de coefficients de piezorésistance complet en est extrait.

Nous comparerons les simulations numériques de transport, présentées en chapitres III et IV, aux données expérimentales de Wafer Bending. Nous démontrerons la cohérence des simulations numériques en comparaison des expériences de Wafer Bending. Le transport des trous sera étudié à la fois pour des gaz 2D ou 3D dans une couche d'inversion à l'aide de la formule Kubo-Greenwood. Le transport des électrons sera analysé à partir de simulations Monte Carlo dans le cadre d'un gaz 3D dans une structure MOSFET de référence. La pertinence de nos résultats sera discutée en comparaison des données théoriques et expérimentales de la littérature. Ce chapitre sera aussi l'occasion de quantifier l'influence du temps de relaxation dans la modélisation des propriétés de transport des trous dans une couche d'inversion à l'aide de simulations avancées Kubo-Greenwood.

Nous discuterons la validité du modèle de piezorésistance en comparaison des calculs de simulateurs plus évolués Monte Carlo et Kubo-Greenwood. Notamment dans le cadre des couches d'inversion des trous, nous verrons que les coefficients de piezorésistance extraits des expériences de Wafer Bending seront confortés par les résultats des simulations numériques Kubo-Greenwood d'un gaz 2D de porteurs.

## V.2. Théorie de piezorésistance et expériences

Nous présentons dans cette section une nouvelle série de caractéristiques électriques de dispositifs pour des valeurs contrôlées de contrainte. Un unique ensemble cohérent de coefficients du modèle de piezorésistance en est extrait.

### V.2.1. Expériences de Wafer Bending

La plupart des variations de mobilité des porteurs, reportées dans la littérature, a été mesurée sur des dispositifs orientés selon  $\langle 110 \rangle$  [1][2][3][4][5][6] à l'aide d'un montage de flexion de type Wafer Bending. Nous présentons de nouvelles séries de mesures de Wafer Bending sur des MOSFETs planaires dans des configurations similaires. De plus, d'autres mesures complémentaires ont été réalisées avec des contraintes appliquées selon la direction  $\langle 100 \rangle$ , comme illustré en Figure V.2 et Figure V.3. Dans le dernier cas, les dispositifs sont orientés selon les deux directions de canal  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ . Ces configurations de contrainte sont liées à un ensemble cohérent de déformations influençant fortement la mobilité des porteurs, confinés dans une couche d'inversion. Les valeurs de contrainte, appliquées durant ces expériences, couvrent les valeurs de contrainte actuellement introduites dans la conception des dispositifs MOSFET (voir Section I.2.1.1. du chapitre I). Ces expériences permettent ainsi une profonde analyse des effets de contrainte sur la mobilité des porteurs de charge pour des valeurs de contrainte déterminées. Ces expériences présentent donc des conditions idéales pour la validation des simulations avancées de transport (Kubo-Greenwood et Monte Carlo) de dispositifs MOSFETs contraints.

#### V.2.1.1. Banc expérimental de Wafer Bending

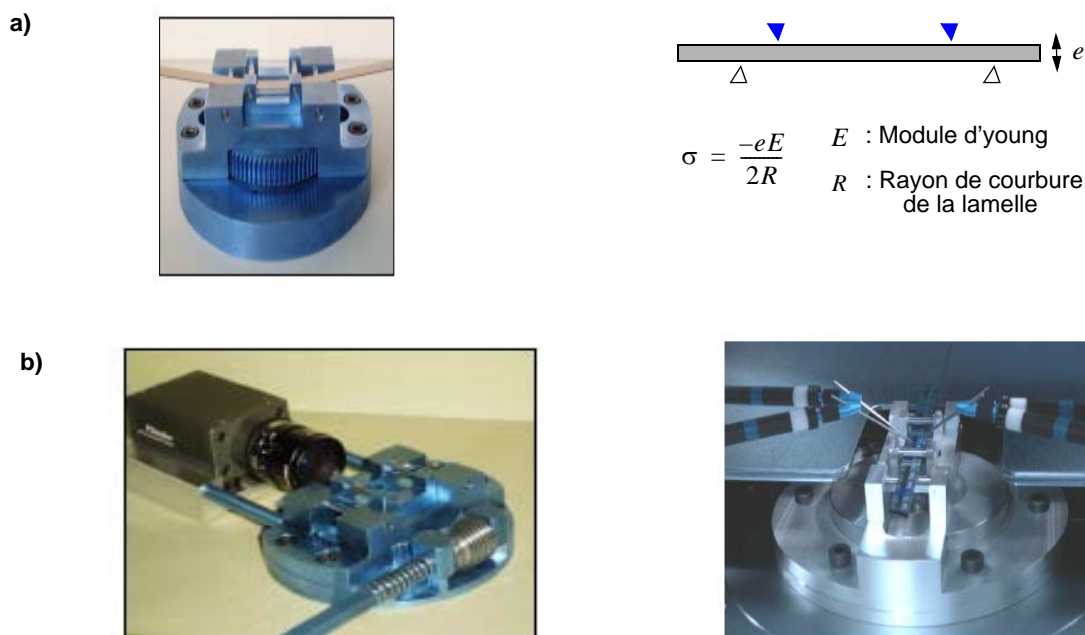
Des variations de mobilité des porteurs dans des dispositifs MOSFETs ont été mesurées au cours de cette thèse à l'aide d'un banc expérimental de Wafer Bending [7]. Les expériences utilisent un montage de flexion à quatre pointes, montré en Figure V.1 a). Les échantillons mesurés sont constitués d'une lamelle de Silicium coupée dans la direction de la contrainte considérée. Tandis que deux pointes fixent la lamelle de Silicium, les deux autres appliquent la contrainte. Le rayon de courbure de la lamelle contrainte est mesuré à partir d'une caméra digitale (Figure V.1 b), permettant ainsi, le calcul de la contrainte à la surface de la lamelle à l'aide de la relation:

$$\sigma = -\frac{eE}{2R} \quad \text{Eq-V.1}$$

où  $E$  est le module de Young du Silicium ( $E_{\langle 110 \rangle} = 168$  GPa,  $E_{\langle 100 \rangle} = 128$  GPa).  $R$  est le rayon de courbure de la lamelle contrainte.  $e$  correspond à l'épaisseur de la lamelle.

Deux types de dispositifs à longs canaux ont été mesurés ( $L/W = 10\mu\text{m} / 10\mu\text{m}$ ): des dispositifs à faible fuite (dispositifs A: pMOSFETs et nMOSFETs) et des dispositifs à application générique à faible tension d'alimentation (dispositifs B: pMOSFETs). Ces dispositifs sont représentatifs du noeud technologique 130 nm. Les principales caractéristiques de ces dispositifs sont résumées en Tableau V.1<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Ces dispositifs ont été choisis pour leurs grandes longueurs de grille. Ainsi tous les phénomènes physiques associés à de petites longueurs de grille seront écartés de l'extraction de mobilité (Section V.2.2.1.).



**Figure V.1:** a) Principe du montage de flexion à quatre pointes Wafer Bending. b) Illustration de mesures d'échantillons sous contrainte.

**Tableau V.1:** Principales caractéristiques des dispositifs A et B mesurés. Les orientations cristallographiques des canaux et des contraintes appliquées sont également reportées (les couleurs associent les directions des contraintes appliquées avec les orientations des canaux).

	Dispositifs A	Dispositifs B
Type de dispositifs	nMOSFETs et pMOSFETs	pMOSFETs
Technologie	130 nm	
Type d'oxyde	GO2	GO1
Epaisseur d'oxyde $T_{ox}$ [Å]	85	21
Tension d'alimentation $V_{dd}$ [V]	4	2.5
Orientation de canal	<110>	<110> et <100>, <010>
Contrainte appliquée	<110>, <100>, < $\bar{1}10$ >	<110>, <100> et <100>

Les dispositifs A et B ont des canaux orientés selon la direction <110>. Par ailleurs, des dispositifs B ont été tournés dans le masque de structures de test avec des canaux orientés selon les directions cristallographiques <100> et <010>.

Pour chaque orientation, une large gamme de contraintes a été appliquée (de -200MPa à +200MPa) dans les limites de validité du modèle de piezorésistance [8]. Les caractéristiques de courant de drain  $I_d$  en fonction de la tension de grille  $v_{gs}$  ont été mesurées à faible champ ( $v_{ds} = 100$  mV) pour chaque condition de contrainte. Les expériences se limitent donc à l'étude des propriétés de transport à faible champ dans le régime linéaire des dispositifs MOSFETs. Dans le souci de la répétitivité expérimentale, les mesures des caractéristiques dans la configuration non contrainte ont été systématiquement réitérées après chaque application de contrainte.

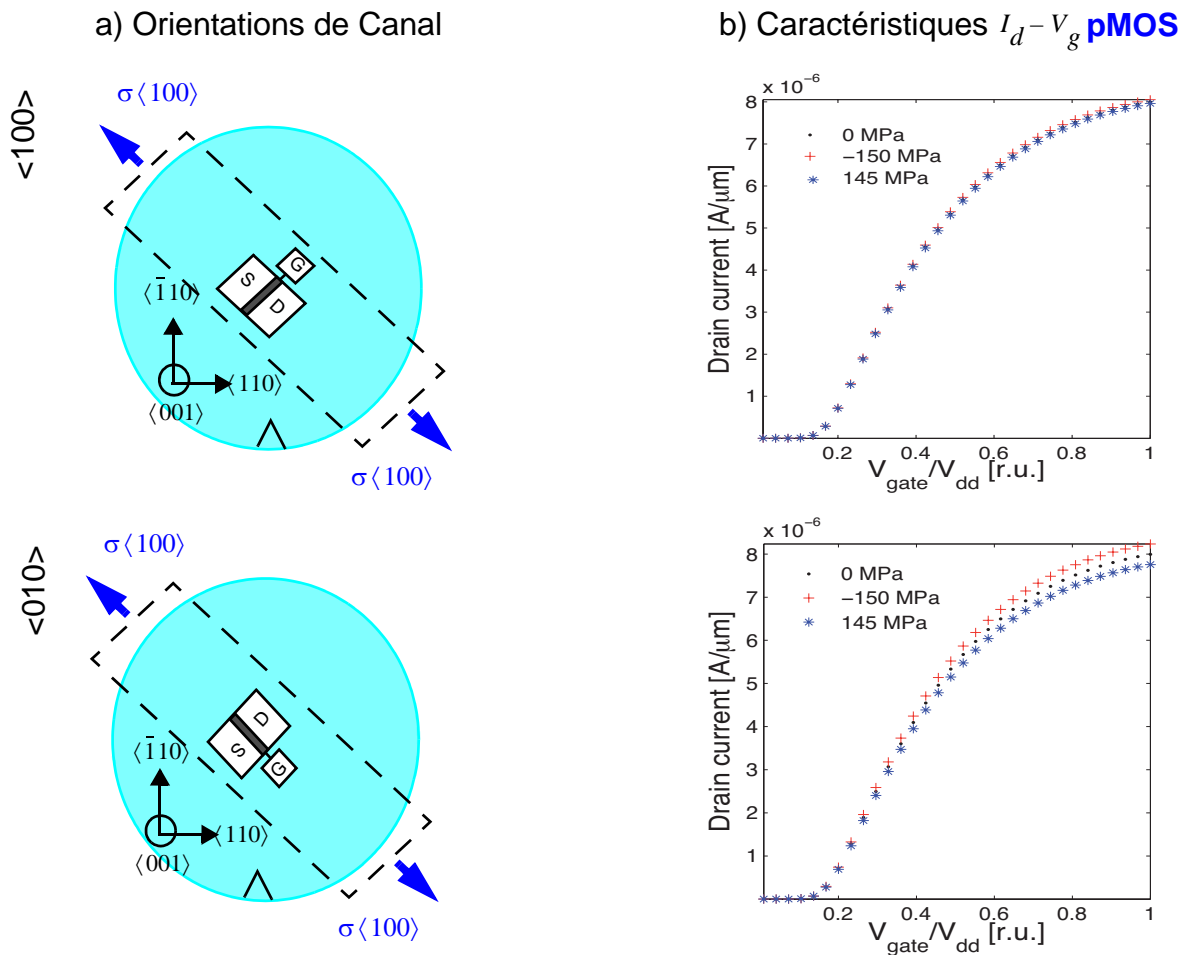


Par ailleurs, des études théoriques préliminaires ont montré que la contrainte peut être considérée comme uniforme sur la zone centrale de la lamelle, comprise entre les pointes internes [9]. De plus, nous négligeons les inhomogénéités de contrainte dues aux effets de layout dans notre estimation de la valeur de contrainte. D'autre part, nous ne prenons pas en compte l'influence des résistances d'accès sur la variation de la mobilité des porteurs de charge dans le noeud technologique étudié (0.13  $\mu\text{m}$ ) [5].

### V.2.1.2. Contraintes et mesures

La Figure V.2 présente les caractéristiques  $I_d-V_g$  des dispositifs pMOSFETs et nMOSFETs de type A pour trois directions de contrainte  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . La Figure V.3 présente les caractéristiques  $I_d-V_g$  des pMOSFETs pour deux orientations de canal  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$  sous contrainte uniaxiale  $\langle 100 \rangle$ . Comme attendu, la variation de courant pour une direction de canal donnée dépend fortement de l'orientation cristallographique de la contrainte.

### Dispositif B: Contrainte $\langle 100 \rangle$



**Figure V.3:** a) Lamelle associée à l'orientation de contrainte. Les canaux du dispositif pMOSFET B sont orientés le long des directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$  (S: Source, D: Drain, G: Grille) et la contrainte est orientée selon la direction  $\langle 100 \rangle$ . b) Caractéristiques  $I_d-V_g$  à faible tension de drain ( $V_d = 100 \text{ mV}$ ) dans la configuration relaxée et sous les contraintes compressive et tensile extrêmes.  $V_g$  est normalisée par rapport à la tension d'alimentation  $V_{dd}$ .

Dispositif de type A: Canal  $\langle 110 \rangle$ 

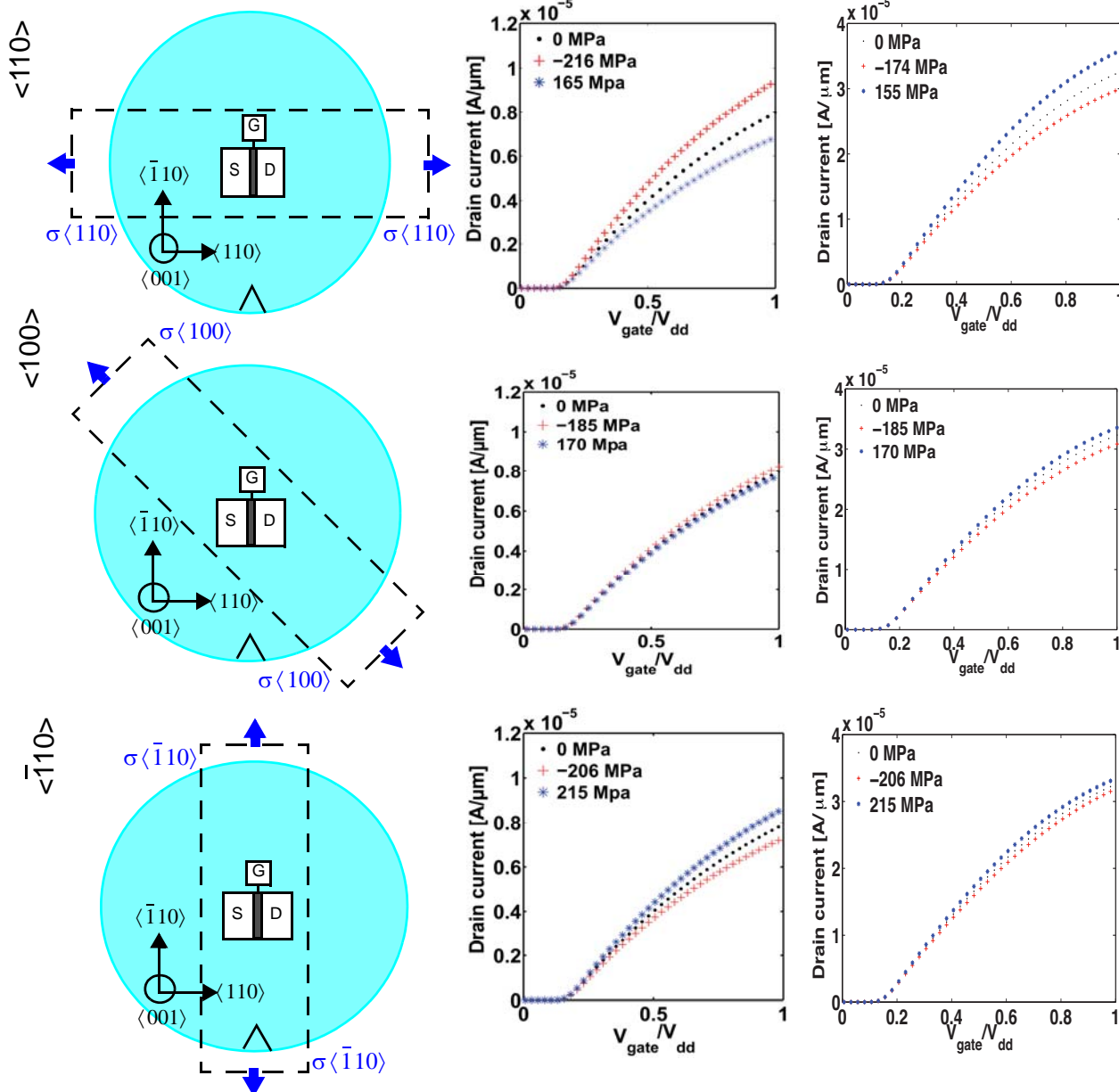
a) Orientations de contrainte

b) Caractéristiques

 $I_d - V_g$ 

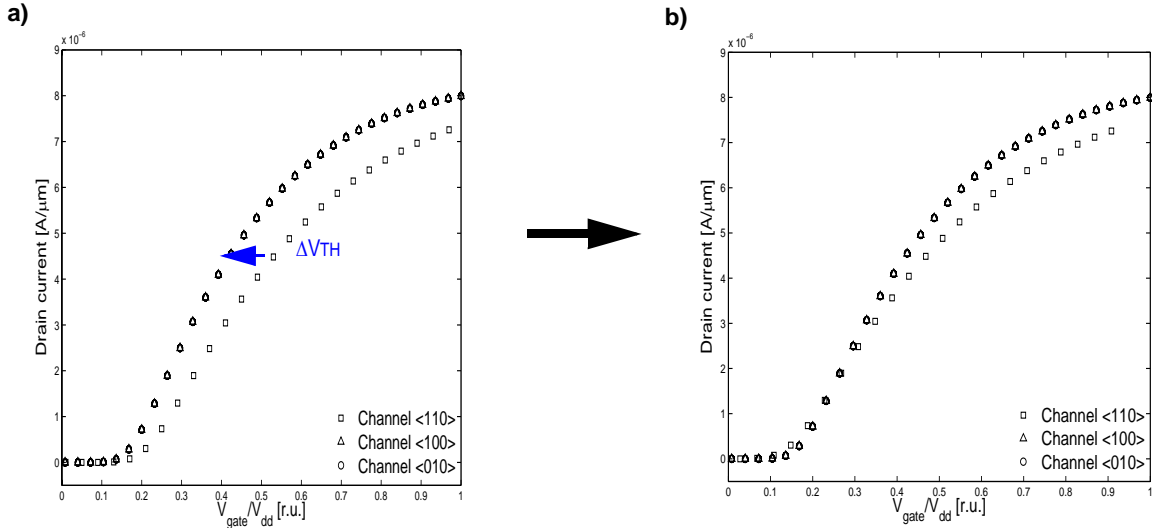
pMOS

nMOS



**Figure V.2:** a) Lamelle associée à l'orientation de contrainte. Le canal du dispositif MOSFET A est orienté le long de la direction  $\langle 110 \rangle$  (S: Source, D: Drain, G: Grille). b) Caractéristiques  $I_d - V_g$  des dispositifs pMOSFETs et nMOSFETs de type A à faible tension de drain ( $V_d = 100$  mV) dans la configuration relaxée et sous les contraintes compressive et tensile extrêmes.  $V_g$  est normalisée par rapport à la tension d'alimentation  $V_{dd}$ .

Les caractéristiques électriques  $I_d - V_g$  des dispositifs pMOSFETs A et B orientés  $\langle 110 \rangle$  sont similaires (non montrées). En revanche, des décalages de tension de seuil  $V_{th}$  apparaissent entre les caractéristiques  $I_d - V_g$  des dispositifs pMOSFETs de type B dont les canaux sont orientés selon les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$  (Figure V.4). Ces décalages proviennent des effets d'ombrage, dus à l'orientation des structures sur le masque de structure test, lors des procédés d'implémentation des impuretés. La répartition altérée des impuretés dans ces dispositifs produit un décalage sur la valeur de tension de seuil. Après un réajustement en  $V_{th}$ , les caractéristiques se superposent dans un accord relativement satisfaisant. Cependant, ces décalages n'influencent en rien l'extraction des coefficients de piezorésistance entre les divers dispositifs MOSFETs étudiés, comme nous le verrons ultérieurement.

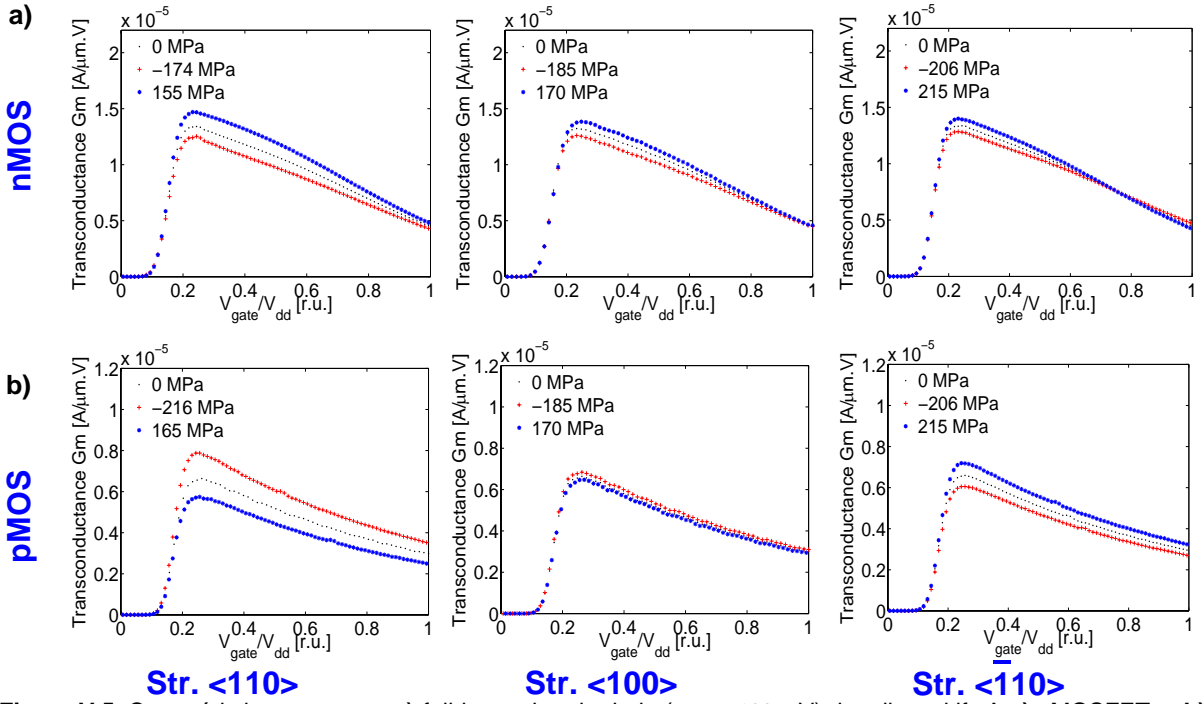


**Figure V.4:** Caractéristiques  $I_d - V_g$  du dispositif pMOSFET B dans la configuration relaxée pour différentes orientations de canal  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ . Les caractéristiques sont tracées **a)** sans et **b)** avec un déplacement en  $V_{th}$ .

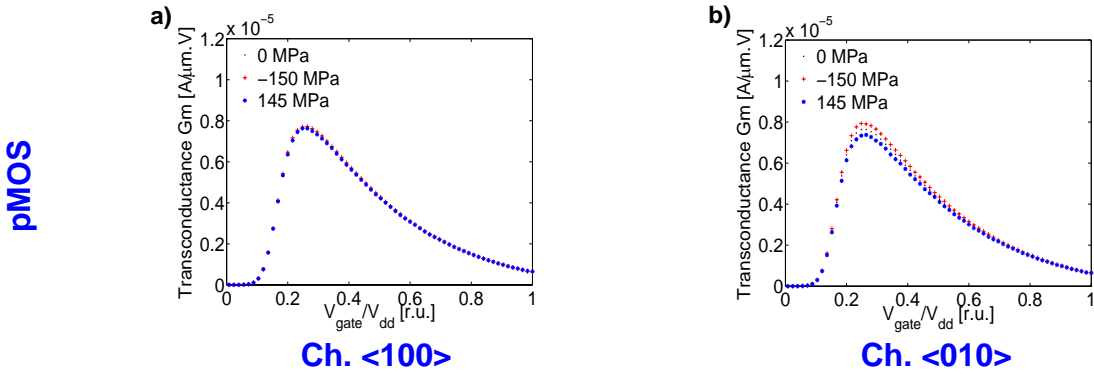
Les transconductances  $G_m - V_g$  ont été calculées à partir des dérivées des caractéristiques  $I_d - V_g$  en fonction de la tension de grille  $V_g$ .

Les caractéristiques  $G_m - V_g$  des dispositifs pMOSFETs et nMOSFETs de type A orientés  $\langle 110 \rangle$ , ainsi que ceux des dispositifs nMOSFET de type B orientés  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ , ont respectivement été tracées en Figure V.5 et Figure V.6. Notons que pour  $V_g > V_{th}$  la valeur de la transconductance évolue en fonction de la tension de grille. Cela démontre une variation de la mobilité avec la tension de grille<sup>2</sup> que ce soit des nMOS ou des pMOS. Remarquons également que la variation des courants de drain sous contrainte dans les nMOSFETs varie en fonction de  $V_{gs}$ . Les propriétés de transport des électrons dans la couche d'inversion de ces dispositifs sont donc fortement dépendantes d'une action conjuguée des effets de la contrainte et de la tension de grille.

<sup>2</sup>En effet, la somme de l'Eq-I.3 du chapitre I comporte un terme dépendant de la dérivée de la mobilité  $\mu_n$  en fonction de la tension de seuil  $V_{ds} : \frac{\partial \mu_n}{\partial V_{gs}}$ .



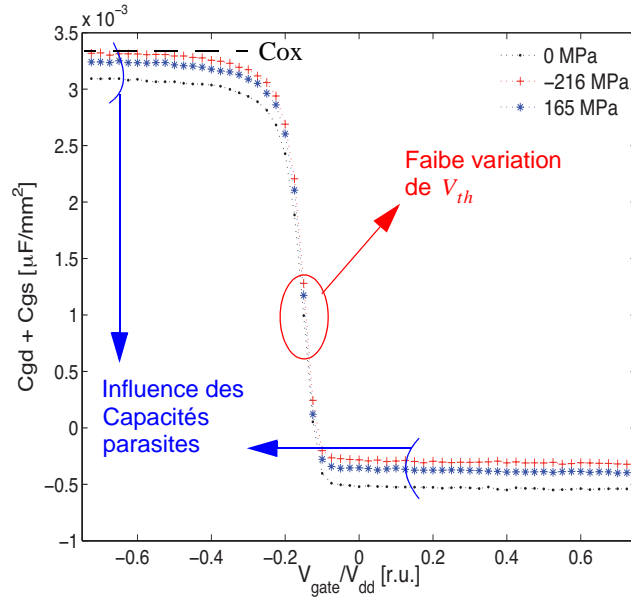
**Figure V.5:** Caractéristiques  $G_m - V_g$  à faible tension de drain ( $V_d = 100$  mV) des dispositifs A a) nMOSFET et b) pMOSFET orientés  $\langle 110 \rangle$  dans la configuration relaxée et sous des contraintes compressive et tensile extrêmes selon les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ .  $V_g$  est normalisée par rapport à la tension d'alimentation  $V_{dd}$ .



**Figure V.6:** Caractéristiques  $G_m - V_g$  à faible tension de drain ( $V_d = 100$  mV) des dispositifs B pMOSFETs orientés a)  $\langle 010 \rangle$  et b)  $\langle 100 \rangle$  dans la configuration relaxée et sous des contraintes compressive et tensile extrêmes selon la direction  $\langle 100 \rangle$ .  $V_g$  est normalisée par rapport à la tension d'alimentation  $V_{dd}$ .

La variation de mobilité doit être extraite avec précaution des caractéristiques électriques. L'impact des effets de contraintes sur les propriétés électrostatiques des dispositifs MOSFETs doit être notamment prélevé des caractéristiques électriques  $I_d - V_g$  et  $G_m - V_g$ . La somme des capacités  $C_{gs}$  et  $C_{gd}$  en fonction de  $V_{gs}$  des dispositifs A a été tracée en Figure V.7 pour diverses configurations de contrainte selon la direction  $\langle 110 \rangle$ . La tension de seuil  $V_{th}$  présente une variation négligeable<sup>3</sup> en fonction de la contrainte ( $\Delta V_{th} < 2\%$  sur l'ensemble des états de contrainte uniaxiale présentés sur ce manuscrit). Les différences observées sur les capacités d'oxyde  $C_{ox}$  proviennent de la présence, lors de la mesure, de capacités parasites provenant du banc de mesures.

<sup>3</sup>Rappelons que la tension de seuil  $V_{th}$  peut être déduite des caractéristiques  $C - V$  par la relation suivante,  $V_{th} \approx V(C_{ox}/3)$  [10].



**Figure V.7:** Sommes des capacités  $C_{gs}$  et  $C_{gd}$  d'un pMOSFET de type A dans la configuration relaxée ainsi que pour des états de contraintes extrêmes selon la direction  $\langle 110 \rangle$ .

## V.2.2. Méthode d'extraction des coefficients du modèle de piezorésistance dans une couche d'inversion

Le modèle de piezorésistance est un moyen efficace de déterminer la variation de mobilité longitudinale  $\Delta\mu/\mu$  en fonction de la valeur de contrainte appliquée  $\sigma_L$  (voir chapitre I, [11][12]):

$$\pi_L = -\frac{\Delta\mu}{\mu}/\sigma_L \quad \text{Eq-V.2}$$

où  $\pi_L$  est le coefficient de piezorésistance longitudinal.  $\pi_L$  est obtenu d'un changement de base entre le système SCC et le Système de Coordonnée du Device (SCD) (voir ANNEXE II.A). Au final, le coefficient de piezorésistance est une combinaison des coefficients de piezorésistance bien connus  $\pi_{11}$ ,  $\pi_{12}$  et  $\pi_{44}$  du tenseur  $\Pi^4$  (voir chapitre I).

Plusieurs méthodes permettent d'extraire les variations de mobilité. Nous énumérerons dans la section suivante les principales méthodes que nous avons utilisées.

<sup>4</sup>Par exemple, dans le cas d'une description sur la base  $\{ \langle 110 \rangle, \langle \bar{1}00 \rangle, \langle 001 \rangle \}$  le tenseur du modèle de piezorésistance devient [13]:

$$\bar{\Pi} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44}) & \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} - \pi_{44}) & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} - \pi_{44}) & \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44}) & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{11} + \pi_{12} \end{bmatrix}$$

Ainsi, si une contrainte  $\langle 110 \rangle$  est appliquée sur un canal dirigé selon  $\langle 110 \rangle$ , le coefficient de piezorésistance longitudinal correspond à  $\pi_L \langle 110 \rangle = \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44})$

### V.2.2.1. Méthodes d'extraction de la variation de mobilité

#### V.2.2.1.1. Méthode de la variation de courant de drain

La modélisation analytique des courants de drain  $I_d$  par les formules développées en chapitre I dans le régime linéaire peuvent s'appliquer aux dispositifs MOSFETs A et B, dont les canaux sont relativement longs. A partir de ces formules, la variation de courant de drain en fonction de la contrainte s'exprime au premier ordre comme suit:

$$\frac{\Delta I_d}{I_d(\varepsilon = 0)} = \frac{\Delta \mu_{I_d}}{\mu_{I_d}(\varepsilon = 0)} - 2 \frac{\Delta V_{th}}{V_{th}(\varepsilon = 0)} \left( \frac{V_{th}(\varepsilon = 0)}{V_{gs} - V_{th}(\varepsilon = 0)} \right) \quad \text{Eq-V.3}$$

Le second membre de l'équation est constitué de deux termes. Le premier terme est lié à la variation de mobilité. Le deuxième est associé à l'impact de la variation de tension de seuil  $V_{th}$  sur le courant de drain. Puisque la variation de la tension de seuil est faible, le second terme est négligeable. La variation de mobilité en fonction de la contrainte est ainsi directement liée à la variation de courant de drain:

$$\frac{\Delta \mu_{I_d}}{\mu_{I_d}(\varepsilon = 0)} \approx \frac{\Delta I_d}{I_d(\varepsilon = 0)} \quad \text{Eq-V.4}$$

#### V.2.2.1.2. Méthode de la variation de $G_m$

Les caractéristiques  $G_m - V_g$  s'obtiennent à partir des dérivées des formules de courant de drain en fonction de la tension de grille (voir chapitre I, Eq-I.3). La variation de mobilité à partir de ces caractéristiques s'exprime simplement par:

$$\frac{\Delta \mu_{G_m}}{\mu_{G_m}(\varepsilon = 0)} \approx \frac{\Delta G_m}{G_m} \quad \text{Eq-V.5}$$

#### V.2.2.1.3. Méthode split-CV

La mobilité  $\mu_{CV}$  est estimée à partir du calcul de la charge d'inversion  $Q_{inv}$  comme suit:

$$\mu_{CV} = \frac{I_d}{Q_{inv}} \cdot \frac{L_g}{W \cdot V_{ds}} \quad \text{Eq-V.6}$$

où  $w$  correspond à la largeur du dispositif MOSFET.  $L_g$  dénote la longueur de grille.  $C_{ox}$  se réfère à la capacité d'oxyde.

La charge d'inversion  $Q_{inv}$  se calcule par l'intégration des capacités  $c_{gd}$  et  $c_{gs}$  en fonction de la tension de grille  $V_{gs}$ :

$$Q_{inv} = \int_{-V_{dd}}^{V_{dd}} (C_{gd} + C_{gs}) dV_g \quad \text{Eq-V.7}$$

$V_{dd}$  correspond à la tension d'alimentation.

La variation de mobilité s'obtient donc par l'expression suivante:

$$\frac{\Delta\mu_{cv}}{\mu_{cv}(\varepsilon=0)} = \frac{\left( \frac{I_d(\varepsilon)}{Q_{inv}(\varepsilon)} - \frac{I_d(\varepsilon=0)}{Q_{inv}(\varepsilon=0)} \right)}{\frac{I_d(\varepsilon=0)}{Q_{inv}(\varepsilon=0)}} \quad \text{Eq-V.8}$$

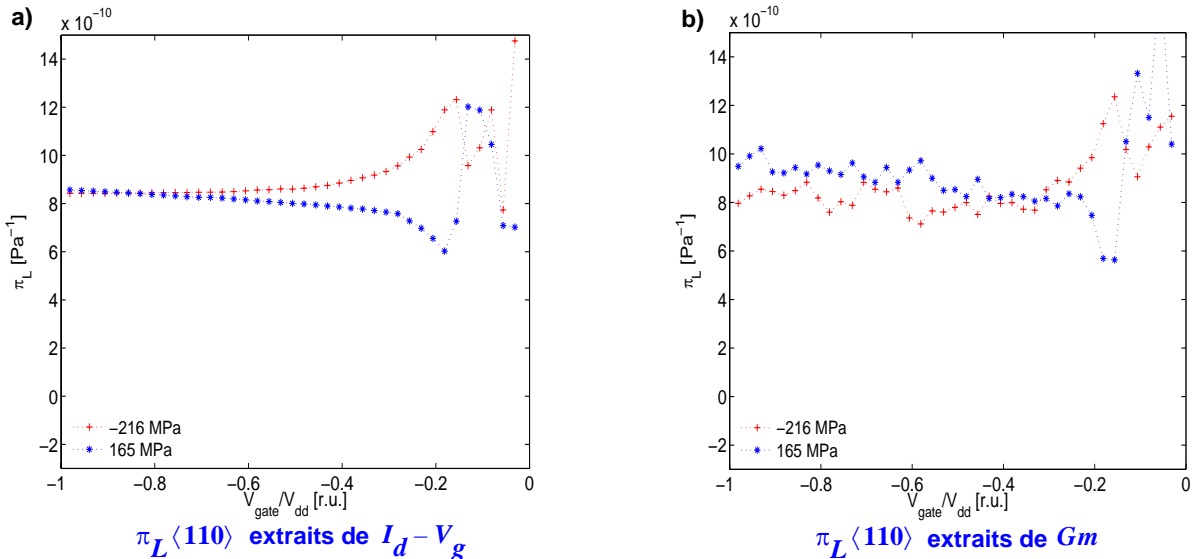
Puisque la variation de la somme  $c_{gd} + c_{gs}$  est négligeable en fonction de la contrainte dans le cadre de nos dispositifs (voir Figure V.7), la variation de la mobilité équivaut à l'expression suivante:

$$\frac{\Delta\mu_{Id}}{\mu_{Id}(\varepsilon=0)} \approx \frac{\Delta I_d}{I_d(\varepsilon=0)} \quad \text{Eq-V.9}$$

Remarquons que cette expression est équivalente à l'équation Eq-V.4. La méthode d'extraction split-CV et celle basée sur la variation de courant de drain (Section V.2.2.1.1.) sont donc équivalentes. Par la suite, nous ne montrerons que les résultats obtenus des méthodes basées à partir de la variation de courant de drain et de  $G_m$ .

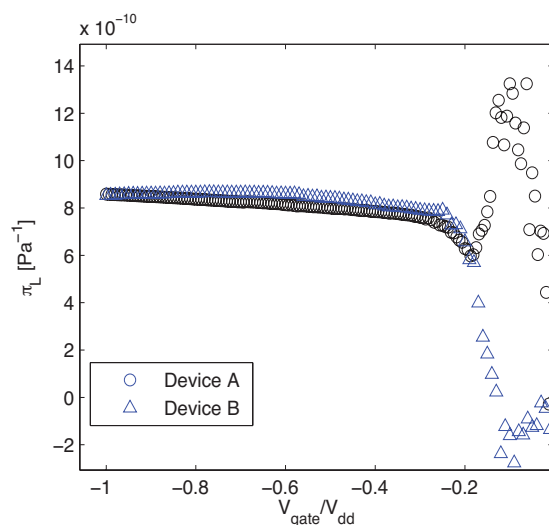
### V.2.2.2. Exemples d'extraction de coefficients longitudinaux du modèle de piezorésistance

Nous montrons en Figure V.8 les coefficients longitudinaux du modèle de piezorésistance (Eq-V.2) dans les dispositifs pMOSFETs de type A sous contrainte  $\langle 110 \rangle$ . Des valeurs similaires de coefficients de piezorésistance sont obtenues à partir des deux méthodes d'extraction basées sur les variations de courant de drain et de  $G_m$ . Remarquons que les valeurs de coefficients extraites avec la méthode basée sur les caractéristiques  $G_m$  sont relativement bruitées en comparaison de celles obtenues avec la méthode basée sur la variation de courant de drain. Les variations de mobilité seront extraites par la suite des variations de courant de drain.



**Figure V.8:** Coefficients longitudinaux de piezorésistance extraits des caractéristiques **a)**  $I_d - V_g$  et **b)**  $G_m$  sous les conditions de contraintes compressive et tensile selon la direction  $\langle 110 \rangle$  sur le dispositif pMOSFET de type A.

La bonne concordance des effets piezorésistifs dans les dispositifs MOSFETs de type A et B orientés  $\langle 110 \rangle$  est prouvée par la Figure V.9. Nous trouvons également que la variation  $\Delta I_d / I_d$  est relativement insensible dans les dispositifs pMOSFETs de types A et B à la tension de grille pour  $V_g > V_{th}$ .

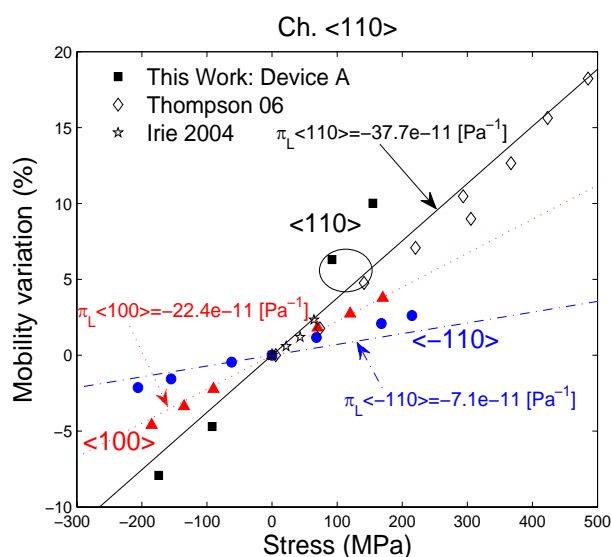


**Figure V.9:** Coefficients longitudinaux de piézorésistance, extraits de la variation  $I_d - V_g$  divisée par la valeur de la contrainte uniaxiale tensile  $\sigma$ , mesurés sur les pMOSFETs de type A et B, dont les canaux sont orientés  $\langle 110 \rangle$ .

## V.2.3. Extraction des coefficients de piézorésistance dans une couche d'inversion

### V.2.3.1. nMOSFET

La Figure V.10 présente les variations de mobilité (à  $v_g = v_{dd}$ ) obtenues pour diverses orientations de contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle \bar{1}10 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  appliquées sur les dispositifs nMOSFETs de type A dont les canaux sont orientés  $\langle 110 \rangle$ . L'ensemble de ces données, mesurées au cours de cette thèse, est comparé aux données expérimentales de la littérature [2][4]. Malgré une



**Figure V.10:** Variation de la mobilité des électrons dans une couche d'inversion sous contraintes uniaxiales, appliquées par la technique de Wafer Bending, selon les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  sur un nMOSFET orienté  $\langle 110 \rangle$ . Symboles pleins: travail de thèse. Symboles ouverts: Réfs. [2][4]. Les lignes se reportent aux résultats du modèle de piézorésistance avec des coefficients ajustés.



bonne cohérence, nos expériences montrent des variations de mobilité plus fortes que celles relevées dans la littérature (Réfs. [1][2][3][5]).

Nous synthétisons en Tableau V.2 les valeurs des coefficients de piezorésistance, extraits des couches d'inversion des pMOSFET de type A orienté  $\langle 110 \rangle$  (Figure V.10), associés aux différentes directions de contrainte  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Les coefficients extraits dans une couche d'inversion sont relativement différents de ceux obtenus dans le Silicium massif (notamment dans l'estimation du coefficient  $\pi_L \langle 110 \rangle$ ). En effet, les coefficients piezorésistance dans une couche d'inversion doivent prendre en compte la nature 2D du transport dans le MOSFET [15].

Nos mesures présentent une valeur de coefficient  $\pi_L \langle 100 \rangle = \frac{\pi_{11} + \pi_{12}}{2}$  en adéquation avec les valeurs déduites de la littérature pour des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ <sup>5, 2</sup>. En revanche, nous trouvons un coefficient  $\pi_{44}$ , associé aux contraintes de cisaillement, légèrement supérieur à la littérature. Les différences observées entre les données peuvent être interprétées par la disparité des paramètres des dispositifs étudiés [5], tels que l'épaisseur d'oxyde, le dopage de substrat, la température....

**Tableau V.2:** Coefficients de piezorésistance longitudinal ( $\pi_L$ ) des électrons pour différentes directions de contrainte. Les résultats obtenus au cours de cette thèse (en gras) sur les dispositifs nMOSFETs de type A sont confrontés aux données de la littérature.

Canal	Contrainte $\pi_L$ [ $10^{-11} \cdot \text{Pa}^{-1}$ ]	Si massif	Couche d'inversion dans du Si
		Exp.	Exp.
$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$ $(\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44})/2$	-31.2 <sup>a</sup> , -26.0 <sup>b</sup>	-35.5 <sup>c,d</sup> , -48.5 <sup>e</sup> , -31.5 <sup>f</sup> , -30.0 <sup>g</sup> , <b>-37.7<sup>h</sup></b>
	$\langle 100 \rangle$ $(\pi_{11} + \pi_{12})/2$	-24.4 <sup>a</sup> , -19.0 <sup>b</sup>	-25 <sup>c,d,i</sup> , -34.9 <sup>e,i</sup> , <b>-22.4<sup>h</sup></b>
	$\langle \bar{1}10 \rangle$ $(\pi_{11} + \pi_{12} - \pi_{44})/2$	-17.6 <sup>a</sup> , -12 <sup>b</sup>	-14.5 <sup>c,d</sup> , -21.2 <sup>e</sup> , <b>-7.1<sup>h</sup></b>
	$\pi_{44}$	-13.6 <sup>a</sup> , -14 <sup>b</sup>	-21 <sup>c,d,i</sup> , -27.2 <sup>e,i</sup> , <b>-30.6<sup>i</sup></b>

<sup>a</sup> Réf. [11].

<sup>b</sup> Réf. [12].

<sup>c</sup> Réf. [1].

<sup>d</sup> Réf. [2].

<sup>e</sup> Réf. [5].

<sup>f</sup> Réf. [3].

<sup>g</sup> Réf. [14].

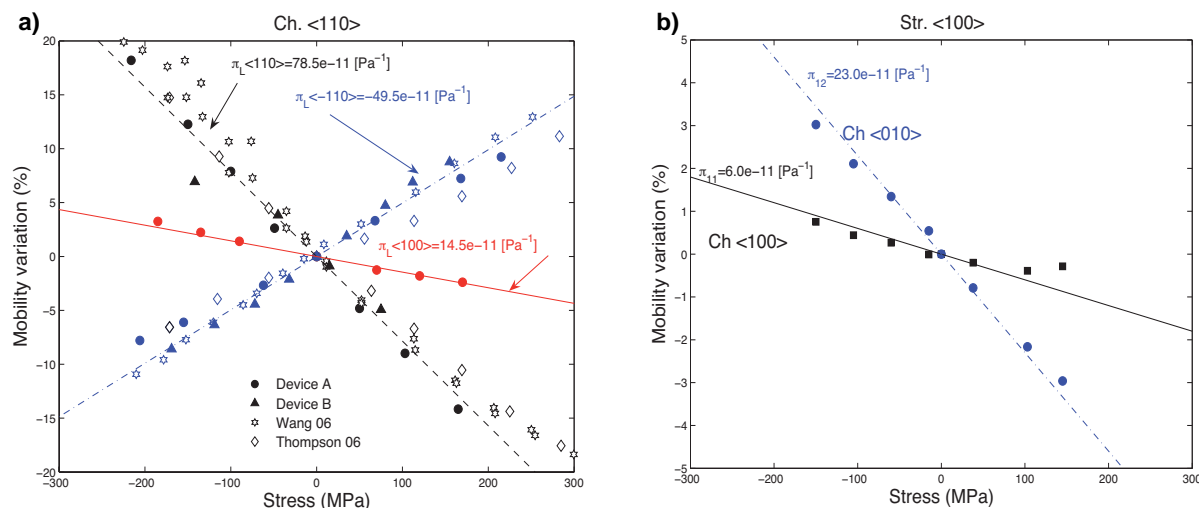
<sup>h</sup> **Ce travail de thèse. Coefficients directement déterminés à partir des mesures.**

<sup>i</sup> Valeurs déduites des mesures liées aux contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ .

<sup>5</sup> Il est intéressant de noter dans les Réfs. [1][2] que la valeur  $(\pi_{11} + \pi_{12})/2 = -31,7 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ , calculée à partir des coefficients  $\pi_{11}$  et  $\pi_{12}$  extraits des dispositifs  $\langle 100 \rangle$ , n'est pas égale à celle du coefficient longitudinal  $\pi_L \langle 100 \rangle = (\pi_{11} + \pi_{12})/2$  de valeur  $25 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ , directement mesuré dans les dispositifs orientés  $\langle 110 \rangle$ .

### V.2.3.2. pMOSFET

La Figure V.11 a) présente les variations de mobilité (à  $v_g = V_{dd}$ ) obtenues pour diverses orientations de contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle \bar{1}10 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  appliquées sur les dispositifs de type A et B, dont les canaux sont orientés  $\langle 110 \rangle$ . La Figure V.11 b) montre la variation de courant de drain pour des dispositifs de type B dont les canaux sont tournés selon les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ . L'ensemble de ces données mesurées au cours de cette thèse est confronté aux données expérimentales de la littérature [1][6].



**Figure V.11:** Variation de la mobilité des trous dans la couche d'inversion sous contraintes uniaxiales appliquées par Wafer Bending: **a)** contraintes appliquées selon les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  sur un pMOSFET orienté  $\langle 110 \rangle$ ; **b)** contraintes  $\langle 100 \rangle$  appliquées sur des dispositifs pMOSFETs orientés selon les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ . Symboles pleins: travail de thèse. Symboles ouverts: Réfs. [1][6]. Les lignes se reportent aux résultats du modèle de piezorésistance avec des coefficients ajustés.

Nous synthétisons en Tableau V.3 les coefficients de piezorésistance extraits des couches d'inversion des pMOSFET de types A et B (Figure V.11 a) et Figure V.11 b)) pour différentes directions de contrainte et d'orientations de canal.

En ce qui concerne les dispositifs pMOSFETs orientés  $\langle 110 \rangle$ , il doit être noté que les valeurs mesurées des coefficients  $\pi_L$  pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  sont en bon accord avec les valeurs reportées dans la littérature. La valeur des coefficients  $\pi_{44}$ , déduits des coefficients  $\pi_L$  mesurés à partir des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , se rapproche également des données expérimentales de la littérature. En outre, il doit être mentionné que le coefficient de piezorésistance  $\pi_L = (\pi_{11} + \pi_{12})/2$ , directement mesuré des contraintes  $\langle 100 \rangle$ , est cohérent avec les valeurs déduites de la caractérisation des dispositifs sous contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ .

En ce qui concerne les dispositifs B tournés (avec des canaux orientés  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ ), il est possible de mesurer indépendamment les coefficients  $\pi_{11}$  et  $\pi_{12}$ . Comme il peut être constaté en Figure V.11 b), nos valeurs expérimentales diffèrent sensiblement du cas massif. De plus,  $\pi_{11}$  et  $\pi_{12}$  présentent des valeurs significativement différentes de celles reportées dans les pMOSFETs orientés selon la direction  $\langle 100 \rangle$  [1][2]. Cependant, il est intéressant de souligner que la valeur de  $(\pi_{11} + \pi_{12})/2$ , calculée en utilisant  $\pi_{11}$  et  $\pi_{12}$ , reproduit parfaitement bien le coefficient  $\pi_L = (\pi_{11} + \pi_{12})/2$  directement mesuré dans les dispositifs orientés  $\langle 110 \rangle$ , ce qui n'est pas le cas dans les Réfs. [1][2].

Afin de mieux souligner la cohérence de nos mesures, nous avons comparé en Figure V.11 a) et Figure V.11 b), les données expérimentales aux solutions du modèle de piezorésistance en utilisant un unique ensemble de coefficients  $\pi_{11}$ ,  $\pi_{12}$  et  $\pi_{44}$ . Nous pouvons voir, qu'en utilisant les coefficients appropriés, le modèle de piezorésistance reproduit bien les variations de mobilité des trous dans une couche d'inversion pour diverses contraintes et deux orientations de canal ( $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ ).

**Tableau V.3:** Coefficients de piezorésistance longitudinaux ( $\pi_L$ ) des trous pour différentes directions de contrainte et orientations de canal. Les résultats obtenus au cours de cette thèse (gras rouge) sont confrontés aux données de la littérature. Les coefficients de piezorésistance ajustés aux simulations Kubo-Greenwood 2Dk sont également reportés (gras bleu).

Canal	Contrainte $\pi_L$ [10 <sup>-11</sup> .Pa <sup>-1</sup> ]	Si massif	Couche d'inversion dans du Si	
		Exp.	Exp.	Théo. <sup>i</sup>
<110>	<110> ( $\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44}$ )/2	71.8 <sup>a</sup> , 53.5 <sup>b</sup>	71.7 <sup>c,d</sup> , 60 <sup>e</sup> , 71.8 <sup>f</sup> , 59.0 <sup>f</sup> , <b>78.5<sup>g</sup></b>	<b>69.5</b>
	<100> ( $\pi_{11} + \pi_{12}$ )/2	2.8 <sup>a</sup> , -2.5 <sup>b</sup>	18.95 <sup>c,d,h</sup> , 10.9 <sup>e,h</sup> , <b>14.5<sup>g</sup></b>	<b>19.5</b>
	< $\bar{1}10$ > ( $\pi_{11} + \pi_{12} - \pi_{44}$ )/2	-66.3 <sup>a</sup> , -58.5 <sup>b</sup>	-33.8 <sup>c,d</sup> , -38.3 <sup>e</sup> , <b>-49.5<sup>g</sup></b>	<b>-30.5</b>
	$\pi_{44}$	138.1 <sup>a</sup> , 112 <sup>b</sup>	105.5 <sup>c,d,h</sup> , 98.3 <sup>e</sup> <b>128<sup>g,h</sup></b>	<b>100</b>
<100>	<100> $\pi_{11}$	6.6 <sup>a</sup> , -6 <sup>b</sup>	9.1 <sup>c,d</sup> , <b>6<sup>g</sup></b>	<b>10.5</b>
<010>	<100> $\pi_{12}$	-1.1 <sup>a</sup> , 1 <sup>b</sup>	-6.2 <sup>c,d</sup> , <b>23<sup>g</sup></b>	<b>28.5</b>

<sup>a</sup> Réf. [11].

<sup>b</sup> Réf. [12].

<sup>c</sup> Réf. [1].

<sup>d</sup> Réf. [2].

<sup>e</sup> Réf. [5].

<sup>f</sup> Réf. [14].

<sup>g</sup> **Ce travail de thèse. Coefficients directement déterminés à partir des mesures.**

<sup>h</sup> Valeurs déduites des mesures liées aux contraintes <110> et < $\bar{1}10$ >.

<sup>i</sup> **Ce travail de thèse (calculs Kubo-Greenwood d'un Gaz 2D de trous).**

### V.3. Solutions numériques vs. expériences de Wafer Bending

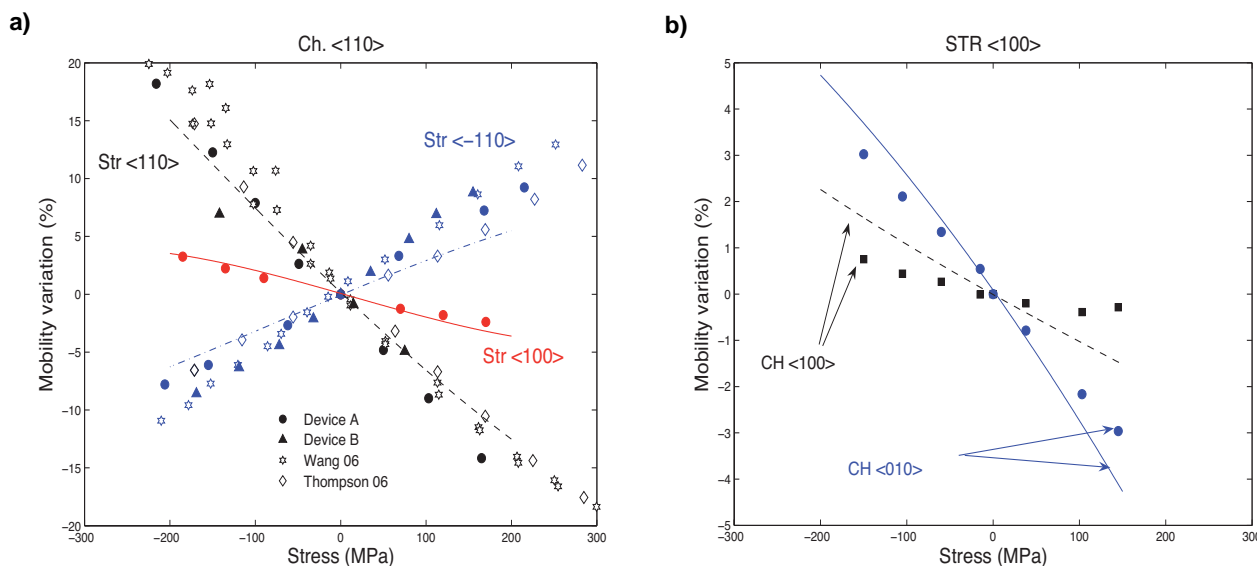
Dans cette section, les propriétés de transport évaluées à partir de simulations Monte Carlo dans le cas des électrons (voir chapitre III) et du Kubo-Greenwood dans le cas des trous (voir chapitre IV) sont directement comparées aux expériences de Wafer Bending. Cette section permet d'évaluer la pertinence des résultats de simulations avancées des propriétés de transport dans les MOSFETs.

Par ailleurs, la confrontation des résultats théoriques et données expérimentales viendra conforter les valeurs de coefficients de piezorésistance dans les couches d'inversion, extraites en Section V.2. Finalement, nous tenterons d'établir les limites de validité du modèle de piezorésistance.

#### V.3.1. Simulations Kubo-Greenwood de couche d'inversion de trous

##### V.3.1.1. Confrontation des simulations et des données expérimentales de Wafer Bending

Les variations de mobilité de gaz de trous 2Dk et 3Dk ont été respectivement tracées (lignes) en Figure V.12 et Figure V.13 avec les données expérimentales précédemment décrites (symboles).

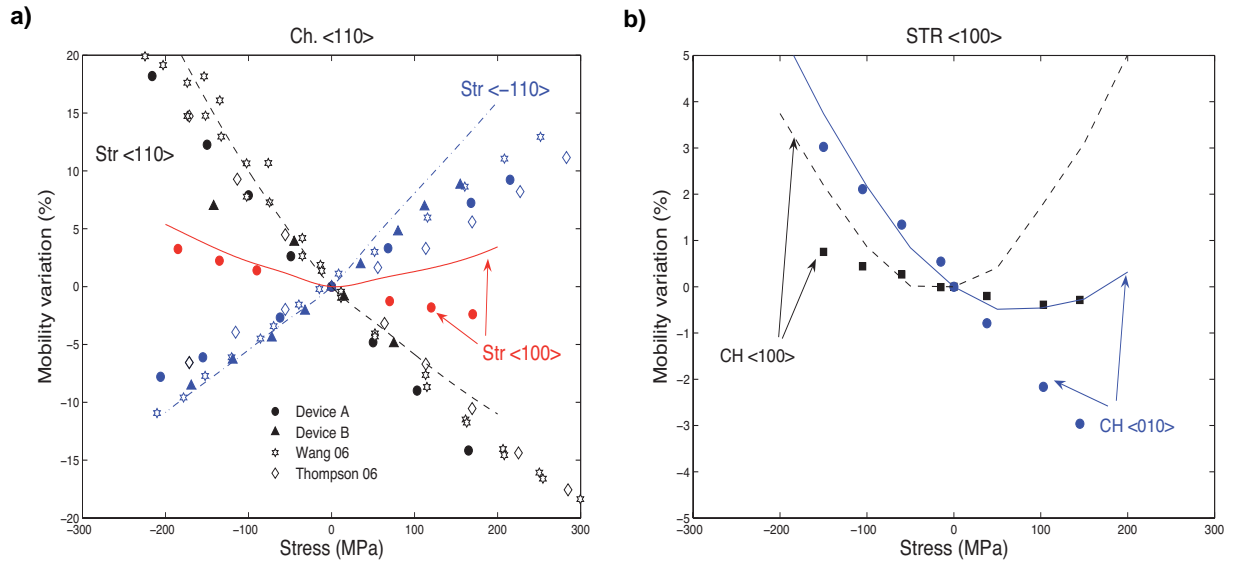


**Figure V.12:** Comparaison des variations de mobilité  $\Delta\mu/\mu$  des trous en fonction de la contrainte, extraites des données expérimentales de Wafer Bending (symboles) et obtenues des simulations Kubo-Greenwood 2Dk (lignes): **a)** contraintes uniaxiales selon les directions <110>, <100> et <110> appliquées sur les dispositifs pMOSFETs orientés <110>; **b)** contraintes <100> appliquées sur les dispositifs orientés <100> et <010>.

La Figure V.12 a) montre les résultats des calculs de gaz de trous 2D dans les dispositifs pMOSFETs orientés <110>. Un bon accord est trouvé avec les données expérimentales pour les trois directions de contraintes <110>, <100> et <110>.

Les Figure V.12 b) et Figure V.13 b) montrent des tendances similaires pour des dispositifs dont les canaux sont orientés selon les directions <100> et <010>. Les différences entre les calculs 2Dk et 3Dk sont même plus prononcées que dans le cas des dispositifs pMOSFETs orientés <110>. Comme montré en Figure V.12 b), les calculs 2Dk des propriétés de transport du gaz de trous sont en bon accord avec les mesures expérimentales. L'accord n'est pas aussi bon qu'en Figure V.12 a), mais les variations relatives sont plus petites dans les dispositifs orientés <100> et <110> et donc plus difficiles à mesurer et à reproduire théoriquement.

Un unique ensemble de coefficients théoriques de piezorésistance, ajustés aux simulations Kubo-Greenwood, est également reporté en Tableau V.3. Les valeurs théoriques sont relativement

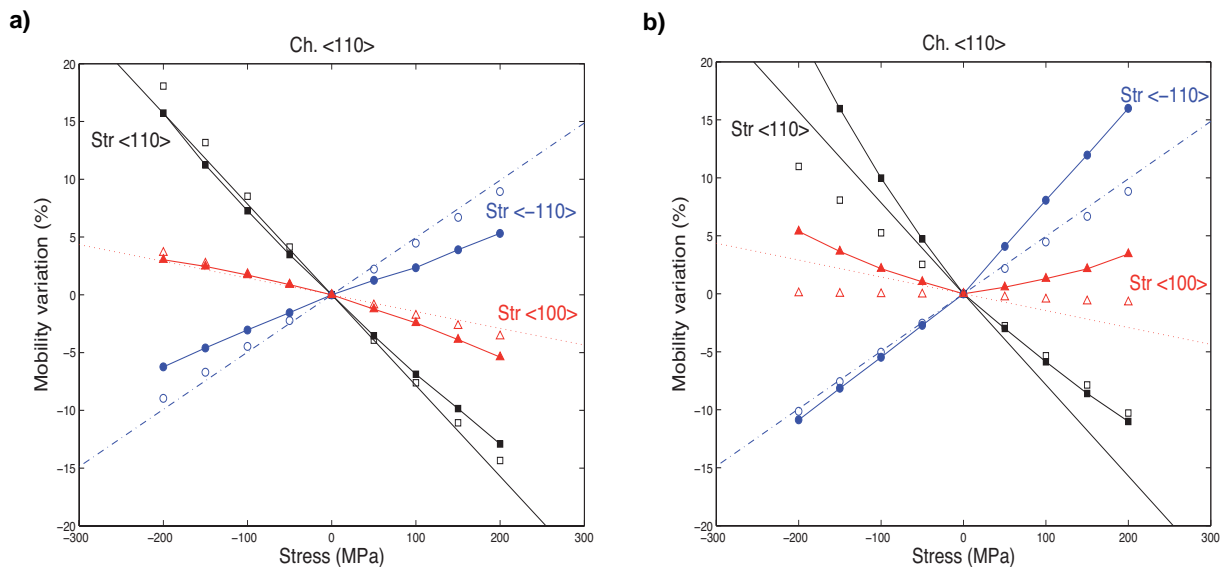


**Figure V.13:** Comparaison des variations de mobilité  $\Delta\mu/\mu$  des trous en fonction de la contrainte, extraites des données expérimentales de Wafer Bending (symboles) et obtenues des simulations Kubo-Greenwood 3Dk (lignes): **a)** contraintes uniaxiales selon les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\bar{1}10$  appliquées sur les dispositifs pMOSFETs orientés  $\langle 110 \rangle$ ; **b)** contraintes  $\langle 100 \rangle$  appliquées sur les dispositifs orientés  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ .

proches de celles extraites des expériences de Wafer Bending. La cohérence des résultats expérimentaux et de simulation conforte l'analyse effectuée sur la base des modifications de la structure de bandes dues à la conjonction des effets de contrainte et de confinement.

### V.3.1.2. Analyse de l'influence des temps de relaxation sur les propriétés de transport des trous sous contrainte uniaxiale

Afin d'étudier l'influence des temps de relaxation sur les propriétés de transport sous contrainte, nous montrons en Figure V.14 les variations de mobilité dans la direction  $\langle 110 \rangle$  d'une couche d'inversion de gaz 2D et 3D de trous, calculées à l'aide de la formule de Kubo-Greenwood tenant compte de temps de relaxation constants et dépendants de la structure de bandes contrainte  $E(k)$ . Dans le souci d'une clarté de l'analyse, ces résultats sont comparés aux prédictions du modèle de piezorésistance utilisant les coefficients extraits des expériences.



**Figure V.14:** Variations de mobilité  $\Delta\mu/\mu$  en fonction de la contrainte dans les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\bar{1}10$  pour une direction de transport  $\langle 110 \rangle$ : **a)** 2Dk, **b)** 3Dk. Les simulations ont été effectuées avec des temps de relaxation  $\tau$  constants (symboles solides), et dépendants de l'énergie (symboles fermés). Les solutions de la théorie de piezorésistance ont de même été tracées en tirets (les coefficients utilisés sont ceux extraits des expériences de Wafer Bending).

En accord avec Wang et al. [6], la variation de mobilité est principalement causée par la déformation des structures de bandes 2D sous contrainte. En effet, les résultats obtenus en considérant un temps de relaxation constant (symboles ouverts) et dépendant de l'énergie (symboles fermés) sont faiblement différents. De plus, il peut être observé que la variation de mobilité devient non-linéaire pour des contraintes supérieures à 100MPa, comme il est observé dans les données expérimentales (voir Figure V.11).

Les résultats des calculs de variations de mobilité des gaz de trous 3D dans les dispositifs orientés  $\langle 110 \rangle$ , montrés en Figure V.13 a), présentent un accord raisonnable avec les expériences pour des directions de contrainte  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Nous trouvons également une bonne comparaison entre les solutions numériques et les expériences pour des contraintes compressives  $\langle 100 \rangle$ . Cependant, les prédictions du modèle par cette approche 3D sont qualitativement incorrectes en ce qui concerne les contraintes tensiles  $\langle 100 \rangle$ . Les contraintes appliquées dans cette direction ont un effet négligeable sur la courbure des bandes des gaz de trous 3D (voir chapitre II). Ainsi, les variations de mobilité, montrées en Figure V.13 a), ne peuvent être attribuées aux déformations des structures de bandes 3D. De fait, la variation de mobilité calculée en utilisant un temps de relaxation constant est négligeable (symboles vides) comme observé en Figure V.14 b). Au contraire, la réduction des mécanismes de relaxation interbande, provenant de la levée de dégénérescence, entraîne des différences significatives dans la variation de mobilité lorsque les taux d'interaction dépendent de l'énergie (symboles pleins). Notamment dans le cas de la contrainte  $\langle 100 \rangle$ , ceci entraîne une augmentation significative de la mobilité pour les cas de contrainte tensile et compressive. Cela n'est pas cohérent avec les données expérimentales et les calculs de gaz 2D de trous.

Ainsi, dans l'approche 3D, la déformation de la structure de bandes sous contrainte ne permet pas de comprendre les variations de mobilité dans les transistors pMOSFETs sous contrainte. En effet, les taux d'interaction contribuent de manière non négligeable à la variation de la mobilité, notamment dans le cas de contrainte  $\langle 100 \rangle$ . En revanche, l'influence des contraintes uniaxiales sur les temps d'interaction intervient relativement moins dans le cas du gaz 2D de porteurs.

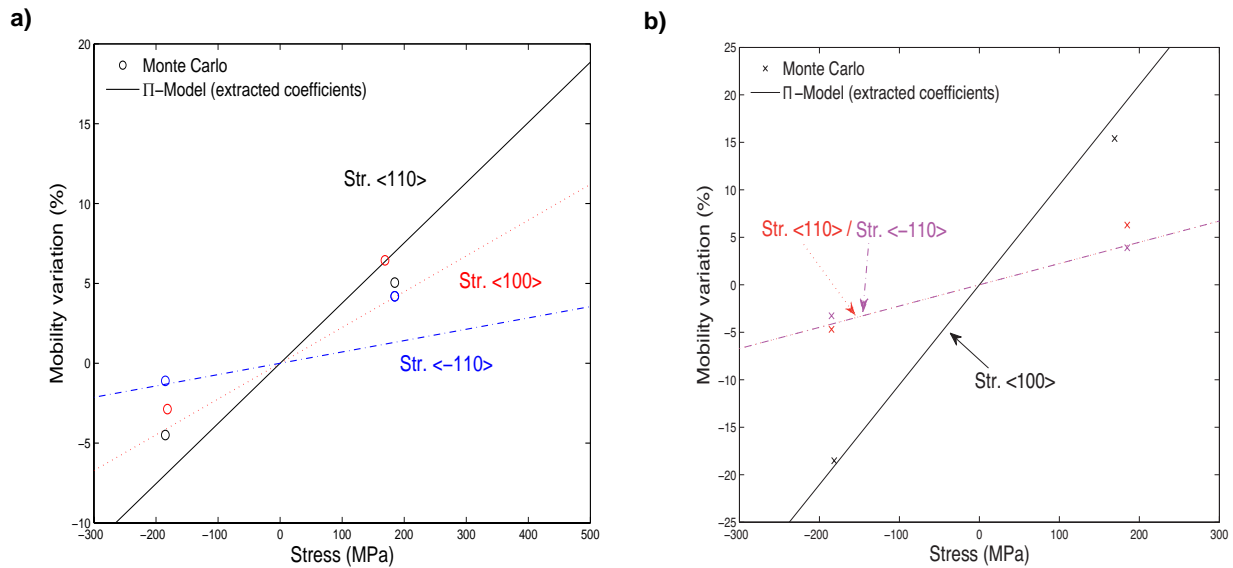
## V.3.2. Simulations Monte Carlo vs. expériences

### V.3.2.1. Confrontation des simulations Monte Carlo et des données expérimentales de Wafer Bending

La Figure V.15 montre les variations de courant  $I_{lin}$  d'un gaz 3D d'électrons calculées à l'aide du Monte Carlo SPARTA<sup>6</sup>. La Figure V.15 a) présente les variations pour des contraintes  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  appliquées sur un dispositif nMOSFET orienté  $\langle 110 \rangle$ . La Figure V.15 b) montre les variations obtenues sous contraintes  $\langle 100 \rangle$  appliquées sur des dispositifs nMOSFETs dont les canaux sont orientés selon les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ . Ces calculs sont effectués sur le dispositif de référence SINANO de 32 nm de longueur de grille (voir chapitre III).

Les résultats obtenus des simulations Monte Carlo sont comparés aux estimations du modèle de piezorésistance dont les coefficients ont été extraits des expériences de Wafer Bending (Tableau V.2). Dans le cas de la Figure V.15 b), le coefficient utilisé de piezorésistance  $\pi_{11}$  dans le cas de contrainte  $\langle 100 \rangle$  est déduit du coefficient de piezorésistance longitudinal  $\pi_L \langle 100 \rangle$  extrait des expériences (Tableau V.2), en maintenant son rapport avec le coefficient  $\pi_{12}$  de manière équivalente à celui du Silicium massif [11].

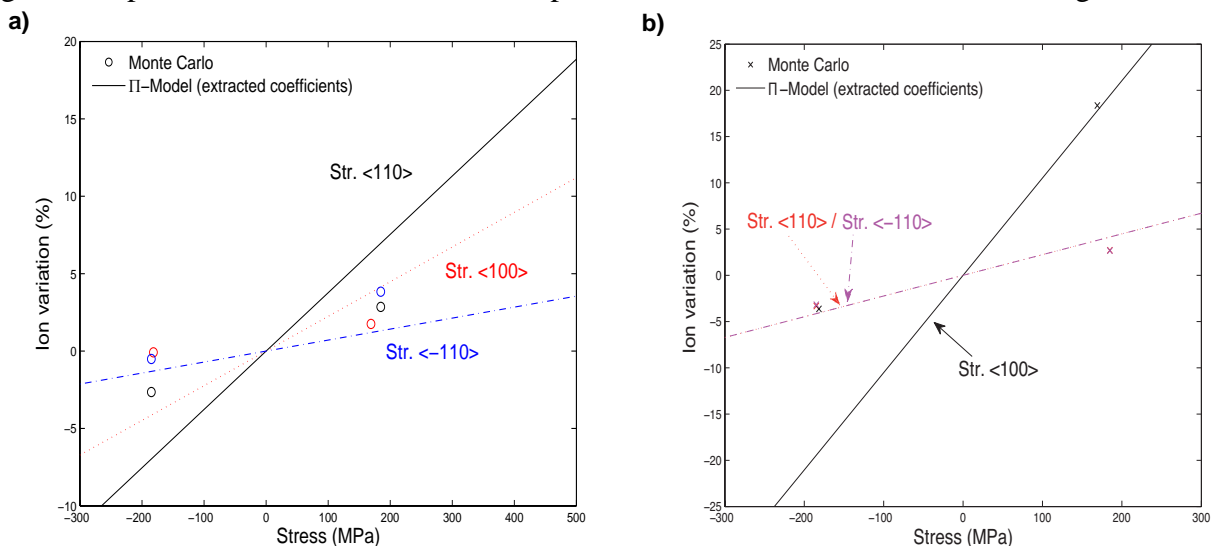
<sup>6</sup>D'après la Section IV.7. du chapitre IV, nous supposons que les propriétés de transport à faible champ d'un système faiblement confiné peuvent être traitées par des simulations Monte Carlo 3Dk. En effet, les variations des masses effectives sous contrainte dans une couche de Si faiblement confinée diffèrent peu de celui du matériau massif.



**Figure V.15:** Variations de mobilité issues de  $\Delta I_{lin}/I_{lin}$  des électrons en fonction de contraintes uniaxiales appliquées dans les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle -110 \rangle$  **a)** sur un dispositif orienté  $\langle 110 \rangle$ ; **b)** sur un dispositif orienté  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations Monte Carlo (en symboles) sont réalisées sur le dispositifs nMOSFETs de référence de 32nm de longueur de grille (Section III.2.2.) pour une tension de Grille  $V_g$  telle que  $V_g - V_{th} = 1$  V. Les solutions de la théorie de piezorésistance ont de même été tracées (les coefficients utilisés sont ceux extraits ou déduits des expériences de Wafer Bending).

On peut noter que SPARTA est en relativement bon accord avec les valeurs du simple modèle de piezorésistance. Nous notons néanmoins certaines erreurs dans le cas des dispositifs contraints dont les canaux sont orientés  $\langle 110 \rangle$  (Figure V.15 a). En effet, pour cette orientation de canal, les faibles valeurs absolues de contrainte ( $\approx 200$ MPa) induisent de faibles variations de mobilité. Auxquels cas, la marge d'erreur des calculs MC peut être de l'ordre de grandeur des variations de mobilité théorique.

La Figure V.16 montre des solutions Monte Carlo se rapportant aux variations de courants  $I_{on}$ . Les calculs du modèle de piezorésistance, utilisant les coefficients extraits des expériences, sont également présentés afin de faciliter la comparaison avec les résultats montrés en Figure V.15. Des



**Figure V.16:** Variations de mobilité issues de  $\Delta I_{on}/I_{on}$  des électrons en fonction de contraintes uniaxiales appliquées dans les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle -110 \rangle$  **a)** sur un dispositif orienté  $\langle 110 \rangle$ ; **b)** sur un dispositif orienté  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations Monte Carlo (en symboles) sont réalisées sur le dispositifs nMOSFETs de référence de 32nm de longueur de grille (Section III.2.2.) pour une tension de Grille  $V_g$  telle que  $V_g - V_{th} = 1$  V. Les solutions de la théorie de piezorésistance ont de même été tracées (les coefficients utilisés sont ceux extraits ou déduits des expériences de Wafer Bending).

tendances similaires à celles des courants  $I_{lin}$  sont observées. Nous notons cependant que les variations de courant obtenues à fort régime de transport sont moindres. Ceci est cohérent avec la faible influence des effets de contrainte sur les propriétés de transport hors-équilibre (non-stationnaire et quasi-balistique) présents dans ces dispositifs à ces conditions de polarisation (voir chapitre III). Un réajustement des coefficients de piezorésistance doit donc être opéré dans la modélisation des régimes de transport à fort champ des dispositifs MOSFETs.

### V.3.2.2. Analyse des coefficients de piezorésistance du gaz d'électrons

La valeur des coefficients de piezorésistance des électrons peut être reliée aux déplacements des extréma de bandes et à la modification des courbures de bandes sous contrainte. Les expressions des coefficients de piezorésistance sont analysées à l'aide des termes de la variation de mobilité du modèle de Drude (Eq-I.5 du chapitre I). Cette relation est illustrée en Figure V.17 dans le cas des contraintes uniaxiales appliquées à un dispositif orienté  $\langle 110 \rangle$ .

Coefficients  $\pi$

$$\pi_{L\langle 110 \rangle} = \frac{\pi_{11} + \pi_{12}}{2} + \frac{\pi_{44}}{2} \quad \pi_{L\langle 100 \rangle} = \frac{\pi_{11} + \pi_{12}}{2} \quad \pi_{L\langle -110 \rangle} = \frac{\pi_{11} + \pi_{12}}{2} - \frac{\pi_{44}}{2}$$

Lien avec les termes de l'Eq-III.9

$$\frac{q\tau(0) \cdot \Delta m}{m(0)} \quad \frac{q\Delta\tau}{m(0)}$$

**Figure V.17:** Schéma analysant les expressions des coefficients de piezorésistance à l'aide des termes de l'Eq-I.5 (chapitre I) issus du développement de la variation de mobilité.

- Pour une direction de transport  $\langle 110 \rangle$  sous contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , les coefficients de piezorésistances longitudinaux,  $\pi_L = \frac{\pi_{11} + \pi_{12} \pm \pi_{44}}{2}$  ne se différencient que par le signe du coefficient  $\pi_{44}$  (+ pour  $\langle 110 \rangle$  et - pour  $\langle \bar{1}10 \rangle$ ). Ce coefficient  $\pi_{44}$  est uniquement lié aux composantes de cisaillement du tenseur de déformation<sup>7</sup>.

Le coefficient  $\pi_{44}$  est lié au terme  $\frac{q\tau(0) \cdot \Delta m}{m(0)}$ , comme illustré en Figure V.17. Ce coefficient est donc corrélé à la variation des masses de courbure. Nous avons prouvé en chapitre II que les masses des vallées de conduction hors-plan  $m_{t, \parallel}$  et  $m_{t, \perp}$  varient en fonction de la contrainte de cisaillement [16][17][18][19].

Notons également que la variation des temps de relaxation, liée au terme  $\frac{q\Delta\tau}{m(0)}$  a également une forte influence dans le changement des propriétés de transport des MOSFETs sous contrainte de cisaillement.

Kanda et al. [19] ont proposé une expression analytique du coefficient  $\pi_{44}$  en fonction de la variation des masses de courbure:

$$\pi_{44} = \frac{-\alpha m^*_{\parallel} s_{44}}{1 + 2L} \quad \text{Eq-V.10}$$

$$\text{avec } L = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel} = m^*_{\parallel} / m^*_{\perp}.$$

où  $\alpha$  est une constante d'ajustement, correspondant à un potentiel de déformation de cisaillement,  $m^*$  est la masse effective.  $s_{44}$  est une constante de compliance.  $\mu$  correspond à la mobilité.

- En ce qui concerne les contraintes uniaxiales  $\langle 100 \rangle$  pour une direction de transport  $\langle 110 \rangle$ , le coefficient vaut  $\pi_L = \frac{\pi_{11} + \pi_{12}}{2}$ . Comme nous l'avons noté en chapitre III, la variation des masses est pratiquement nulle pour cette contrainte. La variation de mobilité s'assimile au terme  $\frac{q\Delta\tau}{m(0)}$  du développement de la variation de mobilité, comme illustré en Figure V.17. La variation de mobilité

<sup>7</sup>La relation entre les tenseurs de déformation et de contrainte permet de lier les composantes de cisaillement de ces tenseurs entre elles par le coefficient d'élasticité  $C_{44}$  (voir ANNEXE II.A du chapitre II).



dans ce cas de contrainte est principalement due aux variations des temps de relaxation et à une nouvelle répartition sous contrainte des porteurs de charge entre les vallées. Or, les temps de relaxation sont non seulement liés aux déplacements des bandes mais aussi à la variation des densités d'états sous contrainte [20][21]. Les expressions des coefficients se développent en fonction des potentiels de déformation  $\Xi_u$  et des constantes de compliance  $s_{11}$  et  $s_{12}$  [19]:

$$\pi_{11} = \frac{2\Xi_u (s_{11}-s_{12})(1-L)}{3k_B T} \quad \text{Eq-V.11}$$

$$\pi_{12} = \frac{-\Xi_u (s_{11}-s_{12})(1-L)}{3k_B T} \quad \text{Eq-V.12}$$

$L$  correspond à l'expression Eq-V.10. De fait, ces expressions analytiques des coefficients  $\pi_{11}$  et  $\pi_{12}$  ne comportent pas de termes de cisaillement.

Dans le cas d'une contrainte  $\langle 100 \rangle$  appliquée sur un dispositif orienté  $\langle 110 \rangle$  ( $\pi_L \langle 100 \rangle = \frac{\pi_{11} + \pi_{12}}{2}$ ), le relatif bon accord entre les simulations Monte Carlo et le modèle de piezorésistance, utilisant des coefficients déduits des expériences de Wafer Bending, prouve que la dépendance des temps de relaxation à la contrainte du simulateur est relativement satisfaisante. Cette analyse est d'autant plus claire dans le cas des contraintes appliquées  $\langle 110 \rangle / \langle \bar{1}10 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  sur un dispositif orienté  $\langle 100 \rangle$  (Figure V.15. b)), où les simulations Monte Carlo et le modèle piezorésistance (avec  $\pi_{11}$  et  $\pi_{12}$  déduits des expériences de Wafer Bending) présentent des résultats similaires.

Les simulations Monte Carlo dans les dispositifs orientés  $\langle 110 \rangle$  pour des contraintes compressives  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  présentent des variations de mobilité de part et d'autre de la variation de mobilité induite par une contrainte compressive  $\langle 100 \rangle$  (Figure V.15 a)). Ces variations, en accord avec les données expérimentales de Wafer Bending, attestent de la sensibilité des simulations Monte Carlo aux variations des masses, notamment de celles des masses transverses des vallées hors-plan Z (voir Figure II.40 en chapitre II et Figure III.27 en chapitre III).

Remarquons également que les variations de mobilité des contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  ne s'insèrent de part et d'autre de la variation de mobilité sous contrainte  $\langle 100 \rangle$  que si la contribution  $\frac{q\Delta\tau}{m(0)}$  est équivalente à la fois dans les variations de mobilité induites par les contraintes  $\langle 100 \rangle$  et celles induites par les contraintes  $\langle 110 \rangle / \langle \bar{1}10 \rangle$ . Les temps de relaxation entre ces contraintes doivent être équivalents:

$$\Delta\tau_{\langle 100 \rangle} = \Delta\tau_{\langle 110 \rangle / \langle \bar{1}10 \rangle} \quad \text{Eq-V.13}$$

Nous avons montré que le gap n'est pas équivalent entre les contraintes  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle / \langle \bar{1}10 \rangle$  (respectivement 0,1937 eV et 0,0795 eV pour une contrainte tensile de 1%, Figure III.26 en chapitre III). La condition Eq-V.13 ne peut être valide que si  $\Delta\tau_{\langle 110 \rangle / \langle \bar{1}10 \rangle}$  est dépendant du cisaillement pour compenser la différence de gap. Or, la densité d'états (DOS) est présente dans les expressions de temps de scattering [19]. Comme nous l'avons vu en chapitre II, les contraintes de cisaillement déforment les vallées Z, la densité d'états s'en trouve alors modifiée.

Finalement, le lien entre les aspects macroscopiques de la théorie de piezorésistance et la perturbation de la structure de bandes sous contrainte reste à détailler. Afin de confirmer l'influence de la densité d'états sur les taux d'interaction des électrons sous contrainte, une étude pourrait être menée sur la base de l'intégration de la première zone de Brillouin, à l'instar de X. F. Fan dans le cas des trous [22].

## V.4. Discussion

Après ajustement de ses coefficients empiriques, la théorie de piezorésistance permet une estimation qualitativement et quantitativement satisfaisante des variations de mobilité sur une large gamme de valeurs de contrainte. Ce modèle est donc encore approprié à la modélisation des dispositifs MOSFETs actuels dont les valeurs contraintes intègrent le domaine de validité du modèle.

Néanmoins, des non-linéarités apparaissent dans les variations de mobilité des dispositifs pour des valeurs modérées de contraintes (à partir de 100MPa dans le cas du transport des trous). Or, les procédés d'ingénierie en cours de développement introduisent des contraintes excédant 1GPa [15][23]. Nous nous attendons à ce que la modélisation des variations de mobilité pour ces valeurs de contrainte dépasse le domaine de validité du simple modèle de piezorésistance au premier ordre d'approximation [14][15][23][24]. L'ajout de coefficients empiriques du tenseur de piezorésistance d'ordre 4 permettrait de prendre en compte ces non-linéarités [12][14][25][26]<sup>8</sup>.

Selon l'approche adoptée dans ce manuscrit, l'ajustement des coefficients du modèle de piezorésistance d'ordre 4 doit nécessiter l'apport de simulations avancées de transport (Monte Carlo, Kubo-Greenwood), dont les bons comportements ont été démontrés dans ce manuscrit.

## V.5. Conclusion

Les coefficients longitudinaux de piezorésistance de couches d'inversion de trous et d'électrons ont été extraits avec précision pour trois directions complémentaires de contrainte. Toutes les mesures peuvent être décrites par un unique ensemble de coefficients de piezorésistance  $\pi_{11}$  et  $\pi_{12}$  et  $\pi_{44}$ .

Dans le cas d'une couche d'inversion des trous, les tendances expérimentales sont bien reproduites par l'approche des simulations Kubo-Greenwood 2Dk. Cette approche permet une compréhension approfondie des propriétés de transport dans les MOSFETs sous contrainte, basée sur une analyse détaillée de la modification des structures de bandes. Il a été observé que l'approche 3Dk ne peut reproduire qualitativement les tendances expérimentales des contraintes uniaxiales  $\langle 100 \rangle$  et biaxiales (001). L'approche auto-cohérente d'un gaz 2D de trous est nécessaire pour comprendre les propriétés de transport à faible champ dans une couche d'inversion. En effet, la nature complexe des couplages entre les effets de confinement et de contrainte doit être prise en compte dans les simulations.

Les propriétés de transport des électrons dans les nMOSFETs à canaux ultra-courts calculés par la méthode Monte Carlo 3Dk reproduisent dans un accord relativement bon les variations de mobilité extraites des expériences de Wafer Bending. Les simulations dans le cas des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  sont notamment sensibles aux modifications des courbures de bandes sous contrainte des vallées hors-plan  $\Delta_z$ .

Finalement, nous avons démontré, dans ce chapitre, la validité du modèle de piezorésistance dans le cadre des valeurs de contrainte actuellement utilisées dans l'industrie. Ce modèle, utilisant les coefficients extraits des expériences de Wafer Bending, peut donc être introduit dans un simulateur de Dérive-Diffusion. Ce modèle de transport sous contrainte peut être inclus dans le cadre d'une organisation opérationnelle de modélisation des transistors MOSFETs contraints.

<sup>8</sup>La Ref. [14] présente un modèle de piezorésistance, utilisant une conversion entre les variations de conduction et de résistance (conversion  $C-R$ ). Un accord satisfaisant est montré entre les résultats de ce modèle et les données expérimentales de la littérature. Toutefois, plusieurs jeux de coefficients de piezorésistance  $\pi_L$  ont été utilisés dans cet article suivant les données expérimentales étudiées (voir Tableau V.3).

## Références

- [1] S. E. Thompson, G. Y. Sun, Y. S. Choi and T. Nishida, "Uniaxial-process-induced strained-Si: Extending the CMOS roadmap", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.53, no.5, pp. 1010-1020 2006.
- [2] S. E. Thompson, S. Suthram, Y. Sun, G. Sun, S. Parthasarathy, M. Chu and T. Nishida, "Future of strained Si/semiconductors in nanoscale MOSFETs", 2006 International Electron Devices Meeting, Vols 1 and 2, pp. 415-418 2006.
- [3] S. Suthram, J. C. Ziegert, T. Nishida and S. E. Thompson, "Piezoresistance Coefficients of (100) Silicon nMOSFETs Measured at Low and High (~1.5 GPa) Channel Stress", IEEE Electron Device Letters, vol.28, no.1, pp. 58-61 2007.
- [4] H. Irie, K. Kita, K. Kyuno and A. Toriumi, "In-plane mobility anisotropy and universality under uni-axial strains in n- and p-MOS inversion layers on (100), (110), and (111) Si", IEEE International Electron Devices Meeting 2004, Technical Digest, pp. 225-228 2004.
- [5] C. Gallon, G. Reibold, G. Ghibaud, R. A. Bianchi and R. Gwoziecki, "Electrical analysis of external mechanical stress effects in short channel MOSFETs on (001) silicon", Solid-State Electronics, vol.48, no.4, pp. 561-566 2004.
- [6] E. X. Wang, P. Matagne, L. Shifren, B. Obradovic, R. Kotlyar, S. Cea, M. Stettler and M. D. Giles, "Physics of hole transport in strained silicon MOSFET inversion layers", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.53, no.8, pp. 1840-1851 2006.
- [7] R. E. Beaty, R. C. Jaeger, J. C. Suhling, R. W. Johnson and R. D. Butler, "Evaluation of piezoresistive coefficient variation in silicon stress sensors using a 4-point bending test fixture", IEEE Transactions on Components Hybrids and Manufacturing Technology, vol.15, no.5, pp. 904-914 1992.
- [8] K. Yamada, M. Nishihara, S. Shimada, M. Tanabe, M. Shimazoe and N. Works, "Temperature dependence of the piezoresistance effects of p-type silicon diffused layers", Electrical Engineering in Japan, vol.103, no.5, pp.8-16 2007.
- [9] F. Cacho, *CONFCALL-2.ppt*, conférence téléphonique inter-sites ST-Crolles ST-Rousset et ST-Agratte, 24 février 2006.
- [10] D. Rideau, *Introduction to MOSFETs Compact Models v1.2*, Formation continue ingénieur INPG, 2006.
- [11] C. M. Smith, "piezoresistance Effect in Germanium and Silicon", Physical Review, vol.94, no.1, pp. 42-49 1954.
- [12] K. Matsuda, K. Suzuki, K. Yamamura and Y. Kanda, "Nonlinear piezoresistance effects in silicon", Journal of Applied Physics, vol.73, no.4, pp. 1838-1847 1993.
- [13] T. Guillaume, *influence des contraintes mécaniques non-intentionnelles sur les performances des transistors MOS à canal ultra-court*, Thèse de Doctorat, INPG, Grenoble, 2005.
- [14] Y. L. Tsang, A. G. O'Neill, B. J. Gallacher and S. H. Olsen, "Using piezoresistance model with c-r conversion for modeling of strain-induced mobility", Ieee Electron Device Letters, vol.29, no.9, pp. 1062-1064 2008.
- [15] S. E. Thompson, M. Armstrong, C. Auth, S. Cea, R. Chau, G. Glass, T. Hoffman, J. Klaus, Z. Y. Ma, B. McIntyre, A. Murthy, B. Obradovic, L. Shifren, S. Sivakumar, S. Tyagi, T. Ghani, K. Mistry, M. Bohr and Y. El-Mansy, "A logic nanotechnology featuring strained-silicon", Ieee Electron Device Letters, vol.25, no.4, pp. 191-193 2004.
- [16] D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini, M. Minondo, C. Tavernier, H. Jaouen and A. Ghetti, "Strained Si, Ge, and Si1-xGex alloys modeled with a first-principles-optimized full-zone k.p method", Physical Review B,

vol.74, no.19, pp. 195208-195228 2006.

- [17] K. Uchida, T. Krishnamohan, K. C. Saraswat and Y. Nishi, "Physical mechanisms of electron mobility enhancement in uniaxial stressed MOSFETs and impact of uniaxial stress engineering in ballistic regime", IEEE International Electron Devices Meeting 2005, Technical Digest, pp. 135-138 2005.
- [18] E. Ungersboeck, S. Dhar, G. Karlowatz, V. Sverdlov, H. Kosina and S. Selberherr, "The effect of general strain on the band structure and electron mobility of silicon", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.54, no.9, pp. 2183-2190 2007.
- [19] Y. Kanda and K. Suzuki, "Origin of the shear piezoresistance coefficient- $\pi_{44}$  of n-type silicon", Physical Review B, vol.43, no.8, pp. 6754-6756 1991.
- [20] C. Jacoboni and L. Reggiani, "The Monte-Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials", Reviews of Modern Physics, vol.55, no.3, pp. 645-705 1983.
- [21] F. M. Bufler, *Full-Band Monte Carlo Simulation of Nanoscale Strained-Silicon MOSFETS*, Series in Microelectronics, vol. 140, (Hartung-Gorre, 2003).
- [22] X. F. Fan, L. F. Register, B. Winstead, M. C. Foisy, W. Q. Chen, X. Zheng, B. Ghosh and S. K. Banerjee, "Hole mobility and thermal velocity enhancement for uniaxial stress in Si up to 4 GPa", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.54, no.2, pp. 291-296 2007.
- [23] L. Smith, V. Moroz, G. Eneman, P. Verheyen, F. Nouri, L. Washington, M. Jurczak, O. Penzin, D. Pramanik and K. De Meyer, "Exploring the limits of stress-enhanced hole mobility", Ieee Electron Device Letters, vol.26, no.9, pp. 652-654 2005.
- [24] L. Shifren, X. Wang, P. Matagne, B. Obradovic, C. Auth, S. Cea, T. Ghani, J. He, T. Hoffman, R. Kotlyar, Z. Ma, K. Mistry, R. Nagisetty, R. Shaheed, M. Stettler, C. Weber and M. D. Giles, "Drive current enhancement in p-type metal-oxide-semiconductor field-effect transistors under shear uniaxial stress", Applied Physics Letters, vol.85, no.25, pp. 6188-6190 2004.
- [25] K. Matsuda, Y. Kanda and K. Suzuki, "2nd-order piezoresistance coefficients of n-type silicon", Japanese Journal of Applied Physics Part 2-Letters, vol.28, no.10, pp. L1676-L1677 1989.
- [26] Y. Ohmura and W. Morinaga, "Fourth-order piezoresistance coefficients in cubic semiconductors", Japanese Journal of Applied Physics Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers, vol.39, no.6A, pp. 3483-3487 2000.

## Simulateurs utilisés

- [27] SPARTA, Sentaurus Device Monte Carlo, release 2007.03, TCAD Sentaurus, SYNOPSYS, 2007.
- [28] Kubo-Greewood 3Dk et 2Dk, K. Huet, M. Feraille, D. Rideau, R. Delamare, V. Aubry-Fortuna, M. Kasbari, S. Blayac, C. Rivero, A. Bournel, C. Tavernier, P. Dollfus and H. Jaouen, "Experimental and theoretical analysis of transport in uniaxially strained pMOSFETs", ESSDERC 2008: Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference, pp.234-237 2008.
- [29] UTOX: D. Rideau, M. Feraille, M. Michailat, Y. M. Niquet, C. Tavernier and H. Jaouen, "On the Validity of the effective mass approximation and the Luttinger  $k \cdot p$  model in fully depleted SOI MOSFETs", Solid-State Electronics, vol.53, no.4, pp.452-46 2008.



# CHAPITRE VI: Conclusion Générale



---

## **CHAPITRE VI: CONCLUSION GÉNÉRALE**

### **VI.1. Résultats**

L'utilisation d'une approche multi-physique multi-échelle tout au long de cette thèse, nous a permis d'apporter de nombreux éléments de compréhension dans l'étude des propriétés de transport dans les dispositifs MOSFETs sous contrainte. Les conclusions à l'issue de ce travail s'inscrivent dans une procédure de calibration des modèles de transport Dérive-Diffusion, couramment utilisés dans l'industrie pour la modélisation des dispositifs MOSFETs sous contrainte. Par ailleurs, les résultats de ce manuscrit se projettent dans la continuité de la feuille de route des industriels, aussi bien pour les technologies actuelles que pour les futures.

Une méthode semi-empirique  $k.p$  30 bandes de calcul de structures de bandes, intégrant les effets de contrainte, a été développée dans le cadre du formalisme de Bir et Pikus au cours de cette thèse. De plus, une nouvelle fonction d'interpolation de la méthode EPM sous contrainte a également été élaborée au cours de cette thèse. Le **chapitre II** présente la procédure d'optimisation des coefficients d'ajustement de ces modèles semi-empiriques. A cette fin, un ensemble de simulations de référence *ab initio*, incluant des corrections GW et des effets relativistes, a été effectué pour les matériaux massifs Si, Ge et des alliages SiGe, relaxés et contraints. Cet ensemble de simulations complète les données expérimentales, notamment à haute énergie, dans la description des structures de bandes. C'est à partir de cet ensemble de données qu'une optimisation gradient-conjugué nous a permis d'ajuster les coefficients des méthodes semi-empiriques EPM et  $k.p$  30 bandes. Le paramètre de déplacement interne, dépendant des contraintes de cisaillement, a notamment été pris en compte dans les méthodes *ab initio* et EPM. Les comparaisons entre les résultats des différentes méthodes se sont focalisées sur la forme globale des structures de bandes, mais aussi en regard du calcul de grandeurs macroscopiques (telles que les énergies des extrema de bandes et masses effectives). Il résulte de cette étude un très bon accord entre les résultats des méthodes de calcul de structures de bandes développées et les données expérimentales de littérature. Ainsi, il a été démontré que les modèles semi-empiriques EPM et  $k.p$  30 bandes peuvent reproduire l'ensemble des données expérimentales / *ab initio* des matériaux massifs contraints, après ajustement de leurs coefficients, avec de faibles coûts de temps de calcul.

Les propriétés de transport de charges dans les matériaux massifs et les dispositifs électroniques sont fortement dépendants de la description des structures de bandes. Des simulations Monte Carlo, présentées en **chapitre III**, mettent en évidence l'influence des contraintes dans les propriétés de transport des transistors MOSFETs à canaux ultra-courts à l'état relaxé et sous contraintes uniaxiales. Dans la perspective d'une étude prédictive, les simulations ont été effectuées sur des structures de référence MOSFETs planaires sur substrat Si pour différentes longueurs de grille. L'adaptation des calculs de structures de bandes, présentés en chapitre II, aux formats des simulations Monte Carlo est exposée en premier lieu. Par la suite, les courants de drain de dispositifs nMOSFETs relaxés, estimés à l'aide de deux simulateurs Monte Carlo de conception différente (d'ensemble: MC++, à flux incident: SPARTA), sont comparés. Des différences dans les valeurs absolues de courant en sortie des simulations des deux méthodes apparaissent en conclusion de cette première étude. Une première conclusion, à laquelle nous avons porté attention, insiste sur la nécessité de prendre en compte des effets de transport hors-équilibre (non-stationnaire et quasi-balistique) dans la modélisation des transistors MOSFETs à canaux ultra-courts. Nous avons également pu mettre en évidence une variation du courant dans les transistors pMOSFETs à canaux ultra-courts entre les directions de transport  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$  sur un substrat (001). De fait, la rotation des canaux de pMOSFETs dans la direction  $\langle 100 \rangle$  améliore la valeur des courants de drain. Cette étude a démontré



que les simulateurs Monte Carlo sont des outils adaptés dans l'étude de variations de caractéristiques à longueur de grille équivalente. Les variations de courant de dispositifs MOSFETs sous diverses directions de contraintes uniaxiales ont été calculées à différentes longueurs de grille avec le simulateur Monte Carlo à flux incident SPARTA. Les variations de courant ont également été simulées dans les régimes de transport linéaire et de saturation des transistors MOSFETs contraints. Les variations de courant obtenues sont conformes aux attentes basées sur les considérations physiques des structures de bandes. Par ailleurs, les diminutions de variations de courant sous contrainte entre les régimes de fonctionnement linéaire et de saturation, bien détaillées dans la littérature, ont également été observées dans nos simulations. Ces diminutions proviennent des effets de transport hors-équilibre présents dans ces dispositifs. Ces mêmes effets sont aussi à l'origine de l'affaiblissement observé des variations de courant à mesure que la longueur de grille est réduite.

Les dimensions actuelles des dispositifs MOSFETs, ou encore des architectures alternatives à base de SOI, induisent un confinement des porteurs de charge sous l'influence de la tension de grille. Par conséquent, le transport de charges en est sensiblement impactée. Le **chapitre IV** présente l'introduction d'un potentiel confinant dans le calcul de structures de bandes. La brisure de symétrie induite par la présence d'un potentiel de confinement a été intégrée à nos méthodes de calcul de structures de bandes (Approximation de la Fonction Enveloppe appliquée aux modèles  $k.p$  6 et 30 bandes). Dans une première approche, cette étude s'est attachée à esquisser le domaine de validité du modèle de l'approximation de la masse effective, couramment utilisé dans l'industrie, dans la description des structures de bandes de couches confinées de matériaux relaxés et contraints. Dans la configuration relaxée, le modèle de l'approximation de la masse effective surestime les déplacements de bandes de valence en fonction du confinement car les couplages interbandes ne sont pas pris en compte. Par la suite, une compensation entre les effets de confinement et ceux de certaines valeurs de contraintes biaxiales sur les bandes de valence a été analysée à l'aide des méthodes  $k.p$  6 et 30 bandes. Dans cette configuration, la structure de bandes du matériau contraint est similaire à celle du Si massif relaxé. Ce phénomène n'est pas reproduit dans le cas de contrainte uniaxiale en raison de la subsistance des couplages complexes entre effets de contrainte et de confinement. Dans le cas des électrons, le déplacement des bandes est bien reproduit par le modèle EMA en comparaison des modèles  $k.p$ . Toutefois, les fortes variations de masses effectives tenant compte de la conjonction des effets de contrainte et de confinement, calculées par les modèles  $k.p$ , soulèvent les limites de l'utilisation des solutions du modèle EMA dans le calcul des propriétés de transport. Dans une seconde approche, un couplage autocohérent, à l'"état de l'art", entre les structures de bandes 2D issues de la méthode  $k.p$  6 bandes et l'équation de Poisson a été développé durant cette thèse afin d'être au plus proche des caractéristiques électrostatiques des dispositifs MOSFETs dans un régime de fonctionnement usuel. Le potentiel issu des calculs  $k.p$ -Poisson-Schrödinger permet la description des structures de bandes dans une couche confinée sous polarisation. Par la suite, ces structures de bandes sont utilisées dans l'étude des propriétés de transport dans les systèmes confinés. Toutefois, la prise en compte des effets de confinement dans la modélisation du transport de charges dans les dispositifs MOSFETs est relativement complexe à mettre en place. Les propriétés de transport de gaz 2D de trous ont été décrites dans une simple couche d'inversion. Les propriétés de transport sont calculées par la formule de transport de Kubo-Greenwood, adaptée au gaz 2D de porteurs. L'influence du couplage entre les effets de contrainte et de confinement dans les propriétés de transport a particulièrement été mise en exergue. Dans l'exemple d'une contrainte appliquée selon la direction  $\langle 100 \rangle$  pour une direction de transport  $\langle 110 \rangle$ , la prise en compte du confinement induit des variations de mobilité qualitativement différentes de celles calculées dans le cas d'un gaz 3D de trous.

Dans la finalité d'une procédure de validation des simulations avancées de transport (Monte Carlo et Kubo-Greenwood), le **chapitre V** confronte les résultats présentés en chapitres III et IV à des données expérimentales effectuées durant cette thèse. A l'aide de la technique Wafer Bending de flexion à quatre pointes, des variations de mobilité sont extraites des caractéristiques de courant de

drain  $I_d - V_g$  à faible champ de transistors MOSFETs sous contrainte. Cette technique expérimentale présente l'avantage d'appliquer sur les systèmes étudiés des contraintes uniformes parfaitement contrôlées. Pour la première fois, l'influence de la contrainte a été mesurée pour trois directions complémentaires sur des dispositifs nMOSFETs et pMOSFETs orientés  $\langle 110 \rangle$ . Des mesures complémentaires ont été effectuées sur des dispositifs pMOSFETs de technologies similaires dont les canaux sont orientés  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 010 \rangle$ . Des contraintes uniaxiales dans la direction  $\langle 100 \rangle$  ont été appliquées sur ces derniers dispositifs. Un ensemble complet de coefficients du modèle de piezorésistance a été extrait de ces expériences. Les valeurs de ces coefficients sont confortées par la bonne cohérence entre les résultats théoriques et les données expérimentales. Les variations de mobilité observées à la fois dans les données théoriques et expérimentales de dispositifs nMOSFETs et pMOSFETs sont en accord avec les attentes basées sur les considérations physiques des structures de bandes. Ce chapitre démontre la nécessité de prendre en compte les effets de confinement dans l'étude des propriétés de transport des MOSFETs. Par conséquent, il met également en évidence les limitations des simulations numériques 3Dk dans l'étude des propriétés de transport d'une couche d'inversion d'un gaz de trous. Il résulte de cette étude l'attestation de la bonne validité du modèle de piezorésistance pour les valeurs de contrainte actuellement en usage dans les procédés de fabrication des transistors. Toutefois, il est observé que les valeurs des coefficients de piezorésistance dans une couche d'inversion de trous peuvent fortement différer de celles des matériaux massifs, notamment sous l'effet de contrainte transverse à un canal orienté  $\langle 100 \rangle$ . En résumé, les valeurs expérimentales des coefficients de piezorésistance, présentées au cours de ce chapitre, peuvent être directement introduites dans les modèles de Dérive Diffusion utilisés dans l'organisation industrielle de la modélisation des dispositifs MOSFETs dans le régime linéaire.

## VI.2. Perspectives

De nombreuses questions restent en suspens à la suite de ces travaux comme autant d'études à explorer en perspective.

Le chapitre II montre le développement de méthodes semi-empiriques de calcul de structures de bandes  $k.p$  et EPM selon une "approche continue" (l'Hamiltonien est résolu sur la base de fonctions d'onde délocalisées dans l'espace réciproque). Dans les systèmes fortement confinés, des études ont démontré le bon comportement des méthodes  $k.p$  EFA selon l'approximation du matériau unique en comparaison du modèle "atomistique" TB (voir chapitre IV). Toutefois, certains effets perturbatifs dans les nanosystèmes (les états de surface à l'interface du puit quantique, le confinement dielectrique provoqué par impuretés, ...) ne peuvent être précisément considérés par l'approche continue. Des comparaisons complémentaires entre les modèles semi-empiriques d'approche "continue" et "atomistique" devront donc être effectuées dans l'étude de ces effets. Par ailleurs, des couplages apparaissent entre les structures de bandes des matériaux constituant l'interface du puit. Dans le cadre d'une description des structures de bandes dans un dispositif alternatif de type SOI, le puit quantique est formé par le confinement des porteurs, lié à l'existence des barrières de potentiel induit par l'oxyde de Silicium. Or, la nature exacte de l'oxyde de type amorphe (issu des procédés de fabrication) n'est pas précisément connue. Une étude théorique *ab initio* permettrait d'étudier les couplages de structures de bandes entre les matériaux Si et SiO<sub>2</sub>.

Le chapitre III montre les résultats de simulations Monte Carlo pour de faibles valeurs absolues de contraintes. Nous avons observé en chapitre II dans le cadre de contraintes de cisaillement  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , que les masses de courbure transverses des vallées hors-plan ne cessent d'évoluer à fortes contraintes. Il serait donc intéressant de faire une étude similaire à celle effectuée en chapitre III pour des valeurs de contraintes plus élevées afin de quantifier l'impact des variations de masses de courbures sur les propriétés de transport des électrons en s'affranchissant de la marge d'incertitude

sur les simulations.

Les simulations Monte Carlo présentées en chapitre III, tiennent compte d'un champ uniforme de contraintes le long d'un dispositif. Or, l'ingénierie de contrainte dans les procédés de fabrication de MOSFETs montre un champ inhomogène de contraintes sur la globalité de la structure et notamment dans le canal (non montré). Ces inhomogénéités doivent être prises en compte dans les simulations Monte Carlo afin de modéliser au mieux le transport des MOSFETs sous contrainte industrielle. A cette fin, la structure de bandes doit être calculée en chaque point du maillage du dispositif pour une valeur donnée de contrainte. Par ailleurs, des fonctions de lissage doivent être élaborées afin d'assurer une continuité dans la description des structures de bandes entre les points de maillage.

Il serait également intéressant à la suite des résultats du chapitre IV d'étendre l'utilisation de la formule de Kubo-Greenwood à la description des propriétés de transport des électrons dans une couche d'inversion. Enfin, il serait de même important d'étudier l'impact du confinement dans les propriétés de transport hors-équilibre d'une structure contrainte de dispositif MOSFET à canal ultra-court. L'utilisation d'un Monte Carlo multi-bande ou d'un simulateur Boltzmann déterministe pourrait se révéler appropriée à cette fin.

Finalement, les coefficients de piezorésistance extraits en chapitre V doivent être intégrés aux simulations de Dérive-Diffusion. Une confrontation des résultats de ces modèles de transport stationnaire avec les caractéristiques expérimentales ( $I_d - V_g$ ,  $g_m$ , ...) de MOSFETs de technologie actuelle, dans un régime à faible champ, permettrait une validation industrielle finale de la procédure multi-physique multi-échelle adoptée au cours de cette thèse. L'analyse des simulations avancées de transport Monte Carlo, en chapitres III et V, prédit une diminution des variations de courant en fonction de la contrainte à forte tension de drain due aux propriétés de transport hors-équilibre (non stationnaire et quasi-balistique). Des expériences complémentaires de Wafer Bending (chapitre V) à fort champ et sur des dispositifs à canaux ultra-courts devront être menées afin de conforter cette analyse théorique et d'étudier l'influence des propriétés de transport hors-équilibre sur les variations de courant. De nouveaux coefficients de piezorésistance pourraient être extraits de ces nouvelles expériences. Une loi de comportement des coefficients piezorésistance pourrait alors être dérivée en fonction de la tension de drain afin de prendre en compte la contribution des effets hors-équilibre thermodynamique dans le transport de charges sous contrainte.

## ANNEXE I.A Développement des modèles de Dérive-Diffusion à partir des moments de l'équation de Boltzmann

Nous développons dans cette section les modèles de Dérive-Diffusion à partir de la méthode des moments de l'équation de transport de Boltzmann.

Les références énumérées dans la suite sont reliées à la liste des références du chapitre I auquel cette annexe se rapporte.

En régime stationnaire, l'équation de Boltzmann s'exprime de la manière suivante:

$$\left[ \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}(\vec{r})}{h} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right] f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll} + s(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad \text{Eq-I.A.1}$$

Le modèle de Dérive-Diffusion est issu de la méthode des moments. Cette méthode consiste à calculer, à partir de l'équation de Boltzmann, les équations de conservation de:

- la densité moyenne des porteurs.
- la densité moyenne des moments.

En intégrant sur la première zone de Brillouin l'équation de Boltzmann, multipliée par la fonction  $h(k)$ , s'exprime comme suit,

$$\int_B h(k) \cdot \left[ \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} f + \frac{\vec{F}(\vec{r})}{h} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} f \right] dk^3 = \int_B h(k) \cdot \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll} \right] dk^3 \quad \text{Eq-I.A.2}$$

$h(k)$  vaut [73]:

- 1 (moment d'ordre 0) pour la conservation des porteurs.
- $hk$  (moment d'ordre 1) pour la conservation de la vitesse.

- Le calcul du moment d'ordre 0, après quelques manipulations mathématiques [73], donne l'équation de conservation des porteurs de charge:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(r, t) - \frac{1}{|q|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{n-s_n}(r, t) = 0 \quad \text{Eq-I.A.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(r, t) + \frac{1}{|q|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{p-s_p}(r, t) = 0 \quad \text{Eq-I.A.4}$$

$n(r, t)$  et  $p(r, t)$  représentent la densité des électrons et des trous.  $\vec{J}$  correspond à la densité de courant, telle que  $\vec{J} = -qn\vec{v}$ .  $s(r, t)$  est liée aux taux de génération et recombinaison.

Sans génération ni recombinaison, la variation temporelle de la charge est égale à la divergence du flux de courant.

- Lors du calcul du moment d'ordre 1, l'intégrale de collision est simplifiée par l'approximation du temps de relaxation [73]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll} = -\frac{f - f_0}{\langle \tau_m \rangle} \quad \text{Eq-I.A.5}$$

où

$$\langle \frac{1}{\tau_m} \rangle = \frac{\int_B hk \cdot f(k) \cdot \tau_m(k) dk^3}{\int_B hk \cdot f(k) dk^3} \quad \text{Eq-I.A.6}$$

$f_0$  est la distribution à l'équilibre.  $\langle 1/\tau_m \rangle$  est la fréquence moyenne d'interaction du moment pondérée par la fonction de distribution liée à la vitesse.

Finalement, le calcul donne l'expression suivante:

$$2\vec{\nabla} \cdot \vec{W} + n\vec{F} = -\left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \vec{p} \quad \text{Eq-I.A.7}$$

où  $\vec{p} = nm_c^* \vec{v}$  est l'impulsion et  $W = \frac{1}{2}n\langle hkv \rangle$  est une énergie.  $m_c^*$  est la masse effective de conduction.

Enfin, en développant le gradient de l'équation Eq-I.A.7 en fonction de l'agitation thermique [61], puis, en remplaçant l'expression de l'impulsion:  $\vec{p} = -\frac{m_c^* J}{qn}$ , nous retrouvons les expressions du modèle Dérive-Diffusion:

$$\vec{J}_n(r, t) = |q|D_n \vec{\nabla} n(r, t) + |q|n(r, t)\mu_n \vec{E} \quad \text{Eq-I.A.8}$$

$$\vec{J}_p(r, t) = -|q|D_p \vec{\nabla} p(r, t) + |q|p(r, t)\mu_p \vec{E} \quad \text{Eq-I.A.9}$$

$$D_n = \frac{kT}{|q|}\mu_n, \quad D_p = \frac{kT}{|q|}\mu_p \quad \text{Eq-I.A.10}$$

$D$  représente le coefficient de diffusion.  $\mu$  correspond à la mobilité. La mobilité effective  $\mu$  lie la vitesse de dérive  $v_d$ , qui correspond à la vitesse moyenne des porteurs de charge, à la valeur du champ électrique  $E$ :  $v_d = \mu E$ . Dans les expressions du modèle de dérive-diffusion, elle se rattache au modèle de Drude (Eq-I.5 du chapitre I).

Enfin dans le cadre de simulations de transport dans les dispositifs électroniques, l'ensemble des équations Eq-I.A.3, Eq-I.A.4, Eq-I.A.8 et Eq-I.A.9 est couplé à l'équation de Poisson:

$$\nabla(\epsilon_r \vec{E}) = |q|(p(r, t) - n(r, t) + N_d - N_a) \quad \text{Eq-I.A.11}$$

$N_d$  et  $N_a$  correspondent aux dopages respectifs en ions donneurs et accepteurs d'électrons et  $\epsilon_r$  est la constante diélectrique relative du semi-conducteur étudié.

## ANNEXE I.B Principes de fonctionnement d'un simulateur Monte Carlo

Les évènements simulés par la méthode du Monte Carlo, restent proches des phénomènes physiques fondamentaux, puisqu'elle résout l'équation maîtresse du transport de Boltzmann dans sa globalité. L'approche semi-classique des simulateurs Monte Carlo permet une bonne description des propriétés de transport hors-équilibre thermodynamique des dispositifs à l'échelle nanométrique [74]. Depuis quelques années, les simulateurs Monte Carlo sont devenus des outils de référence dans l'étude du transport dans ces dispositifs. De plus, les simulations Monte Carlo servent de référence dans la calibration des méthodes des moments de l'équation de Boltzmann, plus efficaces en temps de calcul (Dérive-Diffusion, Hydrodynamique, ...).

Les références énumérées dans la suite sont reliées à la liste des références du chapitre I auquel cette annexe se rapporte.

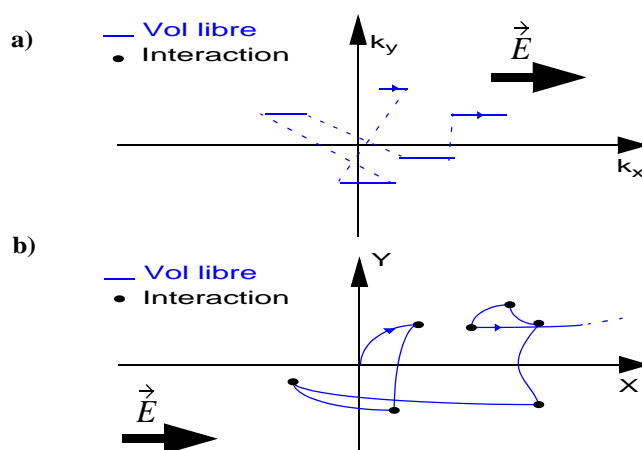
Comme illustré en Figure I.7 du chapitre I, la méthode Monte Carlo est constituée de trois principales fonctions:

- le transport de particules.
- la collecte de statistiques.
- la résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson.

Nous complétons la description de ces principales fonctions dans cette annexe.

### I.B.1. Transport des particules dans la méthode Monte Carlo

La simulation du transport par Monte Carlo dans un dispositif électronique s'effectue à l'aide de particules. L'ensemble des coordonnées des particules se réfère à l'espace réel  $(x, y, z)$  ainsi qu'à l'espace des vecteurs d'onde  $(k_x, k_y, k_z)$ . Les particules suivent une trajectoire, constituée d'une succession de chemins, appelés vols libres, interrompus par les interactions de la particule avec son environnement. Ces interactions sont liées aux intégrales de collision (voir Section I.4.1.1.). La Figure I.B.1 représente la trajectoire d'une particule dans l'espace réciproque (Figure I.B.1 a)) ainsi que dans l'espace réel (Figure I.B.1 b)).



**Figure I.B.1:** Principes de la méthode Monte Carlo dans un espace à deux dimensions. **a)** Trajectoire représentative d'une particule dans l'espace des vecteurs d'onde. Dans cet exemple, la particule est soumise à une force orientée le long de l'axe  $x$ ; **b)** Trajectoire d'une particule dans un espace à 2 dimensions  $x$ - $y$ . Les fragments paraboliques constituent les vols libres des électrons. Les points noirs représentent les interactions subies par la particule. D'après [56].

Le transport des porteurs de charge sur les vols libres est régi par les lois semi-classiques:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = q\vec{F} \quad \text{Eq-I.B.1}$$

$$\hbar \frac{d\vec{r}}{dt} = \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \quad \text{Eq-I.B.2}$$

Les interactions de l'électron peuvent provenir de perturbations liées au réseau cristallin (phonons, impuretés), ou encore, de la géométrie du dispositif étudié (rugosité de surface pour les MOSFETs). La diffusion des porteurs de charge est reliée à la probabilité d'interaction globale par l'expression suivante [73]:

$$\left. \frac{dn}{dt} \right|_{coll} = \Gamma(hk)n \quad \text{Eq-I.B.3}$$

Où le taux global d'interaction  $\Gamma(hk)$  est calculé en sommant sur l'ensemble des interactions  $m$  du porteur de charge avec son environnement:

$$\Gamma(hk) = \sum_m \frac{1}{\tau_m(hk)} \quad \text{Eq-I.B.4}$$

Ce taux globale d'interaction englobe l'interaction fictive *self-scattering*. A l'issue de cet évènement, l'électrons ne subit aucune modification de trajectoire et de vecteur d'onde.

Il est de nouveau important de noter que les structures de bandes sont des éléments clefs des simulations Monte Carlo dans la description des énergies et des vitesses disponibles par les électrons. Le calcul des taux d'interaction des particules  $\Gamma(hk)$  avec leur environnement dépend aussi de la structure de bandes (voir équation Eq-I.36 du chapitre I).

Pour simuler un vol libre, 4 nombres, tirés aléatoirement, sont nécessaires. Le fonctionnement de la méthode est résumé par les principales étapes suivantes et illustré par la Figure I.B.2:

i. La durée de vol libre correspond à l'intervalle de temps entre deux collisions. La première étape consiste à tirer au sort un temps de vol libre à l'aide du nombre aléatoire  $r_1$  ( $0 < r_1 < 1$ ):

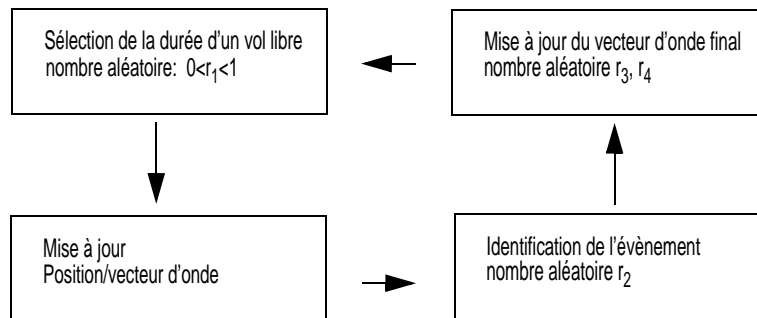
$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma(hk)} \ln(r_1) \quad \text{Eq-I.B.5}$$

ii. La localisation dans l'espace des phases (la position dans l'espace réel et le vecteur d'onde) est régulièrement mise à jour jusqu'à la fin du vol libre.

iii. Identification de l'évènement suivant à partir d'un nombre aléatoire  $r_2$  ( $0 < r_2 < 1$ ):

$$\frac{\sum_{l=1}^p \frac{1}{\tau_m(hk)}}{\Gamma} \leq r_2 \leq \frac{\sum_{l=1}^{p+1} \frac{1}{\tau_m(hk)}}{\Gamma} \quad l=1, 2, 3, \dots, p+1 \quad \text{Eq-I.B.6}$$

où  $l$  est l'interaction que subit le porteur et  $p$  est le nombre total d'interactions. Cet identification prend en compte l'interaction *self-scattering*.



**Figure I.B.2:** Principe de fonctionnement d'un Monte Carlo pour le calcul de la trajectoire des porteurs de charge [73].

iv. Après l'interaction, une nouvelle énergie et un nouveau vecteur d'onde sont déterminés pour la particule. Ainsi, la vitesse, dépendant du vecteur d'onde  $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} E(k)$ , évolue avec la collision. Deux autres nombres aléatoires  $r_3, r_4$  intègrent le processus déterminant le vecteur d'onde final de l'électron.

### I.B.2. Collecte de statistiques et résolution de l'équation de Poisson

Lorsque les temps de vol libre et les interactions sont calculés [73], plusieurs étapes de calcul sont réalisées par le simulateur Monte Carlo:

i) Les statistiques des porteurs de charge sont collectées (vitesse de groupe, énergie moyenne, ...) dans chaque maille du dispositif. Une estimation du courant de drain est effectuée.

ii) Résolution de l'équation de Poisson avec la distribution de porteurs de charge dans la structure du dispositif. Le potentiel et le champ électrique en sont déduits. Le simulateur utilise ce potentiel électrique lors du prochain intervalle de simulation.

On recommence l'enchaînement des opérations avec les nouvelles positions et le nouveau potentiel. La simulation est finie lorsque la convergence est atteinte, c'est à dire, une fois que l'erreur statistique sur le courant de drain est inférieure à une barre d'erreur satisfaisante (valeur fournie par l'utilisateur).

La collecte des statistiques et la résolution de l'équation de Poisson s'effectuent par intervalle de temps régulier. De manière intrinsèque, l'approche statistique de ces simulateurs Monte Carlo génère un bruitage dans les résultats obtenus.

### I.B.3. Convergence en fonction du régime

L'utilisation des simulations Monte Carlo nous permet une bonne estimation des courants à fort champ. C'est sous ces conditions de polarisation que les simulations Monte Carlo sont les plus efficaces. De plus, la convergence souhaitée est atteinte plus rapidement que dans un régime à faible champ pour une même précision. Dans le cas des simulations à faible champ, la vitesse de dérive  $v_d$  représente une petite fraction de la vitesse thermique  $v_{therm}$ , l'estimation de  $v_d$  est alors fortement influencée par le bruit statistique (variance) provenant de  $v_{therm}$  [56]<sup>1</sup>. Cependant, selon la loi des grands nombres, plus le nombre de particules pris en compte dans la simulation et donc la durée des simulations est élevée, plus le bruit statistique est réduit.

<sup>1</sup> Il est à noter que dans les simulations à flux incident, l'incertitude en fonction du nombre  $N$  de vols libres  $\Delta t$  décroît comme  $1/(\sqrt{N} \times \Delta t)$ . Dans le cadre des Monte Carlo d'ensemble, la précision peut également être affinée en augmentant le nombre de particules simulées parallèlement. Une précision suffisante ne peut être atteinte qu'au prix de longues simulations de deux ordres de grandeur par rapport aux simulations Dérive-Diffusion.





## ANNEXE II.A Relations entre les tenseurs de contrainte et de déformation dans les cas typiques de contraintes uniaxiales et biaxiales.

Les notions élémentaires des relations entre les tenseurs de contrainte et de déformation sont brièvement présentées dans cette annexe. Par ailleurs, les tenseurs de déformation et de contrainte pour des cas typiques de contraintes uniaxiales et biaxiales sont également reportés.

Les références énumérées dans la suite sont reliées à la liste des références du chapitre II auquel cette annexe se rapporte.

### II.A.1. Notions élémentaires sur les relations entre les tenseurs de contrainte et de déformation

Les tenseurs de contrainte et de déformation, respectivement  $\bar{\sigma}$  et  $\bar{\varepsilon}$  sous leur notation matricielle, s'expriment de la manière suivante:

$$\bar{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \text{ et } \bar{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.1}$$

Les termes diagonaux de la matrice correspondent aux composantes hydrostatiques, tandis que les termes non diagonaux sont associés aux termes de cisaillement. Les contraintes en compression sont négatives, tandis que les contraintes en tension sont positives par convention.

Dans leur notation vectorielle, ceux-ci s'expriment comme suit:

$$\sigma_{vect} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \text{ où } \begin{matrix} \sigma_1 = \sigma_{xx} \\ \sigma_2 = \sigma_{yy} \\ \sigma_3 = \sigma_{zz} \\ \sigma_4 = \sigma_{yz} \\ \sigma_5 = \sigma_{xz} \\ \sigma_6 = \sigma_{xy} \end{matrix} \text{ et } \varepsilon_{vect} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \text{ où } \begin{matrix} \varepsilon_1 = \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_2 = \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_3 = \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_4 = 2\varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{xy} \end{matrix} \quad \text{Eq-II.A.2}$$

Il est important de remarquer que dans la notation vectorielle du tenseur de déformation, les termes de cisaillement sont multipliés par deux. L'oubli de cette règle conduit à des résultats erronés.

Les tenseurs de contrainte et de déformation dans le système SCC, dans leurs notations vectorielles, sont reliés par les expressions suivantes dans le cas des structures zinc-blende:

$$\sigma_{vect}^{SCC} = \bar{C} \varepsilon_{vect}^{SCC} \text{ où } \bar{C} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.3}$$

ou encore,

$$\varepsilon_{vect}^{SCC} = \bar{S} \sigma_{vect}^{SCC} \text{ où } \bar{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.4}$$

$\bar{c}$  et  $\bar{\varepsilon}$  sont appelés tenseurs d'élasticité et de compliance, ici représentés. Ces deux notations matricielles sont reliées par:

$$\bar{c} = \{\bar{s}\}^{-1} \quad \text{Eq-II.A.5}$$

Les valeurs des coefficients d'élasticité et de compliance pour le Si et le Ge sont reportées en Tableau II.A.1.

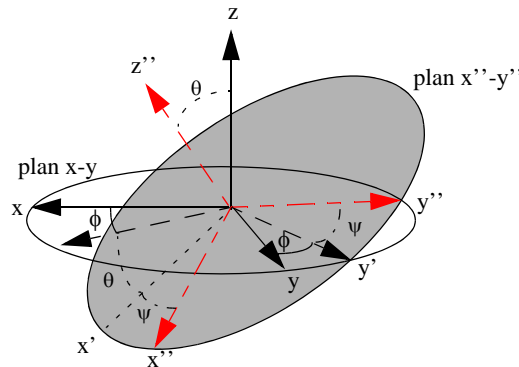
**Tableau II.A.1:** Valeurs expérimentales des coefficients de compliance et d'élasticité du Silicium et Germanium à la température ambiante [16].

Matériau	Compliance [ $10^{-13} \text{ Pa}^{-1}$ ]			Elasticité [ $10^9 \text{ Pa}$ ]		
	$s_{11}$	$s_{12}$	$s_{44}$	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{44}$
Si	76.8	-21.4	126.0	165.7	63.9	79.6
Ge	96.4	-26.6	149.0	129.2	47.9	67.0

Ces formules ne s'appliquent que dans le cas où les tenseurs de déformation et de contrainte sont exprimés dans le système SCC. Dans le cas d'un tenseur de contrainte exprimé dans un système de coordonnées arbitraires  $\bar{\sigma}^{arb}$ , il faut donc exprimer les composantes du tenseur dans le système SCC à l'aide d'une matrice de passage:

$$P_{arb \rightarrow scc}^{-1}(\theta, \phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi \cos \theta \cos \psi - \sin \phi \sin \psi & \sin \phi \cos \theta \cos \psi + \cos \phi \sin \psi & -\sin \theta \cos \psi \\ -\cos \phi \cos \theta \sin \psi - \sin \phi \cos \psi & -\sin \phi \cos \theta \sin \psi + \cos \phi \cos \psi & \sin \theta \sin \psi \\ \cos \phi \sin \theta & \sin \phi \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.6}$$

$\phi$ ,  $\theta$  et  $\psi$  représentent les angles d'Euler nécessaires au passage du système de coordonnées SCC à celui de coordonnées arbitraires, représentés en Figure II.A.1.



**Figure II.A.1:** Changement de système de coordonnées  $(x, y, z)$  vers le système de coordonnées  $(x'', y'', z'')$  avec les angles d'Euler  $\phi$ ,  $\theta$  et  $\psi$ .

En utilisant cette relation entre les systèmes de coordonnées, nous pouvons exprimer les composantes du tenseur de déformation dans le système SCC comme suit:

$$\bar{\varepsilon}^{SCC} = \bar{s} P_{arb \rightarrow scc} \bar{\sigma}^{arb} P_{arb \rightarrow scc}^{-1} \quad \text{Eq-II.A.7}$$

## II.A.2. Notions de base sur les contraintes biaxiales et uniaxiales.

Les contraintes modifient la structure cristalline des matériaux constituant le dispositif électronique. Nous aurons donc une modification de la structure électronique des porteurs dans ces matériaux<sup>1</sup>. La contrainte est introduite dans les calculs de structures de bandes par l'intermédiaire des composantes du tenseur de déformation, généralement exprimé dans le système SCC. Nous détaillons dans cette section l'expression des tenseurs de déformation et de contrainte dans les cas typiques de contraintes biaxiale et uniaxiale.

### II.A.2.1. Cas de contraintes biaxiales

Quand des couches de Si et Ge sont déposées par épitaxie sur un substrat  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ , celles-ci sont respectivement sujettes aux contraintes biaxiales compressive et tensile. Le tenseur des contraintes biaxiales s'écrit:

$$\bar{\sigma}^{scc} = \begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.8}$$

où  $\sigma$  correspond à l'intensité de la contrainte.

En utilisant les lois de la mécanique continue, le tenseur de déformation s'écrit dans le Système de Coordonnée du Dispositif (SCD) comme suit:

$$\varepsilon^{scd} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\perp} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.9}$$

La déformation longitudinale  $\varepsilon_{||} = a(y)/a - 1$  est imposée par la différence entre le paramètre de maille longitudinal dans le matériau massif relaxé et celui du matériau contraint (fonction, par exemple, de la fraction molaire  $y$  de Ge de l'alliage massif  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  sur lequel est déposée une couche contrainte de Si). La déformation normale  $\varepsilon_{\perp} = -D\varepsilon_{||}$  dépend du coefficient de Poisson  $D$  qui détermine le déplacement des plans atomiques le long des directions normales à la contrainte biaxiale (pour les cas de contraintes présentés, les directions sont  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ ).

La Figure II.24 montre, pour différentes orientations du matériau relaxé, les vecteurs de base  $(e_{||}^{(1)}, e_{||}^{(2)}, e_{\perp})$  dans lesquels le tenseur de contrainte biaxiale est exprimé dans sa forme diagonale (Eq-II.A.9). Dans le cas d'un matériau massif relaxé orienté en  $\langle 001 \rangle$ , le SCC coïncide avec le SCD. En revanche, dans les cas où le matériau est orienté en  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ , le tenseur de contrainte peut être exprimé dans le système SCC au moyen d'une rotation de matrice appropriée à l'aide de matrice de passage  $\bar{P}$ . La composante du tenseur de contrainte dans le système SCC, s'écrit comme suit:

$$\sigma_{ij}^{SCC} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} P_{\beta j} P_{\alpha i} \sigma_{\alpha\beta}^{arb} \quad \text{Eq-II.A.10}$$

Les angles Euler  $\phi$ ,  $\theta$  et  $\psi$ , nécessaires aux calculs des matrices de passage (équation Eq-II.A.6, Section II.A.1.) valent  $\phi = \pi/4$ ,  $\theta = \arccos(1/\sqrt{3})$  et  $\psi = 3\pi/2$  dans le cas de la contrainte biaxiale dans le plan (111), tandis qu'ils valent  $\phi = \pi/4$ ,  $\theta = 0$  et  $\psi = 0$  dans le cas de la contrainte biaxiale dans le plan (110).

Le Tableau II.A.2 synthétise les expressions des composantes des tenseurs de déformation pour chaque cas de contraintes biaxiales dans les plans (000), (111) et (110) en fonction des

<sup>1</sup>En effet, la périodicité du potentiel externe cristallin  $V_{ext}(\vec{r})$  dans l'Hamiltonien total du système (Eq-II.4) va être modifiée par la contrainte.

coefficients d'élasticité et de compliance (voir Tableau II.A.1). Les matrices de passages  $\bar{P}$  sont également calculées pour ces orientations de contraintes.

**Tableau II.A.2:** Expression des composantes  $\varepsilon_{ij}$  des tenseurs de déformation pour des contraintes biaxiales d'intensité  $\sigma$ , appliquées dans les plans (100), (110) et (111), dans un semi-conducteur de type zinc-blende;  $c_{11}$ , et  $c_{44}$  correspondent aux composantes des tenseurs d'élasticité;  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  et  $s_{44}$  dénotent les composantes des tenseurs de compliance.  $\phi$ ,  $\theta$  et  $\psi$  correspondent aux angles d'Euler nécessaires au changement de repère.

	Plan de contraintes biaxiales		
	(100)	(111)	(110)
Système d'axes SCD	$\langle 100 \rangle, \langle 010 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$	$\langle 100 \rangle, \langle 1\bar{1}0 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$	$\langle 111 \rangle, \langle 1\bar{1}0 \rangle$ et $\langle 1\bar{1}2 \rangle$
Composantes $\varepsilon_{\substack{-scd \\ \varepsilon}}$	$\varepsilon_{  } = (s_{11} + s_{12})\sigma$ $\varepsilon_{\perp} = 2s_{12}\sigma$	$\varepsilon_{  } = \frac{1}{6}(4s_{11} + 8s_{12} + s_{44})\sigma$ $\varepsilon_{\perp} = \frac{1}{3}(2s_{11} + 4s_{12} - s_{44})\sigma$	$\varepsilon_{  } = (s_{11} + s_{12})\sigma$ $\varepsilon_{\perp} = 2s_{12}\sigma$
Angles matrice $\bar{P}$	$\phi = 0$ , $\theta = 0$ et $\psi = 0$	$\phi = \pi/4$ , $\theta = \arccos(1/\sqrt{3})$ et $\psi = 3\pi/2$	$\phi = \pi/4$ , $\theta = 0$ et $\psi = 0$
Matrice P $x^{scd} \rightarrow x^{scc}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{scc}$
Contrainte $\sigma_{\substack{-scd \\ \sigma}} \rightarrow x^{scc}$	$\begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} \frac{2}{3}\sigma & -\frac{1}{3}\sigma & -\frac{1}{3}\sigma \\ -\frac{1}{3}\sigma & \frac{2}{3}\sigma & -\frac{1}{3}\sigma \\ -\frac{1}{3}\sigma & -\frac{1}{3}\sigma & \frac{2}{3}\sigma \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{scc}$
Déformation $\varepsilon_{\substack{-scc \\ \varepsilon}}$	$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xx} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & -\left(\frac{\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}}{2}\right) & 0 \\ -\left(\frac{\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}}{2}\right) & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}$
Relations entre les composantes $\varepsilon_{\substack{scc \\ \varepsilon}}^scd$ et $\varepsilon_{\substack{-scd \\ \varepsilon}}$	$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{  } \\ \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\perp} \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0 \end{cases}$	$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \frac{1}{3}(\varepsilon_{\perp} + 2\varepsilon_{  }) \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = \frac{1}{3}(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{  }) \end{cases}$	$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{  }) \\ \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{  } \\ \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{  }) \\ \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0 \end{cases}$
Coefficients de Poisson $D$	$D_{001} = 2(c_{12}/c_{11})$	$D_{111} = \frac{(2c_{11} + 4c_{12} - 4c_{44})}{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}$	$D_{110} = \frac{(c_{11} + 3c_{12} - 2c_{44})}{(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})}$

II.A.2.2. Cas de contraintes uniaxiales

Le tenseur de contrainte uniaxiale s'écrit dans le système de coordonnées du dispositif:

$$\bar{\sigma}^{scd} = \begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.11}$$

Le tenseur de déformation associé est de la forme:

$$\varepsilon^{scd} = \begin{bmatrix} \varepsilon'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{Eq-II.A.12}$$

Nous montrons en Tableau II.A.3 l'expression des composantes des tenseurs de déformation pour chaque cas de contrainte uniaxiale  $\sigma$   $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  en fonction des coefficients d'élasticité et de compliance (voir Tableau II.A.1). Les matrices de passage  $\bar{P}$  sont également calculées pour ces orientations de contraintes.

**Tableau II.A.3:** Expression des composantes  $\varepsilon_{ij}$  des tenseurs de déformation pour des contraintes d'intensité  $\sigma$ , appliquées selon les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , dans un semi-conducteur de type zinc-blende;  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  et  $c_{44}$  correspondent aux composantes des tenseurs d'élasticité;  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  et  $s_{44}$  dénotent les composantes des tenseurs de compliance.  $\phi$ ,  $\theta$  et  $\psi$  correspondent aux angles d'Euler nécessaires au changement de repère.

	Direction de la contrainte uniaxiale		
	$\sigma // \langle 110 \rangle$	$\sigma // \langle 100 \rangle$	$\sigma // \langle \bar{1}10 \rangle$
Système d'axes SCD	$\langle 100 \rangle$ , $\langle 010 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$	$\langle 100 \rangle$ , $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$	$\langle 111 \rangle$ , $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ et $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$
Composantes $\bar{\varepsilon}^{scd}$	$\varepsilon'_{xx} = \varepsilon'_{yy} = \frac{1}{4}(2s_{11} + 2s_{12} + s_{44})\sigma$ $\varepsilon'_{zz} = s_{12}\sigma$	$\varepsilon'_{xx} = s_{11}\sigma$ $\varepsilon'_{yy} = \varepsilon'_{zz} = s_{12}\sigma$	$\varepsilon'_{xx} = \varepsilon'_{yy} = \frac{1}{4}(2s_{11} + 2s_{12} + s_{44})\sigma$ $\varepsilon'_{zz} = s_{12}\sigma$
Angles matrice $\bar{P}$	$\phi = \pi/4$ ; $\theta = 0$ et $\psi = 0$	$\phi = 0$ ; $\theta = 0$	$\phi = -\pi/4$ ; $\theta = 0$ et $\psi = 0$
Matrice $\bar{P}$ $x^{scd} \rightarrow x^{scc}$	$\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{scc}$
Contrainte $\bar{\sigma}^{scd}$ $x^{scd} \rightarrow x^{scc}$	$\begin{bmatrix} \frac{\sigma}{2} & \frac{\sigma}{2} & 0 \\ \frac{\sigma}{2} & \frac{\sigma}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{scc}$	$\begin{bmatrix} \frac{\sigma}{2} & -\frac{\sigma}{2} & 0 \\ -\frac{\sigma}{2} & \frac{\sigma}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{scc}$

**Tableau II.A.3:** Expression des composantes  $\varepsilon_{ij}$  des tenseurs de déformation pour des contraintes d'intensité  $\sigma$ , appliquées selon les directions  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , dans un semi-conducteur de type zinc-blende;  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  et  $c_{44}$  correspondent aux composantes des tenseurs d'élasticité;  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  et  $s_{44}$  dénotent les composantes des tenseurs de compliances.  $\phi$ ,  $\theta$  et  $\psi$  correspondent aux angles d'Euler nécessaires au changement de repère.

	Direction de la contrainte uniaxiale		
	$\sigma // \langle 110 \rangle$	$\sigma // \langle 100 \rangle$	$\sigma // \langle \bar{1}10 \rangle$
Déformation $\varepsilon^{scc}$	$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \frac{\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}}{2} & 0 \\ \frac{\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}}{2} & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & -\left(\frac{\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}}{2}\right) & 0 \\ -\left(\frac{\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}}{2}\right) & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}$
Relations entre les composantes $\varepsilon^{scc}$	$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12})\sigma \\ \varepsilon_{zz} &= -2\frac{c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2}\left(\frac{c_{11} + c_{12}}{c_{44}} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11}c_{44}}\right)\varepsilon_{xx} \end{aligned}$	$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= s_{11}\sigma \\ \varepsilon_{zz} &= -\left(\frac{c_{12}}{c_{12} + c_{11}}\right)\varepsilon_{xx} \end{aligned}$	$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12})\sigma \\ \varepsilon_{zz} &= -2\frac{c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2}\left(\frac{c_{11} + c_{12}}{c_{44}} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11}c_{44}}\right)\varepsilon_{xx} \end{aligned}$

## ANNEXE II.B Théorie des potentiels de déformation

Les déplacements des bandes de conduction et de valence peuvent s'exprimer en termes de déformations uniaxiales, de cisaillement et hydrostatiques par le biais de la théorie des potentiels de déformation.

Les références énumérées dans la suite sont reportées à la liste des références du chapitre II auquel cette annexe se rapporte.

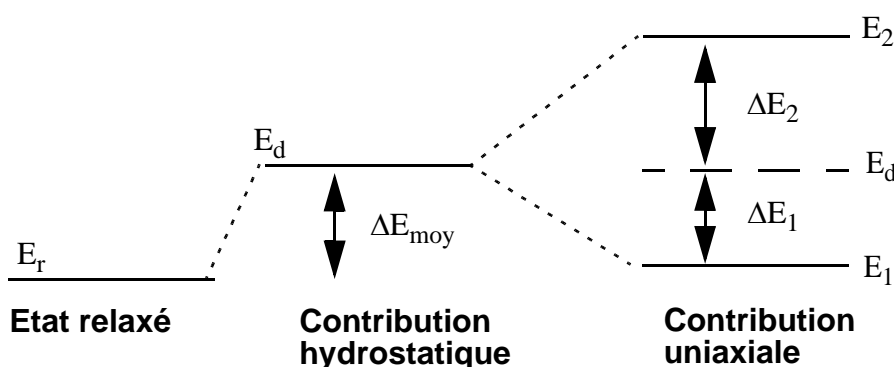
Une fois le tenseur de déformation connu, l'Hamiltonien de perturbation dépend de la déformation et ses effets sont calculés à partir de la théorie de perturbation du premier ordre:

$$H_{\varepsilon}^{\alpha\beta} = \sum_{ij} D_{ij}^{\alpha\beta} \varepsilon_{ij} \quad \text{Eq-II.B.1}$$

où  $D_{ij}$  est l'opérateur de potentiel de déformation qui transforme par des opérations de symétrie.  $D_{ij}^{\alpha\beta}$  sont les éléments de matrice de  $D_{ij}$ . Les potentiels de déformation peuvent être ajustés aux calculs *ab initio*, à l'expérience ou encore aux calculs numériques de structures de bandes empiriques.

Les déplacements relatifs des bandes sont obtenus de la diagonalisation de l'Hamiltonien de déformation Eq-II.B.1. Des expressions analytiques simples pour les bandes de conduction et de valence peuvent être obtenues dans les cas de contraintes biaxiales, telles que celles générées par le dépôt par épitaxie d'une couche contrainte de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  sur du  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  relaxé massif.

Deux principales contributions des contraintes induisent le déplacement des bandes, comme schématisé en Figure II.B.1:



**Figure II.B.1:** Représentation schématique de l'effet d'une contrainte sur des bandes dégénérées (ou équivalentes en énergie). La contrainte hydrostatique décale la position de l'énergie absolue de la bande. La contrainte uniaxiale lève la dégénérescence (ou l'équivalence).

- La contribution hydrostatique induit un déplacement des bandes sur une échelle absolue d'énergie.
- La contribution uniaxiale induit le déplacement relatif des bandes les unes par rapport aux autres.

### II.B.1. Déplacement absolu des bandes

Le potentiel moyen électrostatique est modifié par la partie hydrostatique de la contrainte. La variation en énergie est donc inversement proportionnelle au volume de la cellule élémentaire.

Pour les bandes de valence, l'effet global conduit au potentiel de déformation hydrostatique  $a_v$ :

$$\Delta E_v^0 = a_v \frac{\Delta\Omega}{\Omega} \quad \text{Eq-II.B.2}$$



Or, la variation de volume correspond en termes de déformation à  $\frac{\Delta\Omega}{\Omega} = Tr(\bar{\epsilon}) = (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$ . La variation absolue des bandes d'énergie se traduit par l'expression suivante:

$$\Delta E_v^0 = a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad \text{Eq-II.B.3}$$

En ce qui concerne les minima des bandes de conduction, leur déplacement moyen s'exprime de la manière suivante [65]:

$$\Delta E_c^{0,i} = \left(\Xi_d^i + \frac{1}{3}\Xi_u^i\right) \cdot (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad \text{Eq-II.B.4}$$

Où  $i$  symbolise les vallées de conduction  $X$  ou  $L$ .

De manière générale, les quantités  $\left(\Xi_d^i + \frac{1}{3}\Xi_u^i\right)$  et  $a_v$  sont difficilement calculables ou mesurables puisqu'elles se réfèrent aux déplacements des bandes sur une échelle absolue [72][73].

## II.B.2. Déplacement relatif des bandes de valence

L'estimation du déplacement des bandes de valence provient de la diagonalisation de l'Hamiltonien de déformation Eq-II.B.1 [89].

En l'absence de contrainte et de couplage spin-orbite, ces bandes sont strictement dégénérées en  $\Gamma$ . Pour les formules suivantes, les bandes sont notées de 1 à 3, la bande 1 étant la bande des trous qui monte, la bande 3 correspondant à celle du spin-orbite.

Dans le cas d'un substrat orienté en  $\langle 001 \rangle$ , les déplacements s'écrivent [65]:

$$\begin{cases} \Delta E_{v1} = \Delta E_v^0 - \frac{\Delta_0}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{001} + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E_{001} + \frac{9}{4}(\delta E_{001})^2} \\ \Delta E_{v2} = \Delta E_v^0 + \frac{\Delta_0}{3} - \frac{1}{2}\delta E_{100} \\ \Delta E_{v3} = \Delta E_v^0 - \frac{\Delta_0}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{100} - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E_{001} + \frac{9}{4}(\delta E_{001})^2} \end{cases} \quad \text{Eq-II.B.5}$$

Dans l'Eq-II.B.5,  $\Delta_0 = 44 \text{ meV}$  est l'énergie de séparation due au couplage spin-orbite, et  $\delta E_{001} = 2b_v(\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx})$ .  $b$  est un potentiel de déformation pour les bandes de valence.

Le cas d'un substrat orienté en  $\langle 111 \rangle$  est vraiment similaire au cas du substrat  $\langle 001 \rangle$ . L'équation Eq-II.B.5 reste valide mais  $\delta E_{001}$  est remplacé par  $\delta E_{111} = 2\sqrt{3}d_v\epsilon_{xy}$ .  $\epsilon_{xy}$  appartient au tenseur de déformation associé à la contrainte biaxiale dans le plan perpendiculaire à la direction  $\langle 111 \rangle$  (voir Tableau II.A.2).  $d$  est un potentiel de déformation associé aux déformations de cisaillement. Cette valeur est notamment sensible au paramètre de déplacement interne et donc au déplacement des atomes interstitiels [65].

Le cas d'un substrat orienté en  $\langle 110 \rangle$  est plus complexe. Dans ce cas, la matrice des bandes de valence n'est pas facilement diagonalisable. Aucune expression analytique exacte ne permet de décrire les niveaux d'énergie. Les déplacements, dans ce cas de contrainte, sont la conséquence d'un "mélange" des potentiels de déformation  $b$  et  $d$ . Cependant, Pollak et Cardona [89] ont utilisé une approche perturbative permettant de trouver les valeurs proches:

$$\begin{cases} \Delta E_{v1} = \Delta E_v^0 + \frac{\Delta_0}{3} + \frac{1}{4}\sqrt{(\delta E_{100})^2 + 3(\delta E_{111})^2} + \frac{1}{4}(\delta E_{100} + 3\delta E_{111})^2/\Delta_0 \\ \Delta E_{v2} = \Delta E_v^0 + \frac{\Delta_0}{3} - \frac{1}{4}\sqrt{(\delta E_{100})^2 + 3(\delta E_{111})^2} + \frac{3}{32}(\delta E_{100} - \delta E_{111})^2/\Delta_0 \\ \Delta E_{v3} = \Delta E_v^0 - \frac{2\Delta_0}{3} - \frac{1}{4}(\delta E_{100} + 3\delta E_{111})^2/\Delta_0 - \frac{3}{32}(\delta E_{100} - \delta E_{111})^2/\Delta_0 \end{cases} \quad \text{Eq-II.B.6}$$

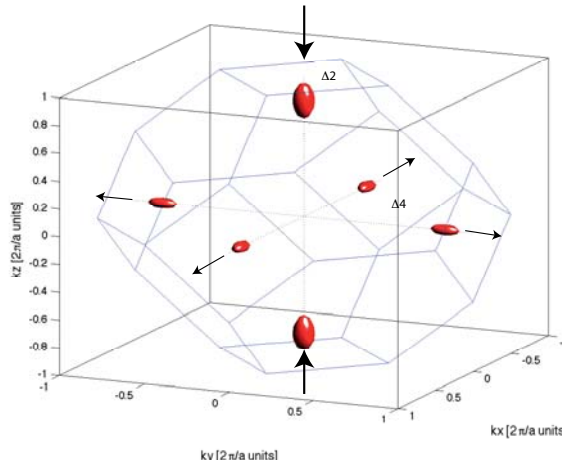
### II.B.3. Déplacement relatif des bandes de conduction

Les potentiels de déformation analysés dans ce chapitre décrivent les déplacements des minima des bandes de conduction en fonction d'un tenseur de déformation. Ces potentiels sont différents de ceux intégrés dans la théorie  $k.p$  qui décrivent le déplacement des bandes de conduction au point  $\Gamma$ . Ces potentiels de déformation sont donc connus par ajustement aux calculs de structures de bandes ou aux données expérimentales.

Dans les cas de substrats orientés selon les directions  $\langle 001 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ , les vallées  $\Delta$  deviennent inéquivalentes: Les vallées  $\Delta_4$  orientées selon  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 010 \rangle$  se séparent des vallées  $\Delta_2$  dans la direction  $\langle 001 \rangle$ . Ces déplacements sont illustrés en Figure II.B.2. Le déplacement de ces vallées s'exprime par:

$$\begin{aligned} \Delta E_c^{\Delta_2} &= \frac{2}{3}\Xi_u^\Delta (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \\ \Delta E_c^{\Delta_4} &= -\frac{1}{3}\Xi_u^\Delta (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \end{aligned} \quad \text{Eq-II.B.7}$$

Sur un substrat orienté en  $\langle 111 \rangle$ , les vallées  $\Delta$  restent équivalentes.



**Figure II.B.2:** Surfaces isoénergies des vallées de conduction du Si (à 40meV) pour une contrainte biaxiale dans le plan (001) de 500MPa (l'origine des énergies est prise au minimum de la vallée X). Pour cette contrainte, nous assistons à un abaissement en énergie des vallées Z, ou  $\Delta_z$  (accroissement de la surface), et à l'augmentation des vallées X, Y  $\Delta_4$  (diminution de la surface). Ce type de contrainte est présent dans les couches contraintes de Si déposées sur du matériau relaxé  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ .

Pour un substrat orienté en  $\langle 001 \rangle$ , les minima des vallées  $L$  restent équivalentes. Dans le cas d'un substrat orienté en  $\langle 111 \rangle$ , le déplacement des vallées  $\langle 111 \rangle$  est de  $\Delta E_c^L = 2\Xi_u^L \varepsilon_{xy}$ ; Le déplacement des vallées  $\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$ ,  $\langle 1\bar{1}\bar{1} \rangle$  et  $\langle 1\bar{1}1 \rangle$  est de  $\Delta E_c^L = -\frac{2}{3}\Xi_u^L \varepsilon_{xy}$ . Pour un substrat orienté selon  $\langle 110 \rangle$ , le déplacement devient  $\Delta E_c^L = \frac{2}{3}\Xi_u^L \varepsilon_{xy}$  pour les bandes  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 1\bar{1}\bar{1} \rangle$  et  $-\frac{2}{3}\Xi_u^L \varepsilon_{xy}$  pour les bandes  $\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$  et  $\langle 1\bar{1}1 \rangle$ .

Dans le Tableau II.9,  $\Xi_d^\Delta$  et  $\Xi_d^L$  sont les potentiels de déformation hydrostatique des bandes de conduction, tandis que  $\Xi_u^\Delta$  et  $\Xi_u^L$  sont les potentiels de déformation des déplacements relatifs.

## ANNEXE II.C Courbures de bande sous contraintes uniaxiales: analyse à partir de courbes isoénergies

Dès lors qu'une contrainte est appliquée sur les matériaux massifs, une levée de dégénérescence apparaît entre la bande hh et lh. La contribution de la bande hh est donc prédominante dans les propriétés de transport des trous dans les matériaux massifs. Nous analysons ci-dessous la modification des courbures de la bande hh sur une zone centrée en  $\Gamma$  sous contraintes uniaxiales appliquées selon les directions  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ . Ces considérations sont importantes lors de l'analyse des propriétés de transport des trous dans les matériaux massifs sous contrainte en chapitre III.

Les références énumérées dans la suite sont reliées à la liste des références du chapitre II auquel cette annexe se rapporte.

Puisque toutes les branches de trous ont leur minima au point  $\Gamma$ , la branche des trous qui est la plus basse en énergie et qui a la plus forte densité d'états<sup>2</sup> à basse énergie, aura donc la plus forte population de trous autour du point  $\Gamma$ . Ainsi, la courbure de la branche dominante dans la direction du transport va déterminer la mobilité des trous.

### II.C.1. Courbures de bande selon la direction $\langle 110 \rangle$

Afin de mieux comprendre les modifications de courbures sous contraintes uniaxiales  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$  en tension, les courbes isoénergies ont été tracées en Figure II.C.1. Les courbes pour le cas de contrainte  $\langle 100 \rangle$  sont respectivement tracées en Figure II.C.2.

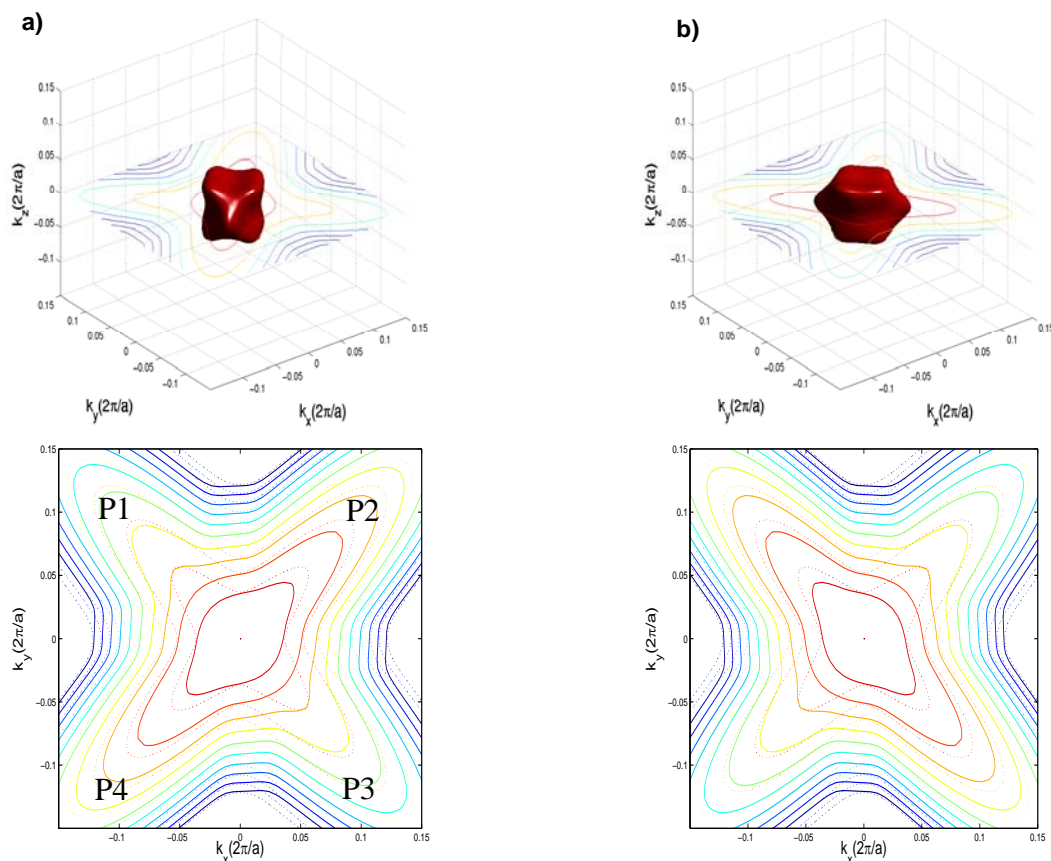
Plusieurs remarques peuvent être évoquées en fonction de l'orientation de contrainte appliquée pour une direction de transport  $\langle 110 \rangle$ :

- Contrainte  $\langle 110 \rangle$ : les branches P1 et P3 s'abaissent tandis que les branches P2 et P4 sont diminuées dans une moindre mesure (voir Figure II.C.1). Nous avons donc une repopulation des trous dans les branches P2 et P4 dont les valeurs des masses selon  $\langle 110 \rangle$  sont élevées. Par conséquent, nous nous attendons donc à une diminution de la mobilité des porteurs.
- Contrainte  $\langle \bar{1}10 \rangle$ : les trous se déplacent des branches P2 et P4 vers les branches P1 et P3 dont les masses dans la direction  $\langle 110 \rangle$  sont faibles. Nous nous attendons donc à une augmentation de la mobilité pour la contrainte tensile  $\langle \bar{1}10 \rangle$ .
- Contrainte en tension  $\langle 100 \rangle$ : en Figure II.C.2 a), les contours les plus proches du point  $\Gamma$  (au centre de la figure) sont circulaires et isotropes au delà de 50 meV, en contradiction avec les formes en "étoile" des contours éloignés. Ceci s'explique par le "mélange de bandes" sous ces conditions de contrainte, comme montré en chapitre II. Ces contours étant plus resserrés, les électrons près du point  $\Gamma$  devront donc avoir une

<sup>2</sup>Par le modèle simple de la bande parabolique, nous pouvons voir que la densité d'états  $N(E)$  en fonction de l'énergie  $E$  est directement liée à la courbure des bandes et donc à la masse effective  $m^*$  :

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} .$$

Dans notre cas, le fait que les branches augmentent ou baissent en énergie est directement relié à la courbure de bande. Donc, pour une grande courbure, la branche va diminuer, ainsi que sa densité d'états et inversement pour les faibles courbures de bande. Les branches de la première bande de valence hh avec de faibles courbures de bande seront donc dominantes dans le transport des trous.



**Figure II.C.1:** Surfaces isoénergies à 25mV et contours isoénergies séparés de 25mV dans le plan (001) à  $k_z = 0 \text{ m}^{-1}$  de la première bande de valence sous contrainte tensile de 1GPa dans les directions **a)**  $\langle 110 \rangle$ , **b)**  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Les contours en pointillés représentent les conditions sans contrainte.

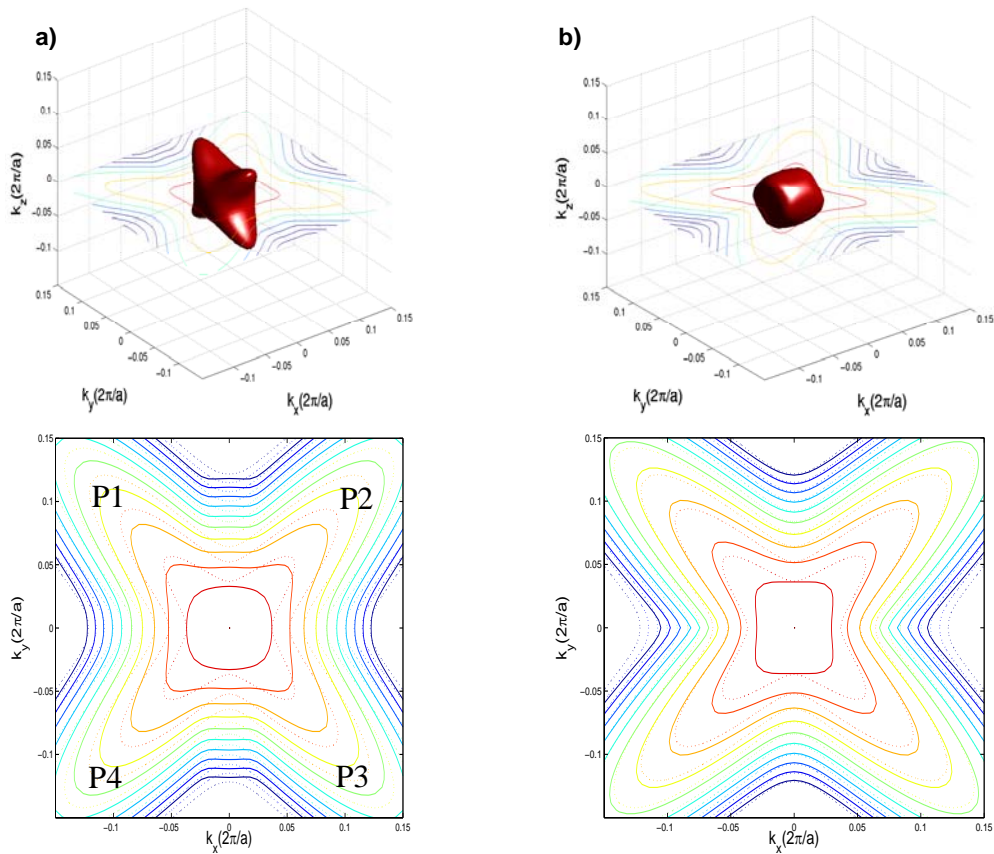
mobilité accrue. Cette description doit toutefois être précisée. Par ailleurs, les électrons peuplent aussi les bandes hors-plan dont les courbures dégradent la mobilité. Ces branches augmentent de façon telle que les taux d'interaction réduisent. Une amélioration globale de mobilité est donc prévue lorsqu'une contrainte tensile est appliquée.

- **Contrainte en compression  $\langle 100 \rangle$ :** en Figure II.C.2 b), toutes les branches de la bande de valence dans le plan diminuent de taille. Les masses des trous dans ce plan diminuent. Parallèlement, nous avons une augmentation de la population des trous dans les branches hors-plan. Toutefois, il n'est pas évident d'évaluer qualitativement la variation de mobilité sous ces conditions de contrainte.

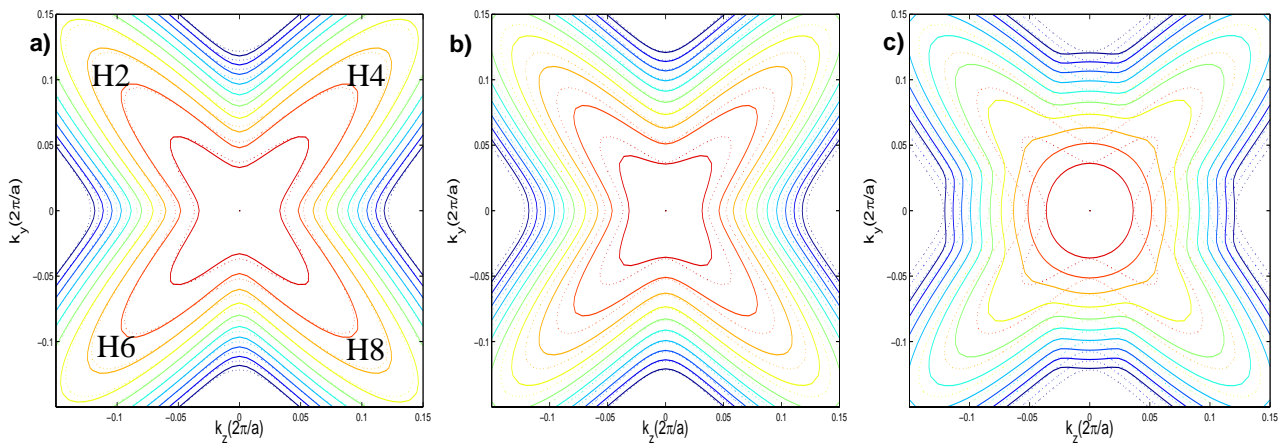
### II.C.2. Courbures de bande selon la direction $\langle 100 \rangle$

Les propriétés de transport selon la direction  $\langle 100 \rangle$  sont plus complexes à appréhender. En effet, aucune branche n'est orientée dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . Toutefois, une spécificité semble caractériser cette direction, à savoir, les branches Hors-plan H1...H8 s'abaissent avec les contraintes uniaxiales. Les trous situés dans ces branches devraient accroître leur contribution au transport. Les contours isoénergies des bandes dans le plan (100) sont représentés en Figure II.C.3.

Comme observé en Figure II.C.3 a), les branches H2, H4, H6 H8, sont faiblement modifiées sous contrainte tensile  $\langle 110 \rangle$  (la surface isoénergie est identique pour la contrainte  $\langle \bar{1}10 \rangle$ ). La variation de mobilité qui devrait en résulter doit être faible et similaire pour les contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ .



**Figure II.C.2:** Surfaces isoénergies à 25mV et contours isoénergies séparés de 25mV dans le plan (001) à  $k_z = 0 \text{ m}^{-1}$  de la première bande de valence sous contrainte **a)** tensile et **b)** compressive de 1GPa dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . Les contours en pointillés représentent les conditions sans contrainte.



**Figure II.C.3:** contours isoénergies séparés de 25mV dans le plan (100) à  $k_x = 0 \text{ m}^{-1}$  de la première bande de valence sous contrainte **a)** tensile de 1GPa dans la direction  $\langle 110 \rangle$ , **b)** tensile de 1GPa dans la direction  $\langle 100 \rangle$ , **c)** compressive de 1GPa dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . Les contours en pointillés représentent les conditions sans contrainte.

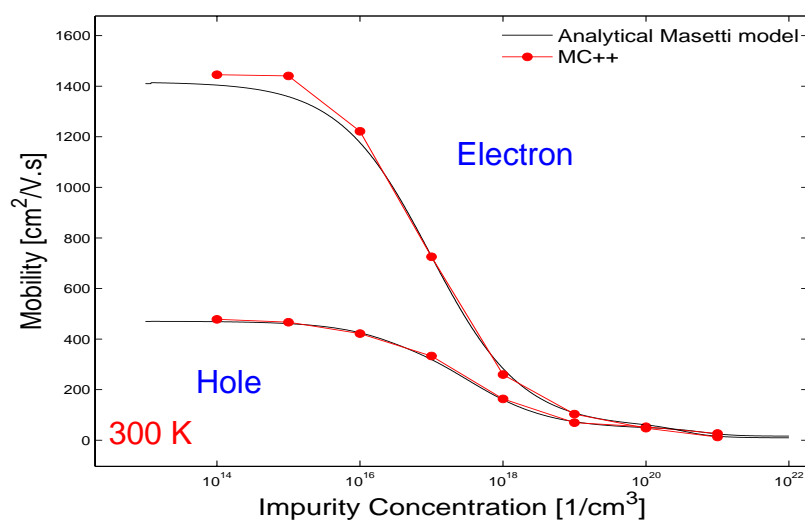
A l'inverse, les courbures de bande des branches P2 et P4 dans la direction  $\langle 100 \rangle$  sont fortement modifiées pour les contraintes  $\langle 100 \rangle$  tensile et compressive (Figures II.C.3 b) et c)). On s'attend à ce que la variation de mobilité qui en résulte soit plus élevée que dans le cas des contraintes  $\langle 110 \rangle$  et  $\langle \bar{1}10 \rangle$ .

## ANNEXE III.A Simulations de MC++ dans un barreau de Silicium non contraint

Nous présentons dans cette annexe des résultats complémentaires de MC++ obtenus d'un barreau de Silicium non contraint.

Les références énumérées dans la suite sont reportées à la liste des références du chapitre III auquel cette annexe se rapporte.

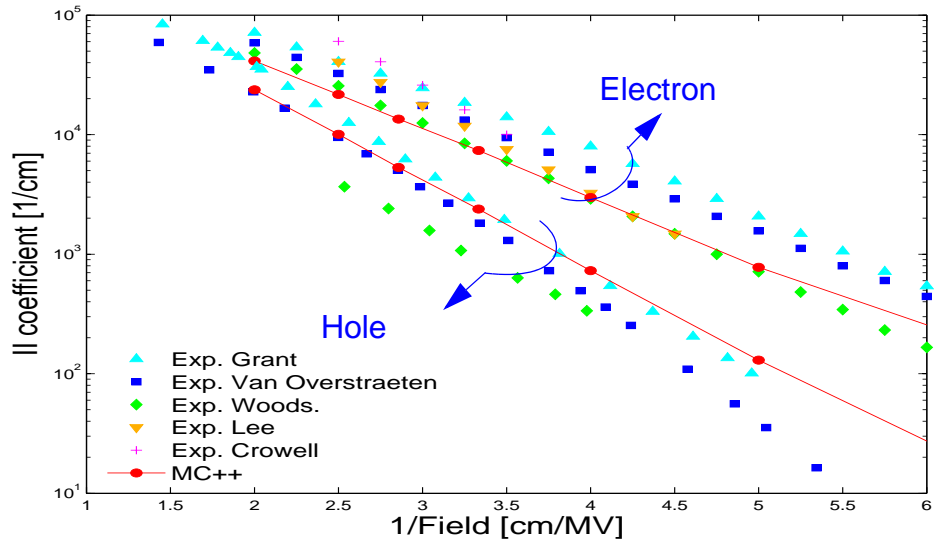
La dépendance au dopage de la mobilité est un paramètre important à investiguer. En Figure III.A.1, la mobilité calculée par le Monte Carlo est en bon accord avec le modèle de Masetti [50]. Plus la concentration est importante dans le matériau, plus les porteurs de charge subissent des interactions coulombiennes. Ainsi, la mobilité des porteurs de charge diminue avec l'augmentation de la concentration des impuretés.



**Figure III.A.1:** Mobilité des électrons et des trous dans du Si massif en fonction de la concentration d'impuretés ionisées [10]. Les simulations MC++ (cercles fermés) sont comparées au modèle analytique de Masetti et al. [50] (lignes solides). La température du réseau cristallin est de 300K.

La méthode Monte Carlo est bien adaptée à l'évaluation du courant à fort champ. Cet outil est aussi utile dans l'évaluation du courant substrat par le biais de la génération de paires électron-trou par ionisation par impact. Par le biais de l'ionisation par impact, un électron de haute énergie interagit avec le réseau cristallin et cède de l'énergie à un électron de la bande<sup>1</sup>. Ce dernier se déplace alors dans la bande de conduction, de façon telle que l'énergie reçue soit supérieure au gap du semi-conducteur dopé [3]. Une paire d'électron-trou est ainsi créée. La Figure III.A.2 montre les taux d'interaction d'ionisation par impact en fonction de l'inverse du champ électrique le long de la direction cristallographique <100>. Le taux d'interaction augmente avec le champ électrique. Comme il peut être observé, MC++ se rapproche bien des données expérimentales de la littérature.

<sup>1</sup>Les interactions impact ionisation se produisent à proximité de la région LDD du drain (où l'énergie des électrons est forte) sous haute température électronique.



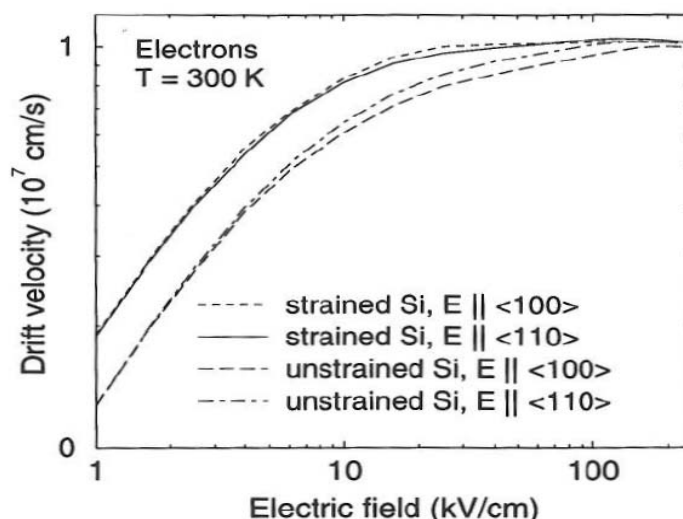
**Figure III.A.2:** Taux d'ionisation par impact des électrons et des trous en fonction de l'inverse du champ électrique le long de la direction cristallographique  $\langle 100 \rangle$  [10]. Les symboles se réfèrent aux données expérimentales de la littérature. Les lignes solides se reportent aux calculs de MC++. La température du réseau est de 300K.

## ANNEXE III.B Simulations de SPARTA dans un barreau de Silicium non contraint de type $n$

Nous présentons dans cette annexe des résultats issus des simulations du Monte Carlo à flux incident SPARTA. Les courbes proviennent de simulations effectuées par F. M. Bufler [4]. L'analyse de ces résultats est importante dans la compréhension de l'impact des effets de transport hors-équilibre sur les variations de courant des nMOSFETs sous contrainte (voir Sections III.2.4.4. et III.3.2.3. du chapitre III).

Les références énumérées dans la suite sont reportées à la liste des références du chapitre III auquel cette annexe se rapporte.

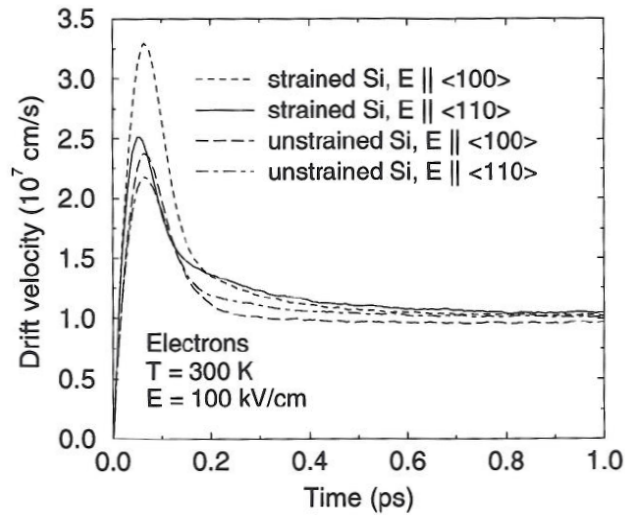
La Figure III.B.1 montre les vitesses de dérive des électrons en fonction du champ électrique du Si massif non contraint et d'une couche contrainte de Si déposée par épitaxie sur du matériau massif  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ . A faible champ électrique, la vitesse est proportionnelle au champ. Sous contrainte, le déplacement relatif des bandes mène à une diminution des temps d'interaction intervallée. Sous contrainte biaxiale tensile, la faible masse dans la direction du transport des électrons dans les vallées Z (les plus basses en énergie sous ce cas de contrainte, voir chapitre II) induit une augmentation de la mobilité. Ainsi, les vitesses des porteurs de charge du matériau contraint à faible champ électrique sont supérieures aux vitesses du Si relaxé. En revanche, à fort champ, les effets de la contrainte n'agissent plus sur la vitesse des électrons (Figure III.B.1). En effet, sous ces conditions, les phonons optiques de haute énergie permettent une relaxation en énergie efficace. Les porteurs de charge sont répartis dans des proportions identiques dans chacune des paires de vallées. Par conséquent, les fréquences d'interaction et les masses mises en jeu sont les mêmes que dans le Silicium relaxé [19]. L'anisotropie entre le Si massif contraint et non contraint disparaît.



**Figure III.B.1:** Caractéristiques de la vitesse de dérive des électrons à 300K le long des directions cristallographiques  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$  en fonction du champ électrique dans le cas du Si non contraint et dans une couche contrainte de Si déposée par épitaxie sur un matériau massif relaxé de  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$  [4].

La Figure III.B.2 montre la vitesse de dérive des électrons après l'application instantanée d'un champ électrique de 100kV/cm, orienté en  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ , pour du Si relaxé et une couche contrainte de Si déposée par épitaxie sur un matériau massif de  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ . Nous voyons l'émergence d'un pic de survitesse, avant que les électrons n'acquière finalement la vitesse de dérive stationnaire. La vitesse atteinte par les électrons est largement supérieure à la vitesse de saturation du régime stationnaire. Il est à noter que ce pic n'apparaît qu'à fort champ. A faible champ, la vitesse de dérive est augmentée de façon uniforme jusqu'à ce que la valeur stationnaire soit atteinte [4][16].





**Figure III.B.2:** Vitesse de dérive en transitoire des électrons à 300K, après l'application instantanée d'un champ électrique de 100 kV / cm dans du Silicium non contraint et dans une couche contrainte de Si déposée par épitaxie sur un matériau massif relaxé  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ . Les directions cristallographiques de transport sont  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$  [4].

Quelles que que soient les directions de transport  $\langle 100 \rangle$  ou  $\langle 110 \rangle$ , nous observons une variation du pic de la survitesse en fonction de la contrainte. Comme expliqué en [4], le déplacement des bandes et la modification des masses sous contrainte conduit à une variation de la survitesse en fonction de la contrainte.

## ANNEXE III.C Notions des effets de transport hors-équilibre

Nous exposons dans cette section, les notions élémentaires des effets de transport non-stationnaire et quasi-balistique présents dans les dispositifs MOSFETs à canaux ultra-courts.

### III.C.1. Effet de transport non-stationnaire

Cette contribution au transport se révèle lorsque des variations rapides du champ électrique sont présentes dans le dispositif. Cette condition accompagne la réduction d'échelle des dispositifs électroniques. Par conséquent, de fortes courbures de bande résultent de cette variation du potentiel électrique. Si la variation rapide du champ est temporelle, les électrons acquièrent rapidement un excédent d'énergie par rapport à l'énergie d'équilibre thermique. Cet excédent n'est pas absorbé instantanément par les phonons optiques. Ainsi, les effets non-stationnaires apparaissent lorsque le gain d'énergie dans le temps, induit par le champ, est supérieur à la puissance que peut dissiper le réseau par l'intermédiaire des phonons intervalles.

$$\frac{\partial E}{\partial t} > \frac{h\omega}{\tau_w} \quad \text{Eq-III.C.1}$$

où  $E$  est l'énergie du gaz électronique,  $h\omega$  l'énergie moyenne des phonons et  $\tau_w$  le temps caractéristique qu'il faut pour absorber un excès d'énergie du gaz électronique. Dans le cadre du transport non stationnaire, il faut différencier deux temps de relaxation:

- un temps de relaxation moyen de l'énergie  $\tau_w$  (présent dans la relation Eq-III.C.1). C'est le temps de réponse du gaz électronique pour ajuster son énergie. Ce temps est représentatif des interactions inélastiques qui émettent ou absorbent de l'énergie.
- un temps de relaxation moyen de la vitesse  $\tau_m$ . C'est le temps de réponse du gaz électronique pour ajuster sa vitesse.

Cependant, la vitesse et l'énergie sont corrélées. La relaxation complète du système en vitesse  $\tau_m$  est donc aussi liée au temps de relaxation  $\tau_w$  [19].

Par ailleurs, ce phénomène temporel se traduit aussi spatialement. Les effets non stationnaires peuvent apparaître lorsque le champ varie rapidement dans l'espace. Dans ce cas, les grandeurs pertinentes sont les longueurs de relaxation de la vitesse  $L_m$  et de l'énergie  $L_w$ . Celles-ci se définissent en fonction de la vitesse thermique  $v_{therm}$  [19]:

$$\begin{aligned} L_m &= v_{therm} \tau_m = 1 \cdot 10^5 (m/s) \times \frac{\mu_0 m_c^*}{q} \\ L_w &= v_{therm} \tau_w \end{aligned} \quad \text{Eq-III.C.2}$$

$\tau_w$  et  $\tau_m$  sont respectivement les taux de relaxation moyens de l'énergie et de la vitesse.  $m_c^*$  est la masse de conduction et  $\mu_0$  correspond à la mobilité du matériau massif en fonction du dopage.

### III.C.2. Effet de transport quasi-balistique

Ce cas apparaît lorsque toutes les interactions (élastiques et inélastiques) sont en nombre insuffisant. Le libre parcours moyen  $lpm$  entre deux collisions s'exprime selon l'expression suivante:

$$lpm = v_{therm} \tau \quad \text{Eq-III.C.3}$$

où  $v_{therm}$  est la vitesse thermique.  $\tau$  est le temps de relaxation entre deux collisions.

## ANNEXE III.D Variation de la tension de seuil sous contrainte

La modélisation avancée de la tension de bande plate permet de comprendre l'impact de la contrainte sur les caractéristiques électrostatiques des MOSFETs<sup>2</sup>. Comme nous allons le voir, l'introduction de la contrainte implique une variation de la tension de bande plate des transistors. Pour modéliser cet effet, il est indispensable de redéfinir la densité intrinsèque des porteurs de charge sous contrainte. Sans contrainte, cette densité s'écrit comme suit:

$$n_i^2 = (N_c N_v) e^{-E_g/kT} \quad \text{Eq-III.D.1}$$

Avec, pour la bande de conduction:

$$N_c = 6(\text{degenerescence}) \cdot 2 \left( \frac{2\pi m_c^{DOS} kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{Eq-III.D.2}$$

où la masse de densité d'états  $m_c^{DOS}$  est ici définie pour une vallée et non comme la masse de densité d'états globale. Le facteur 6 correspond à l'équivalence énergétique des vallées de conduction dans le Si non contraint.

Pour la bande de valence:

$$N_v = 2 \left( \frac{2\pi m_v^{DOS} kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{Eq-III.D.3}$$

En ce qui concerne la densité intrinsèque dans le Si contraint, nous reprenons les calculs ci-dessus, pour chaque vallée de conduction  $i$  et de valence  $j$ . La densité intrinsèque de porteurs de charge en fonction de la déformation  $\varepsilon$  est ainsi constituée de la contribution de chaque vallée [19]:

$$n_i(\varepsilon) = \sum_{\substack{i = X, Y, Z \\ j = hh, lh}} (N_c(\varepsilon) N_v(\varepsilon))^{1/2} \exp \left[ \frac{-E_g - \Delta E_c^i(\varepsilon) + \Delta E_v^j(\varepsilon)}{2kT} \right] \quad \text{Eq-III.D.4}$$

L'expression finale du calcul ne contient plus de facteur de dégénérescence.

La modification du gap en fonction de la contrainte peut avoir d'importantes répercussions sur la densité intrinsèque des porteurs de charge. Ceci est dû à la dépendance exponentielle de la densité des porteurs de charge par rapport au gap. Nous notons que les densités d'états  $N_c$  et  $N_v$  liées aux masses effectives dépendent aussi de la contrainte.

A partir de la formalisation de la densité de porteurs de charge sous contrainte, il est aisé de définir la tension de bande plate<sup>3</sup>:

$$V_{FB}(\varepsilon) \approx -kT \ln \left[ \frac{N_{gate} N_{subs}}{n_i^2(\varepsilon)} \right] \quad \text{Eq-III.D.5}$$

ainsi que le niveau de Fermi:

$$\phi_f(\varepsilon) = -kT \ln \left[ \frac{N_{ch}}{n_i(\varepsilon)} \right] \quad \text{Eq-III.D.6}$$

La nouvelle tension de seuil devient alors [19]:

$$V_{th}(\varepsilon) \approx V_{FB}(\varepsilon) + 2\phi_f + \frac{\sqrt{2\varepsilon_0 \varepsilon_{Si} q N_{ch} 2\phi_f(\varepsilon)}}{C_{ox}} \quad \text{Eq-III.D.7}$$

<sup>2</sup>. Il doit être noté que dans la modélisation type *modèle compact*, la tension de bande plate n'est pas calculée, mais est directement prise en compte par un paramètre d'ajustement.

<sup>3</sup>. Cette approximation est utilisée dans le cadre de transistors dont les grilles sont constituées de polysilicium dégénéré. Dans ce cas, la différence de travail de sortie entre polySilicium et substrat correspond à la différence des potentiels de Fermi des deux matériaux:  $\phi_{ms} = \phi_f(\text{poly}) - \phi_f(\text{substrat})$ . Cependant, l'expression donnée de la tension de bande plate reste une approximation grossière, puisqu'elle est issue de la statistique de Boltzmann (statistique utilisée dans le cadre de densité de porteurs de charge faible).

# SIGLES & NOTATIONS

## 1. Acronymes de laboratoires

CMO	Département Composant pour la Microrélectronique et l'Optélectronique de l'IEF
CEA	Commissariat à l'Énergie Atomique
CMP-GC	Centre de Microélectronique de Provence du site Georges Charpak
DIEGM	Dipartimento di Ingegneria Elettrica, Gestionale e Meccanica, de l'université d'Udine
IEF	Institut d'Électronique Fondamental, localisé à Orsay
INAC	Institut Nanosciences et Cryogénie du CEA
INL	Institut des Nanotechnologies de Lyon
INSA Lyon	Institut National des Sciences Appliquées de Lyon
IMEP	Institut de Microélectronique, Électromagnétisme et Photonique Laboratoire d'Hyperfréquences et de Caractérisation
LPM	Laboratoire de Physique de la Matière

## 2. Sigles

B	<i>Bulk</i> , Substrat
BV	Bandes de valence
CESL	<i>Contact Edge Stop Layer</i> Couche d'arrêt à la gravure des contacts
CFC	Cubique à Faces Centrées
D	Drain
DD	Simulations Dérive-Diffusion
DFT	<i>Density Functional Theory</i> , théorie de la fonctionnelle de la densité
Dk	Dimensions de l'espace réciproque associé aux simulations Kubo-Greenwood (2Dk ou 3Dk) et Monte Carlo (3Dk).
DOS	<i>Density of States</i> , densité d'états
$e^-$	Électron
EFA	<i>Envelop Function Approximation</i> , approximation de la fonction enveloppe
EMA	<i>Effective Mass Approximation</i> , approximation de la masse effective
G	Grille
Ge	Germanium
ITRS	<i>International Technology Roadmap for Semiconductors</i>
LCBB	<i>Linear Combination of Bulk Bands</i> Calculs de structures de bandes 2D à partir de combinaisons linéaires de fonctions d'onde de Bloch du matériau massif

LDA	<i>Local-Density Approximation</i> , Approximation de la densité locale
<i>lpm</i>	Libre parcours moyen
MC	Monte Carlo
MOS	<i>Metal Oxyde Semiconductor</i>
MOSFET	<i>Metal Oxyde Semiconductor Field Effect Transistor</i> , transistor à effet de champ.
NL	Non local
Ncanal	Dopage canal
Nl <sub>dd</sub>	Dopage des extension LDD
Ngrille	Dopage de grille
ox	Oxide
P / H	Dans le plan/ Hors-plan
PZB	Première Zone de Brillouin
S	Source
SCD	Système de Coordonnées du Dispositif
SCC	Système de Coordonnées du Cristal
SO / <i>so</i>	interactions Spin-Orbite, bandes spin-orbite
SOI MOSFET	<i>Silicon on Insulator MOSFET</i>
SON MOSFET	<i>Silicon on Nothing MOSFET</i>
Si	Silicium
SiGe	Alliage de Si et Ge
Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>	Alliage SiGe avec une fraction molaire x de Germanium
SiO <sub>2</sub>	Oxide de Silicium
STI	<i>Shallow Trench Isolation</i>
TB	<i>Tight Binding</i> , méthodes des liaisons fortes
TCAD	<i>Technology Computer-Aided Design</i> , design de technologie assisté par ordinateur
UTBFETs	<i>Ultrathin-body Field Effect Transistor</i> , transistor film mince à effet de champ
<i>Wafer Bending</i>	Technique expérimentale de mise en contrainte d'une lamelle de wafer par quatre points
<i>lh</i>	<i>light holes</i> , bandes des trous légers
<i>hh</i>	<i>heavy holes</i> , bandes des trous lourds
<hkl> et [hkl]	direction cristallographique
{hkl}	direction cristallographique équivalente
(hkl)	plan normal à la direction cristallographique <hkl>

### 3. Notations

Nous portons à l'attention des lecteurs sur le fait que le symbole  $h$ , utilisé tout au long de ce manuscrit, correspond à la constante de Planck réduite (constante divisée par  $2\pi$ ).

$a$	[m]	Paramètre de maille du réseau cubique
$a_v$	[eV]	Potential de déformation hydrostatique des bandes de valence
$b_v$	[eV]	Potential de déformation uniaxial des bandes de valence
$\bar{C} / C_{ij}$	[Pa]	Tenseur d'élasticité / Composante du tenseur d'élasticité
$C_{gs}, C_{gd}$	[F].[m] <sup>-2</sup>	Capacités de grille par unité de surface
$C_{ox}$	[F].[m] <sup>-2</sup>	Capacité d'oxyde par unité de surface
$d_v$	[eV]	Potential de déformation de cisaillement des bandes de valence
$D$	[m] <sup>2</sup> .[s]	Coefficient de diffusion
$D_{001}, D_{110}$ et $D_{111}$	[r.u]	Coefficients de Poisson des contraintes biaxiales dans les plans (001), (110) et (111)
$D_{ij}^{\alpha\beta}$	[eV]	Opérateur de potential de déformation associé à la symétrie du matériau étudié
$\vec{E}$	[V].[m]	Champ électrique
$E(k)$	[eV]	Energie de bandes, structure de bandes
$E(\rho)$	[eV]	Energie fonctionnelle
$E_c$	[eV]	Champs électrique critique
$E_{coup}$	[eV]	Energie de coupure
$E_{eff}$	[V].[m] <sup>-1</sup>	Champ effectif
$E_f$	[eV]	Energie de Fermi
$E_g$	[eV]	Energie de gap (bande interdite)
$E_c(k)$	[eV]	Energie des bandes de conduction
$E_v(k)$	[eV]	Energie des bandes de valence
$E_{xc}[\rho(r)]$	[eV]	Energie d'échange-corrélation
$f_0(r, t)$		Fonction de distribution à l'équilibre de la méthode Monte Carlo au point $r$ au vecteur d'onde $k$ et à l'instant $t$

$f(r, k, t)$		Fonction de distribution de la méthode Monte Carlo au point $r$ au vecteur d'onde $k$ et à l'instant $t$
$f_W(r, k, t)$		Fonction de distribution de Wigner
$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right _{coll}$	$[s]^{-1}$	Intégrale de collision
$\vec{F}$	$[Kg].[m].[s]^{-2}$	Force électrique appliquée
$F_i(z),$ $F_i(k)$		Fonction enveloppe dans l'espace réel et réciproque
$F_{mn}$		Intégrale de recouvrement entre les niveaux $n$ et $m$
$g(k), g(E)$	$[m]^{-3}, [eV]^{-1}$	Densité d'états
$G$	$[m]^{-3}$	Vecteur du réseau réciproque
$G_m$	$[A].[V]^{-1}$	Transconductance
$h$	$1,054571628.10^{-34}$ $[J].[s]$ $6.58211899.10^{-16}$ $[eV].[s]$	Constante de Planck réduite (constante de Planck divisée par $2\pi$ ).
$H$	$[eV]$	Hamiltonien
$H_e$	$[eV]$	Hamiltonien à un électron
$I_{lin}$	$[A].[m]^{-1}$	Courant de drain dans le régime linéaire par unité de largeur
$I_{on}$	$[A].[m]^{-1}$	Courant de drain dans le régime de saturation par unité de largeur
$J(r, t)$	$[A].[m]^{-2}$	Densité de courant
$L$		Associé à la vallée de conduction sur le chemin cristallographique $\langle 111 \rangle$
$L_g$	$[m]$	Longueur de grille
$L_A$	$[m]$	Largeur du dispositif étudié
$L_{QW}$	$[m]$	Largeur de la couche confinée de Si
$m_0$	$9,10938215.10^{-19}$ $[Kg]$	Masse de l'électron libre
$m^*$	$[Kg]$	Masse effective de courbure
$m^{DOS}$	$[Kg]$	Masse de densité d'états
$m_t / m_l$	$[Kg]$	Masse effective de courbure transverse / longitudinale

$m_c^*$	[Kg]	Masse effective de conduction, aussi nommé masse de transport
$m_Q$	[Kg]	Masse de confinement
$M$	[eV]	Hamiltonien perturbatif des interactions de la particule avec la matière
$n$		Symbole associé aux électrons
$p$		Symbole associé aux trous
$n(r, t) / p(r, t)$	[m] <sup>-3</sup>	Densité d'électrons / trous dans l'espace réciproque à l'instant $t$
$n_{tot}$	[m] <sup>-3</sup>	Densité totale des porteurs de charge
$N_d (n^+) / N_a (p^+)$	[at.].[m] <sup>-3</sup>	Dopage en ions donneurs / en ions accepteurs
$N_c / N_v$	[m] <sup>-3</sup>	Densité d'états effective des électrons / trous
$N_{ch}$	[at.].[m] <sup>-3</sup>	Dopage canal ( <i>channel</i> )
$P$	[Kg].[m].[s] <sup>-1</sup>	Impulsion
$P_{SCC \rightarrow SCD}$		Matrice de Passage du système SCC au système SCD
$ q $	1,60217653.10 <sup>-19</sup> [C]	Charge élémentaire des électrons
$Q_{inv} / Q_{dep}$	[C]	Charge d'inversion / de déplétion
$\vec{R}_{dep}$	[m]	Vecteur du déplacement interne de l'atome interstitiel
$\vec{R}_B$	[m]	Vecteur du réseau de Bravais
$R_{ch}$	[Ω]	Résistance intrinsèque au canal du transistor
$R_s, R_d$	[Ω]	Résistance d'accès dans les zones de Source et Drain
$s$	[s] <sup>-1</sup>	Taux de génération / recombinaison
$S(k, k')$	[s] <sup>-1</sup>	Densité de probabilité de passage par unité de temps d'un état initial $k$ à l'état final $k'$
$\bar{S} / S_{ij}$	[Pa] <sup>-1</sup>	Tenseur de compliance / Composante du tenseur de compliance
$S_k(E)$	[m] <sup>-2</sup>	Surface isoénergie dans l'espace réciproque
$T_{ox}$	[m]	Epaisseur d'oxyde
$T_{ox, eff}$	[m]	Epaisseur d'oxyde effective
$v_{therm}$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse thermique



$T_i, T_e$	[eV]	Energie cinétique des électrons
$u_l$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse longitudinal du son le long de la direction <100> du Si
$v_d( \vec{E} )$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse de dérive
$v(k)$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse des porteurs de charge
$v_{sat}$	[m].[s] <sup>-1</sup>	vitesse de saturation
$V(r)$	[eV]	Potentiel ionique
$V(G)$	[Ry]	Composante de Fourier du potentiel ionique
$V_b$	[V]	Tensions appliquées au substrat.
$V_d$	[V]	Tensions appliquées au drain.
$V_g$	[V]	Tensions appliquées à la grille
$V_s$	[V]	Tensions appliquées à la source
$V_{dd}$	[V]	Tension d'alimentation
$V_{th}$	[V]	Tension de seuil
$V_{FB}$	[V]	Tension de bande plate, <i>flat band</i>
$V_{ox}(z)$	[V]	Barrière de potentiel additionnelle due à l'oxide de grille
$V(z)$	[V]	Potentiel de confinement
$V_B$	[eV]	Energie additionnelle aux bandes de valence imitant la barrière de potentiel à l'interface Si/SiO <sub>2</sub> dans l'approximation du matériau unique
$V_C$	[eV]	même définition que $V_B$ pour les bandes de conduction
$V_W(r, k)$	[V]	Potentiel de Wigner
$w(r, t)$	[eV]	Energie du gaz électronique
$W$	[m]	Largeur de Grille
$\Gamma(hk)$	[s] <sup>-1</sup>	Taux global d'interaction
$\Delta$		Associé à la vallée de conduction sur le chemin cristallographique <100>
$\bar{\varepsilon}$	[u. r]	Tenseur de déformation

$\varepsilon_{ii}$	[u. r.]	Composante uniaxiale du tenseur de déformation
$\varepsilon_{ij}$	[u. r.]	Composante de cisaillement du tenseur de déformation
$\varepsilon_0$	$8,85 \cdot 10^{-12}$ [Kg] <sup>-1</sup> . [m] <sup>-3</sup> . [A] <sup>2</sup> . [s] <sup>4</sup>	Constante diélectrique du vide.
$\varepsilon_{Si}$	11.68 [u. r.]	Constante diélectrique relative du Silicium
$\varepsilon_{SiO_2}$	4.5 [u. r.]	Constante diélectrique relative de l'oxyde de grille
$\mu_c$	[m] <sup>2</sup> . [V] <sup>-1</sup> . [s] <sup>-1</sup>	Contribution à la mobilité effective des interactions coulombiennes
$\mu_{eff}$	[m] <sup>2</sup> . [V] <sup>-1</sup> . [s] <sup>-1</sup>	Mobilité effective
$\mu_n$	[m] <sup>2</sup> . [V] <sup>-1</sup> . [s] <sup>-1</sup>	Mobilité des porteurs de charge
$\mu_{ph}$	[m] <sup>2</sup> . [V] <sup>-1</sup> . [s] <sup>-1</sup>	Contribution à la mobilité effective des interactions e <sup>-</sup> -phonon
$\mu_{sr}$	[m] <sup>2</sup> . [V] <sup>-1</sup> . [s] <sup>-1</sup>	Contribution à la mobilité effective de la rugosité de surface
$\xi$	[u. r.]	Constante de déplacement interne
$\Xi_d^{\Delta}, \Xi_d^L$	[eV]	Potentiel de déformation hydrostatique des bandes de conduction
$\Xi_u^{\Delta}, \Xi_u^L$	[eV]	Potentiel de déformation de cisaillement des bandes de conduction
$\Xi_{eff}$	[eV]	Potentiel de déformation acoustique
$\Pi / \pi_{ij}$	[Pa] <sup>-1</sup>	Tenseur de piezorésistance / composante du tenseur de piezorésistance
$\rho(r)$	[C]. [m] <sup>-3</sup>	Densité de charge dans la théorie DFT
$\sigma / \bar{\sigma}$	[Pa]	Valeur / tenseur de contrainte
$\sigma_{ii}$	[Pa]	Composante uniaxiale du tenseur de contrainte
$\sigma_{ij}$	[Pa]	Composante de cisaillement du tenseur de contrainte
$\sigma_{vect}$	[Pa]	Tenseur de contrainte dans sa notation vectorielle
$\Sigma$	[eV]	Self-énergie
$\tau$	[s]	Temps de relaxation
$\phi, \theta$ et $\psi$	[rad]	Angles d'Euler
$\phi_f$	[V]	Potentiel de Fermi
$\psi(r, \vec{k})$		Fonction d'onde de la particule

$\omega_{op}$	$[\text{s}]^{-1}$	Pulsation du phonon optique polaire
$\Omega$	$[\text{m}]^3$	Volume d'une cellule élémentaire cristalline