Etude et modélisation des phénomènes physiques émergents pour la simulation de dispositifs électroniques à base de nanofils de silicium

Julien Dura

▶ **To cite this version:**

Julien Dura. Etude et modélisation des phénomènes physiques émergents pour la simulation de dispositifs électroniques à base de nanofils de silicium. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Aix-Marseille Université, 2012. Français. NNT : . tel-00764112

HAL Id: tel-00764112

https://theses.hal.science/tel-00764112

Submitted on 12 Dec 2012

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.

Année 2012

THESE

présentée devant

L'UNIVERSITE AIX-MARSEILLE

Par

Julien DURA

Ingénieur de l'Institut National Polytechnique de Grenoble

en vue d'obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR

Ecole doctorale : Mécanique, Physique, Micro- et Nano-électronique
Spécialité : Micro- et Nano-électronique

Etude et modélisation des phénomènes physiques émergents pour la simulation de dispositifs électroniques à base de nanofils de silicium

Directeur de thèse : Daniela MUNTEANU
Co-encadrant : François TRIOZON

Soutenue le 18 octobre 2012 devant la commission d'examen :

Président	M. Ian O'Connor	Professeur, Ecole centrale de Lyon
Rapporteur	M. Arnaud Bournel	Professeur, Université Paris Sud
Rapporteur	M. Thomas Zimmer	Professeur, Université de Bordeaux 1
Examinateur	M. Hervé Jaouen	Ingénieur STMicroelectronics Crolles
Examinateur	M. Jean-Luc Autran	Professeur, Université de Provence
Directeur de thèse	Mme. Daniela Munteanu	Directrice de recherche, CNRS
Co-encadrant	M. François Triozon	Ingénieur CEA-LETI

Thèse préparée au Laboratoire Electronique et des Technologies de l'Information (CEA-LETI MINATEC) et à l'Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence (IM2NP-CNRS)

1

Remerciements

Après un investissement professionnel et personnel de près de 36 mois, voilà que ma thèse se termine. La rédaction du manuscrit est donc le moment idéal de remercier toutes les personnes qui ont été impliquées, de prés ou de loin, à ce travail. Vu le nombre de personnes croisées au sein des deux organismes qui ont accepté d'encadrer mes travaux, le CEA-LETI de Grenoble et l'IM2NP de Marseille, cette liste sera loin d'être exhaustive. Si toutefois, votre nom a été malencontreusement oublié, n'hésitez pas à le rajouter sur votre propre version...aucun droit d'auteur n'est appliqué ! !

En tout premier lieu, je tenais à remercier l'ensemble de mon jury de soutenance qui a accepté d'évaluer mon travail. Parmi les membres extérieurs du jury, je remercie chaleureusement le président du jury, Mr Ian O'connor, professeur à l'école centrale de Lyon. Ensuite, je remercie les deux rapporteurs qui m'ont autorisé à soutenir ma thèse, messieurs Arnaud Bournel, professeur à l'université Paris-Sud, et Thomas Zimmer, professeur à l'université de Bordeaux 1. Enfin, un grand merci à Hervé Jaouen de la société STmicroelectronics, examinateur de mon travail qui a su apporter sa vision industrielle.

Ensuite, comment ne pas remercier les personnes qui m'ont encadrées au quotidien et, sans qui, je n'aurais certainement pas atteint les objectifs initialement fixés :
Un grand merci à Mme Daniela Munteanu, directrice de recherche au CNRS, pour m'avoir dirigé dans ma recherche, conseillé et soutenu durant ces trois années de présence au sein de l'IM2NP.
Au sein du CEA-LETI, j'ai eu le privilège d'avoir été encadré par Mr François Triozon, ingénieur de recherche, qui a su mettre à mon niveau toutes ces connaissances. Si j'ai pu acquérir qu'une infime partie de son savoir-faire, le contrat est largement rempli !
Enfin, je remercie le dernier membre de mon jury, Mr Jean-Luc Autran, professeur de l'université Aix-Marseille et directeur du département nanoélectronique de l'IM2NP, pour m'avoir accueilli au sein de son équipe et m'avoir donné les possibilités de progresser.

Je tenais également à associer à ces remerciements toutes les personnes qui ont été for-

tement impliquées à ce travail mais dont la présence dans le jury n'a pu être validées. Je remercie donc Mr Sylvain Barraud, ingénieur de recherche au CEA-LETI, qui m'a appuyé et soutenu « numériquement » durant toutes ces années ; Mr Yann-Michel Niquet, ingénieur de recherche au CEA-INAC, pour tout son savoir et son humilité qui rend l'ambiance agréable (même si on ne comprend pas tout). Enfin, un grand merci à Mr Sébastien Martinie, ingénieur de recherche, qui a su brillamment passer le relai et me mettre le pied à l'étrier.

Passons maintenant à mes collègues de travail avec qui je n'ai pas eu la chance de travailler mais avec qui les trois années sont passées très rapidement. Je remercie en premier lieu Jean-Charles Barbé pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire LSM et m'avoir donné la possibilité de développer l'aspect recherche de mon travail dans un environnement appliqué tel que le CEA-LETI. J'associe également tous les permanents de ce laboratoire : Philipe, Pierrette, Olga, Pascal, François D., Patrick, Gilles, Marina, Hélène, Marie-Anne, Anne-Sophie... Afin d'éviter toute jalousie malsaine, je remercie également chaleureusement les trois mousquetaires de l'IM2NP dont l'ouverture d'esprit et la sociabilité sont hors-normes pour des chercheurs « purs souches ». Merci donc à Marc, Fabienne et Nicolas C...

La vie d'un labo ne serait rien sans eux donc je tenais à les remercier dans leur ensemble, il s'agit bien sur de tous les stagiaires, thésards et post-docs que j'ai pu croiser. Commençons évidemment par mes co-bureaux historiques avec qui j'ai perdu tant de neurones : Hadrien, Aude et Nicolas. Je n'oublie évidemment pas les autres (en vrac) : Benoit, Raphael, Sylvain, Eddie, Sébastien, Alexandre, Rémy, Mathieu, Emmanuelle, Salim, Ania, sans oublier les petits nouveaux, Pierre et Anouar. Un grand merci à vous pour les pauses « café » de 16h et les parties de cartes dont le nom fait référence à une pratique sexuelle non recommandée pas l'église catholique.

Pour conclure, je tiens à associer à ces remerciements toutes les personnes « extra-professionnelles » qui m'entourent aux quotidien, que ce soit mes amis ou ma grande famille. Même si leur aide s'est révélée limitée dans la résolution de la dernière équation à la mode, leur présence est essentielle pour trouver un équilibre dans ma vie.

A toute les personnes que je viens de citer et celles que j'ai pu croiser lors de mon parcours, ce fut un plaisir de travailler (ou autre) avec vous et j'espère ce sentiment restera partagé au fil du temps...

Table des matières

Glossaire **7**

Introduction **11**

I Simulation du transport électronique dans les nanocomposants **17**

1 La structure électronique d'un matériau **21**

1.1 Notions théoriques du problème à N corps 21

1.2 Les différentes méthodes utilisées 23

1.2.1 Les méthodes *ab initio* 23

1.2.2 Les méthodes semi-empiriques 25

1.3 Extraction de la fonction d'onde mono-électronique- Équation de Schrödinger 3D 28

1.4 Neutralité électronique - Couplage avec Poisson 31

2 Modélisation du transport électronique : du classique au quantique... **35**

2.1 Formalismes mathématiques pour le transport 36

2.1.1 Equation de Liouville - Von Neumann 36

2.1.2 Equation de Wigner 37

2.1.3 Équation de Boltzmann 38

2.2 Approches Macroscopiques 39

2.3 Approches Microscopiques 44

2.3.1 Résolution Déterministe 44

2.3.2 Résolution Particulaire (Monte Carlo). 45

2.4 Approche Matricielle 46

2.5 Approche compacte 49

II L'architecture "nanofil" comme solution pour le contrôle électrostatique des composants nanoélectroniques 55

3 Le transistor MOSFET comme brique de base de la nanoélectronique 59
3.1 Introduction au MOSFET 60
3.2 Évolution des noeuds technologiques : vers une miniaturisation agressive . 61
3.3 Des effets parasites de plus en plus présents 63
3.4 Émergence de nouvelles architectures 66

4 Structure électronique du nanofil de silicium 69
4.1 Formalisme et approximations pour le nanofil cylindrique 70
4.1.1 Modèle de liaisons fortes 70
4.1.2 Description du système 71
4.1.3 Approximation de la masse effective 71
4.1.4 Approximation d'un système isotropique 75
4.1.5 Validation des hypothèses 78
4.2 Impact de la miniaturisation du transistor sur la structure électronique . . 78

5 Modélisation analytique de l'électrostatique des MOSFETs à base de nanofil 81
5.1 État de l'art sur les principaux modèles compacts pour le transistor MOSFET à nanofil 82
5.1.1 Approche par résolution exacte de l'équation de Poisson 82
5.1.2 Approche par hypothèse d'un potentiel parabolique 83
5.2 Modélisation analytique de l'électrostatique basée sur l'hypothèse d'un potentiel parabolique 83
5.2.1 Détermination du potentiel parabolique 83
5.2.2 Définition de la tension de seuil classique canal long 85
5.2.3 Modélisation du confinement de mécanique quantique 86
5.2.4 Modélisation des effets de structure de bandes 88
5.2.5 Modélisation des effets canaux courts 89

III Étude et modélisation du transport électronique 99

6 Étude numérique des mécanismes d'interactions 103
6.1 Calcul numérique de la mobilité par approche Kubo-Greenwood 104
6.1.1 Détermination du temps de relaxation des porteurs 104
6.1.2 Expression de la mobilité multi sous-bandes 106

6.2 Interaction "phonons" . . . 108
6.3 Interaction "rugosité de surface" . . . 110
6.4 Interaction "Coulombienne à distance" . . . 114
6.4.1 Potentiel d'interaction Coulombien NON écranté . . . 115
6.4.2 Potentiel d'interaction Coulombien écranté . . . 118
6.5 Comparaison et validation sur données expérimentales . . . 120
6.6 Résultats et discussions . . . 121
6.6.1 Impact du diamètre du nanofil . . . 121
6.6.2 Impact des paramètres technologiques . . . 122

7 Modélisation analytique du courant quasi-balistique des MOSFETs à base de nanofil 125

7.1 La méthode des flux . . . 126
7.1.1 Description physique générale d'un nanocomposant . . . 126
7.1.2 Approche de Landauer . . . 127
7.2 Modélisation du transport quasi-balistique . . . 128
7.2.1 Notion de source virtuelle . . . 128
7.2.2 Modèle en courant . . . 129
7.3 Le coefficient de réflexion . . . 132
7.3.1 État de l'art . . . 132
7.3.2 Approche de McKelvey . . . 134
7.3.3 Application à notre nanofil . . . 135
7.3.4 Approche empirique de la puissance . . . 136
7.3.5 Libre parcours moyen des porteurs . . . 137
7.4 Résultats et comparaisons expérimentales . . . 140
7.5 Application à l'étude de petits circuits . . . 142

Bibliographie 152

Glossaire

A

α Numéro de la vallée

B

β_n Paramètre de NON-parabolicité de la structure de bande

C

C_{ox} Capacité d'oxyde de grille du transistor MOSFET

D

D Diamètre du nanofil

Δ Moyenne quadratique de la rugosité de surface du nanofil

E

e Charge élémentaire d'un électron

E_G Bande interdite du silicium

$E_{G,bulk}$ Bande interdite du silicium du matériau massif

E_{eff} Champ effectif transverse

E Énergie de l'électron

$E_{\alpha j}$ Énergie de la sous-bande j de la vallée α

E_{iv} Énergie des phonons intervallées

ϵ_{Si} Permittivité du silicium

ϵ_{SiO_2} Permittivité de l'oxyde de silicium

ϵ_{HfO_2} Permittivité de l'oxyde de silicium

F

$f(r,k,t)$	Fonction de distribution des électrons
F_S	Flux de porteurs au niveau de la source
F_D	Flux de porteurs au niveau du drain
ψ	Fonction d'onde dans l'espace 3D
φ	Fonction d'onde dans les directions du confinement (enveloppe)
$\Im_n$	Intégrale de Fermi à l'ordre n
$f_{raccord}$	Fonction de raccord

G

G	Fonction de Green, solution de Poisson avec charge locale dans l'oxyde
$\widehat{G}$	Fonction de Green, solution de Poisson avec charge locale dans l'oxyde

H

H	Hamiltonien du système
$\hbar$	Constante de Planck réduite

I

I_{DS}	Courant de drain du transistor MOSFET à nanofil

J

j	Numéro de la sous-bande

K

k	Vecteur d'onde
k_B	Constante de Boltzmann

L

L_c	Longueur du canal du transistor
L_{kT}	Longueur de la "kT-Layer"
λ	Libre parcours moyen des porteurs
$l_{\alpha j}$	Moment angulaire de la sous-bande j de la vallée α
Λ	Longueur de corrélation de la rugosité de surface du nanofil

M

μ_{total} Mobilité totale des électrons
μ_0 Mobilité à champ transverse faible
$\mu_{0,bulk}$ Mobilité à champ transverse faible pour le matériau massif
$\mu^{\alpha j}$ Mobilité de la sous-bande j de la vallée α
m_t Masse transverse
$m_{t,bulk}$ Masse transverse du matériau massif
m_l Masse longitudinale
$m_{l,bulk}$ Masse longitudinale du matériau massif
m_z^α Masse de transport de la vallée α
m_c^α Masse de confinement de la vallée α
m_e Masse de l'électron

N

n_{tot} Densité électronique totale (le long du rayon du nanofil)
$n_{\alpha j}$ Densité électronique de la sous-bande j de la vallée α
N_{fix} Densité de charges piégées dans l'oxyde de grille
N_{iv} Nombre de phonons intervallées
η_F Potentiel de Fermi
N_A Dopage du canal
N_{SD} Dopage des source et drain
n_i Dopage intrinsèque

P

Ξ_{ac} Potentiel de déformation acoustique
Ξ_{iv} Potentiel de déformation acoustique

Q

q Différence de vecteurs d'onde entre les sous-bandes initiales et finales
Q_{inv} Charge d'inversion linéïque (le long du rayon du nanofil)

R

R Coefficient de réflexion
r_s Interface Silicium/SiO_2 en coordonnées cylindriques

r_{ox} Interface SiO_2/HfO_2 en coordonnées cylindriques
r_m Interface SiO_2/métal en coordonnées cylindriques
r_c Position de la charge piégée dans l'oxyde en coordonnées cylindriques
ρ Matrice densité

S

S Inverse de la pente sous le seuil
S_e Paramètre d'écrantage
$S_{k\to k'}$ Probabilité de transition d'un état de vecteur d'onde k vers un état de vecteur d'onde k'

T

T Température
t_{SiO_2} Épaisseur de la couche d'oxyde SiO_2
t_{HfO_2} Épaisseur de la couche d'oxyde HfO_2
τ Temps de relaxation d'un électron
θ Dépendance de la mobilité vis-à-vis du champ électrique transverse

V

$V(r,\phi,z)$ Potentiel
V_s Potentiel de surface
$V_{s,th}$ Potentiel de surface au seuil
V_{GS} Polarisation de grille
V_{DS} Polarisation de drain
V_{th} Tension de seuil
$V_{th,long}$ Tension de seuil canal long
ΔV_{th} Chute de tension de seuil liée aux effets de canaux courts
V_{FB} Tension de bande plate
v_{th} Vitesse thermique
v_{inj} Vitesse d'injection

Introduction

$\Rightarrow$ *Un monde de plus en plus "nano"*

Le préfixe "nano" est un terme de plus en plus répandu dans le langage usuel de la société. Que nous parlons de nanotechnologies, nanosciences ou nanomatériaux, ce préfixe de seulement quatre lettres ne laisse pas indifférent. Qu'il suscite de l'engouement ou une certaine crainte, l'intérêt est réel non seulement dans la communauté scientifique mais aussi économique et industrielle puisque le terme "nano" devient à lui seul un argument publicitaire. Cet engouement s'explique par le fait qu'après la révolution industrielle du XIX^e siècle, rares sont les domaines nouveaux où tout reste à approfondir pour un développement industriel. L'apparition des nanosciences au milieu du XX^e siècle a donc mis en exergue de futures perspectives inexplorées. Elles se définissent comme l'étude de systèmes aux dimensions nanométriques (de un à quelques centaines de nanomètres) dans au moins une dimension de l'espace. L'échelle nanométrique est donc la clé de ce nouveau domaine car nous sommes précisément à la frontière entre la mécanique classique et la mécanique quantique où les propriétés des matériaux n'ont plus rien à voir avec celles qui définissent les matériaux de plus grandes échelles. La recherche scientifique portant sur ces nano-objets n'est pas en soi un nouveau domaine. En effet, les perspectives ouvertes par ceux-ci ne sont que le prolongement de l'évolution des différentes disciplines que nous pensions arrivés à maturité : physique, électronique, biologie, mécanique, chimie, informatique... Vu le potentiel applicatif des nanosciences, nous avons vu un essor important à tout niveau portant aussi bien sur la compréhension théorique que sur le maîtrise technologique des procédés de fabrication.

Les origines des nanotechnologies sont relativement récentes car l'idée même d'une réduction extrême des objets ne fût proposée qu'au milieu du siècle dernier avec notamment le fameux discours de Richard Feynman en 1959. Cependant, il faudra attendre les années 80 pour voir concrètement les premières observations nanométriques. Ceci fût rendu possible grâce à l'invention d'instruments permettant d'observer et d'interagir avec la matière au niveau atomique. Il s'agit du microscope à effet tunnel (STM pour *Scanning Tunneling Microscope*) [Bin82] en 1981 développé par des chercheurs de la société IBM puis du microscope à force atomique (AFM pour *Atomic Force Microscope*)

[Bin86]. Ces deux outils ont eu un tel impact sur les nanotechnologies que leur développement se poursuit encore aujourd'hui. Cependant, il a fallu attendre 1990 pour voir la première démonstration officielle de manipulations d'atomes avec les fameuses lettres "IBM" reconstruites avec 35 atomes de xénon [Eig90]. A partir de là, une multitude de possibilités se sont ouvertes avec l'élaboration de nouvelles formes structurelles des nano-objets ou l'exploration de nouveaux matériaux afin de couvrir l'ensemble des besoins. Depuis lors, les nanosystèmes se multiplient comme en témoigne l'augmentation continue et exponentielle des publications scientifiques concernant les nanotechnologies [Bon06].

$\Rightarrow$ *Le nanofil semiconducteur*

La forme des nano-objets est actuellement très variée puisque nous observons dans la littérature différentes structures telles que les rubans, les nanocristaux, les nanotubes (souvent en carbone)... Dans ce manuscrit, nous nous intéresserons plus particulièrement aux nanofils considérés comme une structure émergente avec potentiel applicatif vaste. Il s'agit de structures longilignes (d'où le parallèle avec un fil) généralement cristallines avec une section assez diverse aussi bien en terme de taille que de forme. En fonction des matériaux utilisés, le comportement du nanofil est semi-conducteur, isolant ou métallique. Les nanofils peuvent être clés dans le développement des nanotechnologies car, contrairement à d'autres architectures, cette structure est nanométrique sur deux des trois dimensions de l'espace. L'intérêt du "nano" y est donc accentué par rapport à des structures fines mais planaires. Ceci se retrouve dans la communauté scientifique comme en témoigne l'augmentation importante du nombre de publication sur ce sujet depuis les années 90 [Lie07]. La méthode de fabrication de ces nanofils varie en fonction des applications ciblées (et donc des dimensions géométriques). Nous distinguons notamment la fabrication de nanofils par approche "top-down". Cette technique provient de l'industrie de la microélectronique puisqu'elle consiste à graver le matériau massif de façon précise par lithographie. La précision de cette technique dépend essentiellement de la résolution qu'il est possible d'obtenir, généralement perturbée par des phénomènes de diffraction du faisceau optique. Au contraire, la deuxième approche dite "bottom-up" consiste à faire croître le nanofil à partir d'un substrat cristallographique. Cette technique est réalisée à partir du procédé Vapeur Liquide Solide (VLS) mis au point par Wagner *et al* [Wag64]. Avec l'aide d'un catalyseur métallique qui va attirer les atomes du substrat, le nanofil croit en cristallisant les atomes à l'interface entre la goute métallique et le substrat. La figure 1 montre la réalisation de nanofils par les deux approches. Il ne s'agit que d'exemples afin d'illustrer le propos puisque nous retrouvons de plus en plus de publications montrant la faisabilité du procédé technologique pour la fabrication du nanofil. Le choix des méthodes dépendra

bien évidemment de l'application choisie pour les nanofils. Généralement, la technique par croissance est plus difficilement contrôlable (homogénéité du diamètre le long du fil par exemple) mais reste techniquement plus simple et moins couteuse.

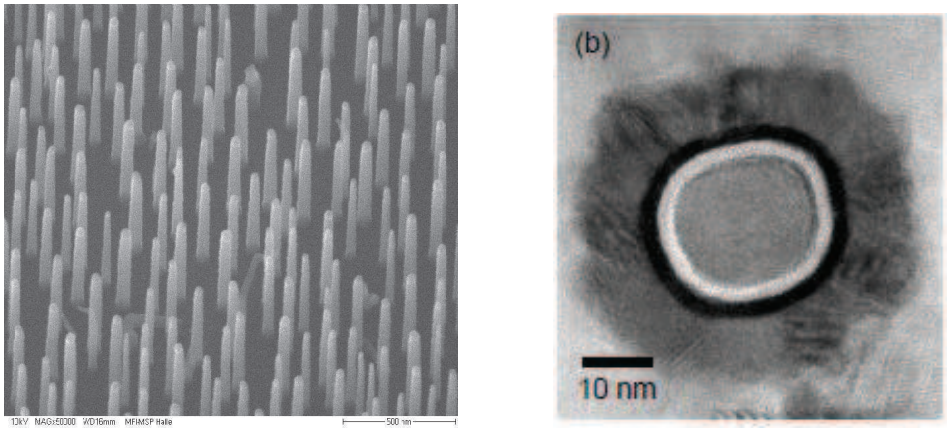


FIGURE 1: Champ de nanofils de silicium obtenus par approche "bottom-up" (croissance) [Wan06] (gauche) ; Coupe transverse d'un nanofil obtenu par approche "top-down" (gravure) [Tac11] (droite).

⇒ *Quelles applications pour les nanofils ?*

Le nanofil est généralement présenté comme une alternative à une autre structure unidimensionnelle qu'est le nanotube de carbone. Ces deux nanostructures sont souvent décrites comme les futures briques élémentaires des nanodispositifs. Cependant, pour les nanotubes de carbone, les propriétés sont définies par la chiralité (c'est à dire l'axe selon lequel le feuillet de carbone s'enroule) qui reste difficilement contrôlable technologiquement parlant. C'est pourquoi le nanofil semble plus accessible puisque les techniques de fabrication sont fiables aussi bien sur la composition chimique du nanofil que son uniformité géométrique. De plus, la fabrication du nanofil par gravure apparaît comme la continuité des procédés technologiques actuels ce qui incite l'industrie à se tourner vers celui-ci afin de limiter les coûts de mise à jour du matériel.
Comme nous l'avons dit précédemment, les applications potentielles des nanofils sont nombreuses. La principale reste le développement de composants électroniques à base de transistors notamment après l'évocation par le comité ITRS (*International Technology Roadmap for Semiconductors*) de l'utilisation de nanofils comme architecture de référence pour les noeuds technologiques ultimes [ITR11]. Nous savons combien il est difficile de

suivre les lois de performances et économiques telles que la loi de Moore pour maintenir la révolution en électronique à un niveau acceptable. L'engouement s'est aussitôt fait ressentir dans la littérature dans les années 2000 [Chu00] [Cui01] [Cui03] [Zhe04] [Gol06] [Wan06] [Hu08]. C'est sur cette application que nous nous pencherons dans la suite de ce manuscrit. Toutefois, d'autres possibilités sont à l'essai dans la littérature pour des composants annexes comme les portes logiques [Hua01] ou les mémoires non-volatiles [Dua02]. D'autres domaines beaucoup plus récents sont aussi envisagés comme le photovoltaïque [Tia07] [Kem08], la photonique [Gud02] [Pau06] avec notamment l'utilisation de semiconducteurs III-V [Bjo02] [The03] [Dic04] ou des applications capteurs de type biologique ou chimique avec fonctionnalisation du nanofil [Zho03] [Hah04]. Toutes ces applications sont aussi différentes les unes des autres et nécessitent une compréhension approfondie pour peut être un jour révolutionner à nouveau notre quotidien. Pour plus d'informations, le lecteur pourra se reporter à la publication de R. Rurali [Rur10] qui synthétise les connaissances actuelles sur les nanofils avec toutes les références adéquates.

$\Rightarrow$ *L'étude théorique et la simulation des propriétés des nanofils*

Au regard des enjeux et de ce que peut apporter le nanofil au développement des nanotechnologies, les besoins en connaissances sont énormes. Que ce soit en compréhension théorique, en maîtrise des techniques ou plus en aval avec l'élaboration de dispositifs fonctionnels, chaque étape est importante et participe à l'émergence de ce domaine aussi bien au niveau scientifique qu'économique. C'est pourquoi la simulation a toute sa place dans la chaîne industrielle. Cependant, ce terme de simulation est extrêmement général puisqu'il regroupe des objectifs très variés : de la compréhension de la mécanique quantique très présente au niveau nanométrique, à l'étude des procédés technologiques tels que l'implantation de dopants dans un réseau cristallin par exemple mais aussi des modélisations plus simples requises afin d'estimer les performances des futurs dispositifs complets. Il s'agit donc d'un outil très pratique complémentaire aux activités expérimentales pour une plus forte compréhension et une réduction des coûts.

Nous ne pouvons pas parler d'essor de la simulation dans les nanosciences sans parler d'amélioration des outils numériques à l'origine de l'intérêt de plus en plus fort pour des simulations numériques amonts (de type atomistique). Les matériels utilisés sont de plus en plus performants notamment avec l'augmentation de la fréquence des processeurs et avec l'apparition de "clusters" qui regroupent plusieurs centaines (voire milliers) de coeurs de calcul. C'est par la combinaison des compétences de physiciens, d'informaticiens mais aussi de mathématiciens afin d'améliorer les algorithmes de calcul que la simulation nu-

mérique est devenue si populaire aujourd'hui.

⇒ *Objectif et plan de ce travail*

De façon générale, nous observons dans la littérature une multitude de publications (sur le nanofil ou autre) concernant des études numériques au niveau atomistique ou bien du design de composants afin d'anticiper et de valider les futures orientations industrielles. Cependant, très peu de passerelles sont faites entre les deux niveaux de simulations bien que la physique soit commune. C'est dans ce contexte que ce travail se situe. Nous nous intéresserons uniquement aux problématiques liées au transport électronique dans un nanofil de silicium. Le manuscrit se décompose en trois grandes parties découpées elle-même en chapitres. La première fera l'état des lieux de la simulation actuelle avec la description des caractéristiques des nanostructures aussi bien pour la structure de bande (chapitre 1) et ses problématiques d'extraction que pour les différentes approches de modélisation du transport électronique (chapitre 2). Dans la deuxième partie, nous verrons un des principaux avantages du nanofil qui est son électrostatique assez stable vis-à-vis d'éventuelles perturbations. Pour cela, nous nous pencherons sur une application précise du nanofil à savoir l'utilisation de cette architecture particulière en microelectronique. En effet, l'évolution des transistors MOSFET (*Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor*)(et donc des performances des composants électroniques) est extrêmement dépendante du contrôle électrostatique de sa zone active. Dans le chapitre 3, nous exposerons donc le contexte actuel des transistors MOSFETs : de l'enjeu économique jusqu'aux problématiques qu'il reste à résoudre et pourquoi le nanofil apparait comme une solution alternative aux architectures standards. Ensuite, nous étudierons plus en détails l'électrostatique du nanofil avec une étude de sa structure de bandes (chapitre 4) et notamment son évolution en fonction des épaisseurs de fils. Nous exposerons à cette occasion les différents codes que nous avons utilisés ou développés dans cette thèse. Nous ferons systématiquement une comparaison entre des approches précises telles que des calculs atomistiques et d'autres approches faisant intervenir plusieurs hypothèses afin de simplifier le système pour tendre vers des simulations de dispositifs plus proches de ce qui est fait expérimentalement (donc des dimensions plus importantes). Enfin, dans le dernier chapitre de cette partie (chapitre 5), nous mettrons en place un modèle analytique de l'électrostatique du nanofil à travers la modélisation de la tension de seuil du transistor MOSFET à base de nanofil. Toute la physique observée précédemment telle que les effets de confinement quantique ou des effets de structure de bandes est retranscrite dans un modèle compact compatible avec des simulations au niveau circuit. La dernière partie de ce manuscrit se concentrera sur le transport électronique dans les nanofils. Dans le premier chapitre de cette partie (chapitre

6), nous expliquerons la théorie du code que nous avons développé afin de calculer la mobilité dans le nanofil incluant les principaux mécanismes qui limitent le transport à savoir les interactions avec les phonons, la rugosité de surface et l'interaction Coulombienne à distance. Ce code basé sur la formule de Kubo-Greenwood fait plusieurs approximations permettant de calculer numériquement la mobilité pour des diamètres assez importants contrairement à des codes plus précis sur la physique. La mobilité est donc calculée et analysée pour différentes configurations (variation de diamètres, d'oxydes de grille...). Enfin dans le dernier chapitre (chapitre 7), à l'instar de la partie 2, nous mettrons en place une modélisation analytique du courant de drain du transistor MOSFET à nanofil incluant évidemment la tension de seuil développée dans le chapitre 5 mais aussi tous les phénomènes observés au niveau du transport d'un porteur (effet de quasi-balisticité, effet de diamètre...). Les résultats seront exposés et comparés autant que cela fut possible à des données expérimentales. Le manuscrit se finira sur l'utilisation du modèle développé avec la simulation de petits circuits tels qu'un oscillateur en anneau ou une cellule mémoire SRAM incluant tous les phénomènes ultimes qui sont censés impacter les performances du transistors MOSFET pour les années à venir. Loin d'être exhaustif sur la théorie ou sur le design de circuit, ce travail tente de faire le lien entre toutes les simulations afin d'apporter, d'un coté comme de l'autre, tous les arguments nécessaires à valider la pertinence de l'architecture nanofil pour une application MOSFET.

Première partie

Simulation du transport électronique dans les nanocomposants

Comme nous venons de le voir dans l'introduction générale, le domaine de la nanotechnologie au sens large connait un développement rapide puisque les nanostructures offrent des perspectives intéressantes et transverses. Bien au delà de la microélectronique, de nombreux domaines peuvent être dynamisés comme le BTP ou le textile sans compter le domaine médical. Une compréhension fine des matériaux et notamment leurs propriétés à l'échelle nanométrique est indispensable. C'est pourquoi la simulation numérique connaît un tel essor au regard des enjeux. De plus, l'amélioration des performances des machines de calcul ainsi que la réduction de leur coût a fortement participé à cette émergence. De nos jours, les laboratoires ou entreprises disposent de "clusters" de calculs pour leurs simulations. L'optimisation des codes numériques par de meilleurs algorithmes jusqu'à la parallélisation est donc devenu un enjeu à part entière.

Dans cette partie, nous allons passer en revue le formalisme théorique du concept de structure de bandes d'un matériau et les problèmes qui se soulèvent pour sa simulation numérique. Dans le chapitre 1, nous poserons le problème à N-corps qui constitue la base de l'étude des solides. Nous verrons que deux grandes familles d'approches existent afin de simplifier le problème : les méthodes abinitio et les méthodes semi-empiriques. Une fois les approximations faites, nous verrons comment il est alors possible d'extraire numériquement la fonction d'onde issue de la résolution de l'équation de Schrödinger en trois dimensions à travers la méthode "Mode Space" puis son couplage avec l'équation de Poisson afin de respecter la neutralité électronique. Dans le deuxième chapitre de cette partie, nous ferons un tour d'horizon des formalismes employés pour la simulation et la modélisation du transport électronique dans les nano-composants (orientés transistor). Nous parcourrons toutes les méthodes, des plus simplistes par une approche de mécanique classique jusqu'au développement de formalisme de mécanique quantique. Nous verrons qu'un fort lien existe entre la structure électronique et le transport électronique. Une vision générale de la simulation numérique (de la nature même des matériaux jusqu'au transport électronique) est donc proposée afin de justifier les méthodes choisies dans la suite de ce travail pour aboutir sur un modèle, dit compact, seul apte à estimer les performances de circuits contenant plusieurs milliards de transistors.

Chapitre 1

La structure électronique d'un matériau

Sommaire

1.1 Notions théoriques du problème à N corps 21

1.2 Les différentes méthodes utilisées 23

1.2.1 Les méthodes *ab initio* 24

1.2.2 Les méthodes semi-empiriques 26

1.3 Extraction de la fonction d'onde mono-électronique- Équation de Schrödinger 3D 29

1.4 Neutralité électronique - Couplage avec Poisson 32

1.1 Notions théoriques du problème à N corps

S'intéresser à la structure de bande d'un matériau constitué de N_{at} noyaux et de N_{el} électrons, consiste à déterminer la répartition statistique des électrons dans l'espace réel en fonction de leur énergie. L'étude de la structure de bande repose donc sur la résolution d'un problème à $(N_{at} + N_{el})$ particules chargées avec toutes les combinaisons possibles d'interactions que cela engendre. Afin de ne pas compliquer le problème, l'extraction de la structure de bandes se fait en ne considérant aucune perturbation extérieure. Dans la suite, chaque électron est repéré par une variable $\mathbf{x}$ contenant aussi bien les coordonnées spatiales que le spin. De même, la variable $\mathbf{X}$ représente l'état spatial et de spin d'un noyau. Le système est donc décrit par une fonction d'onde $\Psi(x_1,...,x_{N_{el}},X_1,...,X_{N_{at}})$ solution

de l'équation de Schrödinger. Dans le cas stationnaire, celle-ci s'écrit pour un système d'énergie **E** [Coh95] :

$$H.\Psi(x_1, ..., x_{N_{el}}, X_1, ..., X_{N_{at}}) = \mathbf{E}.\Psi(x_1, ..., x_{N_{el}}, X_1, ..., X_{N_{at}}) \tag{1.1}$$

où H est l'hamiltonien du système. Il s'agit de l'opérateur décrivant les différentes contributions : opérateurs d'énergie cinétique et d'énergie potentielle des particules en interaction :

$$\begin{aligned} H = & \underbrace{T_{noy}}_{\text{Énergie cinétique des noyaux}} + \underbrace{V_{noy-noy}}_{\text{Énergie d'interaction noyau-noyau}} \\ & + \underbrace{T_{el}}_{\text{Énergie cinétique des électrons}} + \underbrace{V_{el-noy}}_{\text{Énergie d'interaction électron-noyau}} + \underbrace{V_{el-el}}_{\text{Énergie d'interaction électron-électron}} \end{aligned} \tag{1.2}$$

La résolution de l'équation 1.1 n'est possible que pour un nombre extrêmement restreint de corps (maximum deux !). Sans cette condition, la cout numérique explose. L'enjeu d'une approche théorique consiste donc à apporter des méthodes de simplifications qui approchent au mieux la solution exacte.

La première approximation employée en physique du solide est de découpler les degrés de liberté ioniques et électroniques. Cette approximation est dite "approximation de Born-Oppenheimer" ou encore "approximation adiabatique" [Bor27]. Elle se justifie par la différence de masse entre un électron et un noyau. En effet, dans le silicium, le ratio des vitesses est de l'ordre de 100 entre un électron et un noyau. De façon simple, les noyaux sont considérés fixes pour les électrons. La fonction d'onde s'écrit donc comme le produit de deux fonctions d'onde ; une électronique ψ^{el} et l'autre atomique ϕ^{noy}.

$$\Psi \simeq \psi^{el}.\phi^{noy} \tag{1.3}$$

Par conséquent, l'équation initiale revient à résoudre l'équation de Schrödinger strictement d'un point de vue électronique pour une configuration donnée des noyaux.

$$[T_{el} + V_{el-noy} + V_{el-el}].\psi^{el}(x_1, ..., x_{N_{el}}) = \mathbf{E}^{el}.\psi^{el}(x_1, ..., x_{N_{el}}) \tag{1.4}$$

A partir de maintenant, nous nous intéresserons uniquement à la fonction d'onde électronique ψ^{el} qui reste néanmoins un problème à N_{el} corps. Toujours dans l'optique de simplifier le problème, nous considérerons les électrons comme "indépendants". Cela permet d'exprimer N_{el} fonctions à une variable plutôt que une fonction à N_{el} variables. Ce choix est avant tout stratégique afin d'alléger numériquement le problème. Par exemple,

pour un maillage à 1000 points, le cout de stockage de la fonction d'onde passe de $1000^{N_{el}}$ pour une fonction à N_{el} variables à 1000xN_{el} pour N_{el} fonctions à une variable. La représentation par électrons indépendants se justifie par la théorie du liquide de Fermi de Landau [Asc76] qui considère que pour des électrons peu énergétiques (de l'ordre de l'agitation thermique k_BT), la relaxation par un autre électron est bien plus longue comparée à d'autres mécanismes de relaxation. Toutefois, de façon théorique, décrire l'état d'un électron comme la solution de l'équation mono-électronique n'implique pas systématiquement qu'aucune interaction n'intervient entre les électrons. C'est à cette problématique que toutes les méthodes basées sur la représentation des électrons indépendants tentent de répondre.

1.2 Les différentes méthodes utilisées

Les méthodes utilisées pour calculer la structure électronique (c'est-à-dire pour résoudre l'équation 1.4) se décomposent en deux grandes familles : d'une part, les méthodes "*ab initio*" qui utilisent les lois physiques de base sans postulat additionnel et d'autre part, les méthodes semi-empiriques pour lesquelles un hamiltonien général est utilisé et dont les paramètres sont ajustés à partir de données expérimentales ou *ab initio*. Dans les deux cas, même si certaines méthodes divergent dans leur approche pour traiter la physique et notamment les interactions, elles convergent sur leur schéma numérique puisque toutes sont basées sur des calculs mono-électroniques de fonctions d'onde desquelles vont être déterminées les énergies d'interaction qui elles-mêmes affectent les fonctions d'onde. Des boucles d'itération sont donc nécessaires afin de s'assurer de la cohérence du système.
L'équation de Schrödinger 1.4 s'écrit pour un calcul mono-électronique :

$$\left[\frac{-\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m_e} + V\right]\varphi_i(\mathbf{x}_i) = E(\mathbf{k}).\varphi_i(\mathbf{x}_i) \tag{1.5}$$

où V est l'opérateur potentiel du système et m_e est la masse de l'électron.

De plus, généralement, les matériaux utilisés sont de nature cristalline ce qui permet d'appliquer le théorème de Bloch afin d'exploiter cette périodicité. Nous pouvons donc introduire un vecteur d'onde $\mathbf{k}$ associé à chaque bande n de la structure électronique. Les fonctions d'ondes associées $|\varphi_{n,\mathbf{k}}\rangle$, solution de l'équation 1.5, peuvent donc s'écrire en utilisant les fonctions de Bloch [Asc76].

$$\varphi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}).e^{i\mathbf{k}.\mathbf{x}} \tag{1.6}$$

où $u_{n,\mathbf{k}}$ est une fonction ayant la périodicité de la structure cristalline.

1.2.1 Les méthodes *ab initio*

Ces dernières années, les méthodes *ab initio* deviennent de plus en plus populaires. Outre les capacités de calculs grandissantes, elles suscitent la curiosité car leur domaine d'application est vaste. Diverses activités sont donc concernées, de la chimie à la physique en passant par la biologie, car les propriétés de n'importe quelle structure (molécules, agrégats, solides...) peuvent être étudiées. Le principe de ces méthodes repose sur l'extraction de l'état fondamental correspondant à l'énergie la plus basse du système. La fonction d'onde associée à ce minimum doit alors être trouvée (généralement en utilisant la forme variationnelle [Coh95]) :

$$E_{min} = min_{\psi} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{1.7}$$

Comme nous venons de le dire, toute la difficulté réside dans l'expression de l'hamiltonien et notamment la description fine de l'interaction entre particules. Nous pouvons distinguer deux catégories d'approches : les méthodes en fonction d'onde et les méthodes basées sur la fonctionnelle de densité.

Les méthodes en fonctions d'onde

Comme nous venons de le voir, l'ensemble des méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger se concentre sur un problème à un corps. Les méthodes en fonctions d'onde sont les plus représentatives puisque la fonction d'onde mono-électronique est au coeur de leur développement mathématique.
Dans l'approximation de Hartree, la fonction d'onde totale s'écrit comme le produit des fonctions d'onde mono-électroniques :

$$\varphi^H(x_1, ..., x_{N_{el}}) = \prod_{i=1}^{N_{el}} \varphi_i(x_i) \tag{1.8}$$

L'interaction entre électrons est décrite en considérant que chaque électron évolue dans un champ électrique généré par la présence des autres électrons [Har28]. Cependant, le potentiel de Hartree ne permet pas de décrire assez précisément cette interaction. Il a été montré que les équations de Hartree conviennent de façon assez réaliste aux atomes isolés où peu d'électrons interviennent mais s'avèrent limitées pour l'étude des solides.
Dans l'optique d'optimisation, l'approximation de Hartree-Fock s'attache à la nature des électrons puisqu'elle corrige le fait que ce sont des fermions. Pour corriger le coté non

anti-symétrique de l'équation 1.8, la fonction d'onde dans l'approximation de Hartree-Fock s'exprime comme un déterminant de fonctions d'onde mono-électroniques, appelé déterminant de Slater :

$$\varphi^{HF} = \frac{1}{\sqrt{N_{el}!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_1(x_{N_{el}}) \\ \varphi_2(x_1) & \dots & \varphi_2(x_{N_{el}}) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{N_{el}}(x_1) & \dots & \varphi_{N_{el}}(x_{N_{el}}) \end{vmatrix} \tag{1.9}$$

La résolution de l'équation 1.7 avec cette hypothèse donne, par la méthode variationnelle, un terme supplémentaire par rapport à la simple approximation de Hartree afin d'améliorer l'interaction électron-électron. Cette approximation est tout à fait adaptée à l'étude de la structure de bandes des solides même si l'interaction reste encore incomplète comme l'absence des effets de corrélation entre électrons.
Pour être parfaitement décrite, la fonction d'onde devrait s'écrire comme une somme infinie de déterminant de Slater. Considérant l'aspect irréaliste de la chose, la méthode dite "interaction de configuration" étend l'approche de Hartree-Fock en imposant un nombre fini de cette somme. Les quelques imperfections énoncées précédemment sont corrigées au détriment d'un cout numérique qui explose.

Les méthodes en fonctionnelle de la densité

Contrairement aux méthodes présentées ci-dessus, les méthodes en fonctionnelle de la densité considèrent la densité électronique n comme variable du problème. Ce changement permet notamment une forte simplification du système mathématique et donc une réduction du cout numérique.
La méthode la plus utilisée dans ce domaine là reste la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT pour *Density Functional Theory*). Les fondements de cette approximation considèrent que la résolution peut se faire à travers une seule fonctionnelle de la densité à l'état fondamental. De même qu'avec une méthode en fonction d'onde, la densité électronique doit être trouvée afin de minimiser l'énergie du système, exprimée mathématiquement par :

$$E[n(\mathbf{x})] = T_{el}[n(\mathbf{x})] + V_{el-el}[n(\mathbf{x})] + V_{el-noy}[n(\mathbf{x})] \tag{1.10}$$

L'approximation de la DFT peut paraître idéale puisque la résolution est exacte. Cependant, aucune expression explicite n'existe pour la description des parties énergie cinétique des électrons T_{el} et potentiel d'interaction entre électrons V_{el-el} de l'hamiltonien du système à plusieurs électrons. De plus, même si cette méthode est très bien adaptée pour

l'extraction de l'état fondamental, une méthode complémentaire doit généralement être utilisée pour décrire les états excités. Sans les développer, nous pouvons énoncer pour cela la TDDFT (*Time Dependant Density Functional Theory*) [Bur05] ou la théorie perturbative à plusieurs corps [Hed65] [Hyb86]. Cependant, ces simulations sont limitées par leur temps de calcul et ne sont donc applicables qu'à l'étude de petits systèmes (quelques dizaines d'atomes).

1.2.2 Les méthodes semi-empiriques

Malgré la pertinence des méthodes *ab initio* pour l'étude des solides, elles requièrent des puissances numériques qui limitent leur utilisation, notamment sur la taille des dispositifs. Les méthodes semi-empiriques entrent en jeu pour contrer cette limitation. Elles utilisent des hamiltoniens modèles utilisant des paramètres ajustables afin de simplifier le problème. Pour ces méthodes, chaque électron est dans un état $|n, \mathbf{k}\rangle$ associé à une fonction d'onde $|\varphi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ exprimée sur une base simplifiée.
Diverses méthodes existent pour la résolution de l'équation équation de Schrödinger monoélectronique (1.5). La structure électronique peut alors être extraite pour la plupart des matériaux cristallins soit dans toute la première zone de Brillouin (méthodes pseudopotentiels ou liaisons fortes) soit au voisinage de vecteur d'onde spécifique (méthode **k**.**p** ou approximation de la masse effective).

Les liaisons fortes

Le principe de la résolution de l'équation de Schrödinger par la méthode des liaisons fortes consiste à décomposer les états propres du système sur une base d'orbitales localisées de chaque atome du matériau. Dans le cas d'une structure cristalline, nous pouvons écrire la fonction d'onde comme :

$$|\varphi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \sum_{i=1}^{N_{at}} \sum_{\alpha=1}^{+\infty} c_{n,i,\alpha} \phi_{i,\alpha}(\mathbf{x} - X_i) \tag{1.11}$$

où $\phi_{i,\alpha}(\mathbf{x}\text{-}X_i)$ est l'orbitale de type α centrée sur l'atome i décrit par la coordonnée X_i.

Si une infinité d'orbitales est considérée, la formulation mathématique est exacte. Cependant, dans les faits, cela n'est pas possible et des simplifications doivent être apportées pour alléger l'aspect numérique sans perdre d'informations importantes [Sla54]. Parmi les principales, nous pouvons noter le choix d'une base minimale d'orbitales en ne considérant que les électrons de valence et non de coeur et une portée finie des orbitales (c'est-à-dire qu'elles disparaissent à partir d'une certaine distance du noyau de l'atome. En général,

les modèles s'arrêtent aux premiers, deuxièmes ou troisièmes voisins (pas de couplages au delà). Malgré ceci, augmenter le nombre d'atomes du système grossit la base d'orbitales sur laquelle cette méthode se repose. Le temps de calcul y est alors fortement rallongé. Pour les gros systèmes, il est alors préférable d'utiliser la méthode des pseudo-potentiels qui couvre également l'intégralité de la première zone de Brillouin.

Pseudo-potentiels

Le nom de cette méthode vient du fait que le potentiel exercé par les noyaux et les électrons de coeurs est remplacé par un potentiel effectif qui s'applique uniquement aux électrons de valence. L'énergie potentielle de l'équation de Schrödinger s'exprime alors comme la somme des contributions de chaque pseudo-potentiel :

$$V = -q \sum_i v_i(\mathbf{x} - X_i) \tag{1.12}$$

où $v_i(\mathbf{x}\text{-}X_i)$ est le pseudo-potentiel de l'atome i représenté par la coordonnée X_i.

L'utilisation de cette méthode s'applique aux cellules périodiques découpées en cellules unités. Il est alors tout naturel de décomposer la fonction d'onde sur une base d'ondes planes :

$$|\varphi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{G}} c_{n,\mathbf{k},\mathbf{G}} \frac{1}{\Omega_{cellule}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k}).\mathbf{x}} \tag{1.13}$$

où $\Omega_{cellule}$ est le volume de la cellule unitaire et $\mathbf{G}$ est un vecteur du réseau réciproque. En plus des termes $v_i(\mathbf{G})$ (transformé de Fourier de $v_i(\mathbf{x})$), un paramètre ajustable consiste donc à limiter le nombre d'ondes planes qui constituent la base. L'ensemble de ces paramètres est utilisé pour ajuster les énergies $E_n(\mathbf{k})$ au plus proche de ce qui est obtenu expérimentalement ou par approche *ab initio* sur un ensemble de vecteurs d'onde de la première zone de Brillouin.

Méthode k.p

Contrairement aux deux méthodes présentées juste au dessus, la méthode **k.p** est locale puisqu'elle permet de reproduire les principales bandes de la structure électronique au voisinage d'un point k_0 donné [Car66]. La résolution de l'équation de Schrödinger par cette méthode s'apparente donc à un développement limité de la structure de bandes autour de ce point k_0. De plus, cette méthode utilise la nature cristalline des matériaux utilisés ce qui permet d'écrire les fonctions d'onde $|\varphi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ en utilisant les fonctions de Bloch pour traduire cette périodicité comme écrite à l'équation 1.6. La méthode **k.p** consiste donc à décomposer cette fonction $u_{n,\mathbf{k}}$ sur la base des solutions $u_{n,\mathbf{k0}}$ (solution de

Schrödinger) supposées connues.

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_m c_{n,m}(\mathbf{k}) u_{n,k_0}(\mathbf{x}) \tag{1.14}$$

Cette méthode est exacte tant que la base des solutions utilisée est infinie. En pratique, comme pour les autres méthodes, ce n'est pas le cas et un nombre fini doit être choisi (le temps de calcul en est fortement dépendant). Toutefois, l'exactitude et la pertinence de cette méthode repose essentiellement sur des paramètres ajustables qui interviennent dans l'équation de Schrödinger.

Approximation de la masse effective

Dans l'approximation de la masse effective, l'effet intrinsèque du réseau sur le porteur va être inclus directement dans sa nature à travers sa masse. La description classique du déplacement d'un électron dans un cristal est soumise aux lois de Newton qui considèrent que l'électron subit la force interne liée au réseau d'atomes F_i et une force externe due par exemple à l'application d'un champ électrique F_e. L'approximation consiste donc à supprimer le terme F_i et à inclure son effet directement en modifiant la valeur de la masse de l'électron.
De façon globale, nous pouvons définir une vitesse de groupe des porteurs :

$$\mathbf{v}_n = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\mathbf{k}} E_n \tag{1.15}$$

De plus, le champ extérieur s'exprime en fonction du vecteur d'onde des porteurs :

$$\mathbf{F}_e = \frac{(d\hbar k)}{dt} \tag{1.16}$$

A partir de ces équations, nous pouvons déduire les dépendances de la masse effective :

$$m^*_{e,x(y,z)} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_{x(y,z)}} \right)^{-1} \tag{1.17}$$

avec (x,y,z) les trois directions de l'espace.

Bien que très simpliste, cette approximation est très utilisée puisqu'elle simplifie considérablement le problème numérique. En toute rigueur, il faudrait connaître la valeur des masses effectives dans les trois directions de l'espace et pour tout point de la première zone de Brillouin. Généralement, pour une même direction et dans une même bande, cette masse est considérée constante ce qui approxime la bande comme parabolique. Des cor-

rections supplémentaires doivent être alors ajoutées pour décrire proprement la structure électronique du matériau.

1.3 Extraction de la fonction d'onde mono-électronique- Équation de Schrödinger 3D

Une fois la méthode choisie et donc l'hamiltonien défini, il faut alors résoudre numériquement l'équation de Schrödinger qui idéalement recouvre les trois dimensions de l'espace. Dans la suite, nous allons présenter les découpages numériques employés afin d'extraire les valeurs propres de la fonction d'onde. Ici, nous considérons l'approximation de la masse effective qui sera largement utilisée par la suite. Ainsi, comme nous venons de le dire, lorsque la particule (de masse effective m^*) subit l'action d'un potentiel U, sa fonction d'onde obéit alors à l'équation de Schrödinger [Coh95] (dans le cas stationnaire) :

$$H\psi = E\psi \tag{1.18}$$

où l'hamiltonien H du système est défini comme :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}[\frac{\partial}{\partial x}(\frac{1}{m_x^*}\frac{\partial}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\frac{1}{m_y^*}\frac{\partial}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\frac{1}{m_z^*}\frac{\partial}{\partial z})] + V(x,y,z) \tag{1.19}$$

La résolution de cette équation nous donnera donc une infinité de solutions ψ_n associées chacune à un niveau énergétique E_n. La solution générale de la fonction d'onde est alors une somme sur toutes les solutions propres de l'équation de Schrödinger :

$$\psi(x,y,z) = \sum_n c_n \psi_n(x,y,z) \tag{1.20}$$

où les c_n sont des coefficients complexes déterminés grâce aux conditions initiales.

Cependant, la résolution numérique directe de cette équation dans les trois dimensions de l'espace, appelée approche *Real Space*, est trop complexe. Il faut alors décorréler le problème afin de retrouver une résolution de l'équation de Schrödinger sur une ou deux dimensions. Une alternative a donc été trouvée avec l'approche *Mode Space* [Ven02] [Bar09].

Formalisme mathématique par approche Mode Space- Cas du nanofil

La polarisation de grille appliquée au nanofil dans la direction transverse (x,y) est indépendante de la direction de transport z. On peut alors décomposer la fonction d'onde

en une composante en (x,y) et une composante en z.

$$\psi_n(x,y,z) = \phi_n(z).\varphi_n(x,y) \tag{1.21}$$

Cette séparation n'est pas exacte quand $V(z)$ varie mais l'approche mode-space reste une bonne approximation. Il suffit alors de découper le nanofil en tranches suivant la direction du transport pour résoudre de façon locale ces équations. On supposera alors que le potentiel V(z) est constant sur chaque tranche. Cette approche consiste à remplacer la discrétisation suivant z par une discrétisation de l'espace du vecteur propre (ici, l'énergie quantifiée). Ainsi, l'objectif est d'extraire les deux fonctions d'onde $\psi(z)$ et $\varphi(x,y)$ sur chaque tranche qui dans ce cas sont indépendantes puisque V(z) est supposé constant sur chaque tranche [Coh95].

La première étape consiste donc à étudier la quantification liée à la polarisation de grille dans les directions x et y. Il faut alors résoudre l'équation de Schrödinger 2D sur une tranche du nanofil entre z_0 et $z_0 + dz$, supposant le potentiel constant dans cette direction (V(x,y,z_0)). L'hamiltonien devient alors :

$$H^{2D} = -\frac{\hbar^2}{2}[\frac{\partial}{\partial x}(\frac{1}{m_x^*}\frac{\partial}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\frac{1}{m_y^*}\frac{\partial}{\partial y})] + V(x,y,z_0) \tag{1.22}$$

Cette première étape conduit essentiellement à deux résultats :

- L'extraction des fonctions d'onde propres φ_n due à la résolution de Schrödinger 2D dans le plan transverse au transport.
- L'extraction des niveaux d'énergie quantifiés en x et en y pour une tranche en z associé au potentiel V(z_0). Ainsi, la résolution de l'équation de Schrödinger 2D, sur chaque tranche, dans tout le canal permet de reconstruire les fonctions énergétiques $E_n(z)$ qui régissent le système dans le sens du transport.

La seconde étape consiste donc à réinjecter ces dernières fonctions dans la résolution de l'équation de Schrödinger 1D dans le sens du transport. L'hamiltonien devient donc :

$$H^{1D} = -\frac{\hbar^2}{2}[\frac{\partial}{\partial z}(\frac{1}{m_z^*}\frac{\partial}{\partial z})] + E_n(z) \tag{1.23}$$

Le principal résultat de cette étape est l'extraction de chaque fonction d'onde ϕ_n associée au mode n de la quantification en x et y. Il n'y a pas vraiment de quantification puisque les dimensions géométriques suivant z sont assez grandes pour qu'un réel confinement ait lieu. L'information importante reste quand même la valeur énergétique des porteurs et sa variation suivant z qui jouera un rôle dans le transport.

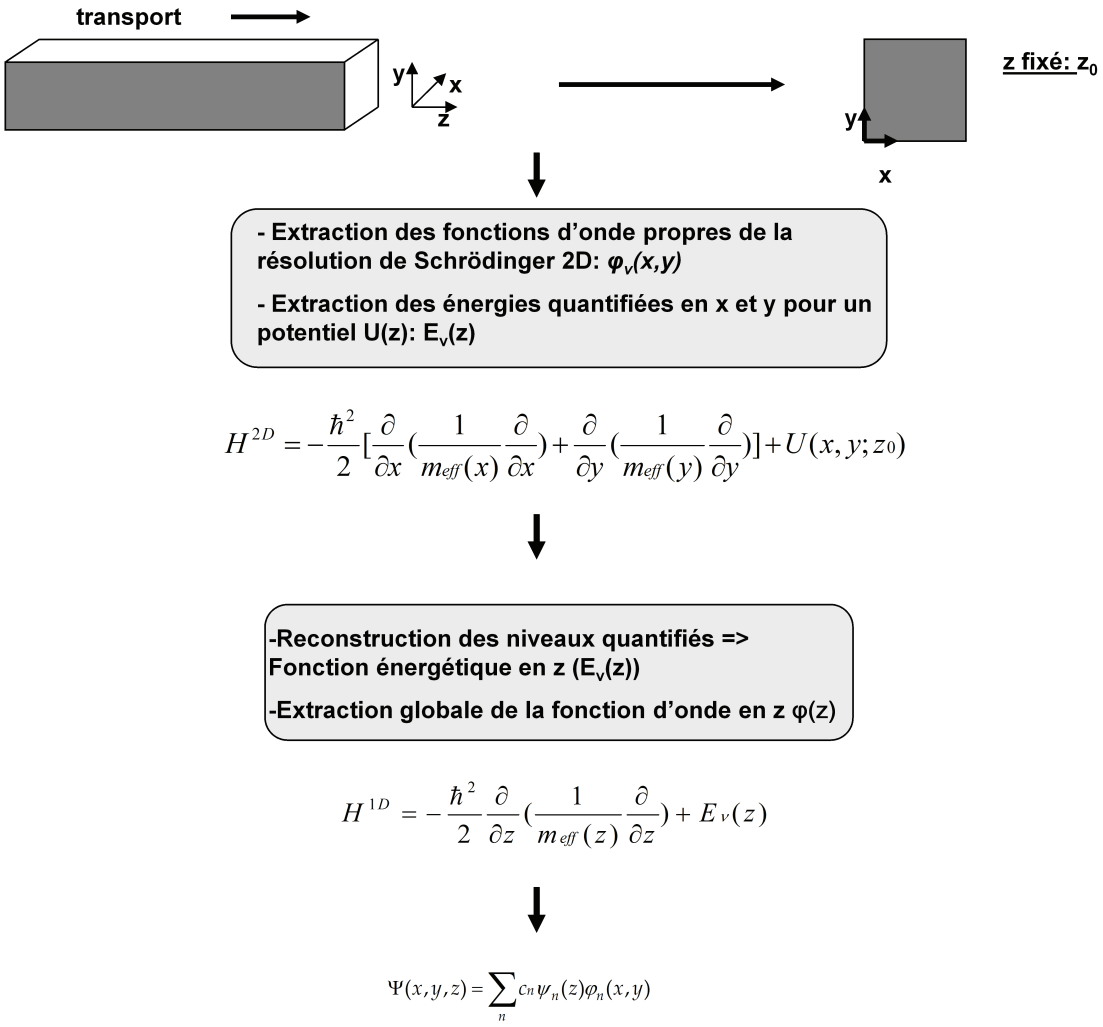


FIGURE 1.1: Principe général pour la résolution de Schrödinger 3D dans le cas d'un dispositif 1D par l'approche Mode space.

D'un point de vue numérique, la résolution de Schrödinger se base sur une décomposition des dimensions de l'espace aussi bien dans l'approche "Real Space" que "Mode Space". Pour cela, une discrétisation est faite suivant la dimension géométrique concernée ("x"). L'équation de Schrödinger 1D devient alors au point de maille i :

$$-\frac{\hbar^2}{2}[\frac{2(\psi_{i+1}-\psi_i)}{m_i x_i(x_i+x_{i-i})} - \frac{2(\psi_i-\psi_{i-1})}{m_{i-1}x_{i-1}(x_i+x_{i-i})}] + V_i\psi_i = E_i\psi_i \tag{1.24}$$

L'hamiltonien H devient alors une matrice NxN. Après quelques opérations matricielles explicitées dans les références [Mun08] [Tan90], nous pouvons extraire les fonctions d'onde propres ψ du système.

1.4 Neutralité électronique - Couplage avec Poisson

Nous avons vu dans la section précédente la résolution de l'équation de Schrödinger donnant, en sortie, la fonction d'onde et les niveaux énergétiques du système. Nous pouvons alors extraire les principaux paramètres et notamment la variation de la charge dans la zone active. Cela est fait à partir de tensions appliquées (tension de grille et de drain) qui imposent une forme de potentiel. Cependant, la variation de la charge affecte le potentiel dans la couche concernée qui impacte alors, à son tour, la résolution de l'équation de Schrödinger. Une résolution cohérente des équations de Poisson et de Schrödinger doit donc être faite pour s'assurer de la cohérence du système entre charges et potentiel.

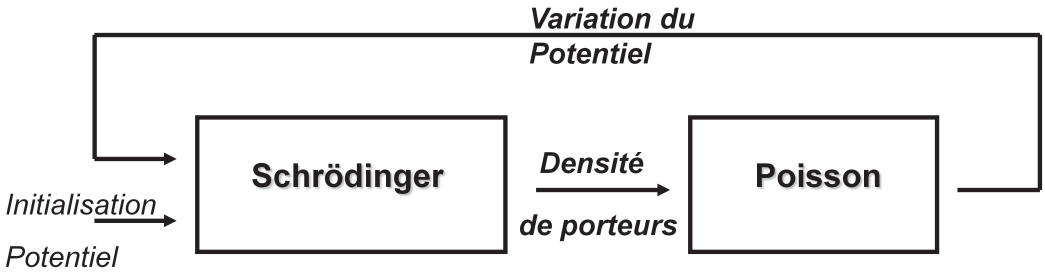


FIGURE 1.2: Principe de résolution numérique auto-cohérente des équations de Schrödinger et de Poisson

Le point critique de cette résolution reste l'initialisation de la boucle où une estimation de la forme du potentiel doit être trouvée. Ainsi pour une meilleur stabilité du calcul, il est préférable d'effectuer une recherche des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde (résolution de Schrödinger) à partir d'un profil de potentiel assez proche de la réalité afin d'aider à la convergence du système.

De nombreuses études de dispositifs planaires ont utilisé l'*approximation du puits triangulaire* pour évaluer la forme du potentiel. Dans la configuration où la courbure de bande n'est pas importante (charge d'inversion faible), celle-ci peut être approximée par une droite formant alors un triangle avec l'interface [Ste74] [Van94]. Toutefois, d'autres profils peuvent être employés comme pour les travaux de Rana et al [Ran96] où le potentiel prenait la forme :

$$V(x) = A.exp(-\frac{x}{\alpha l_D}) + B.exp(-\frac{x}{\beta l_D}) \tag{1.25}$$

où A, B, α et β sont des paramètres dépendants du champ électrique appliqué et l_D est la longueur de Debye. Cependant, cette expression n'est valable que pour un système 1D ce qui n'est pas approprié dans le cas du nanofil.

Autres solutions : modèles phénoménologiques

D'autres équipes de recherche ont developpé de nouvelles approches pour prendre en compte les effets de confinement quantique à partir de modèles phénoménologiques. Ces modèles sont basés sur une approche classique mais possèdent un terme de correction quantique.

Modèle de Hänsch

Les effets de confinement quantique se caractérisent par deux aspects : la quantification énergétique et la répartition des porteurs sous l'interface. Le modèle de Hänsch considère seulement le second aspect. Il introduit une fonction enveloppe analytique sur la densité d'états dans le sens transverse au transport [Han89]. La densité d'états 3D devient alors fonction de la profondeur (z) avec une valeur nulle à l'interface :

$$N_C(z) = N_C[1 - exp(-\frac{z^2}{\lambda^2})] \tag{1.26}$$

Le paramètre λ déterminera le déplacement de la densité moyenne des porteurs près de l'interface. Ce paramètre est considéré comme ajustable dans les simulateurs commerciaux.

Toutefois, ce modèle est loin d'être parfait. Outre le fait qu'il ne considère pas la quantification énergétique, le paramètre λ devrait dépendre fortement du champ transverse (plus le champ est fort, plus le pic de concentration se rapproche de l'interface), ce qui n'est pas le cas.

Modèle de Van Dort

Dans ce modèle, toutes les caractéristiques de confinement quantique sont prises en compte. Dans ce cas, la valeur de la capacité d'oxyde est modifiée introduisant la zone de désertion (Δz) à l'interface due aux effets de confinement quantiques. Une épaisseur d'oxyde équivalente peut être exprimée :

$$t_{ox}^{eq} = t_{ox} + \frac{\epsilon_{ox}.\Delta z}{\epsilon_{SC}} \tag{1.27}$$

Par conséquent, le potentiel de surface va être modifié puisqu'il faut lui ajouter la contribution de la zone de déplétion ($F_S.\Delta$z ; F_S étant le champ électrique de cette zone).

De plus, afin de prendre en compte la quantification énergétique des porteurs, un terme

$\Delta\varepsilon$ est ajouté à l'expression du potentiel représentant la valeur du premier niveau quantifié au dessus de la bande de conduction. Finalement, on peut écrire le potentiel incluant les effets ondulatoires des porteurs comme :

$$V_{tot} = V_{class} + \frac{\Delta\varepsilon}{e} + E_S \Delta z \tag{1.28}$$

L'objectif est maintenant de résoudre l'équation de Schrödinger afin de déterminer une expression analytique de $\Delta\varepsilon$ et de Δz. Pour cela, Van Dort et al utilise l'approximation du puits triangulaire. Les différentes expressions sont exprimées dans [Van94].

Conclusion

La connaissance de la structure de bandes d'un matériau est à la base de toutes les études. Elle regroupe l'ensemble des propriétés qui peuvent être par la suite exploitées pour différentes applications. Cependant, la théorie générale du problème à N corps est trop complexe pour être explicitée de façon brute. Différentes approches ont donc été développées afin de simplifier le problème notamment autour de la notion de fonction d'onde mono-électronique. La complexité numérique de ces approches est très variable et le choix qui doit être fait dépendra des attentes de chacun. Il en est de même pour la neutralité électronique. Le couplage entre les effets de confinement quantique (Schrödinger) et leur impact sur le potentiel local (Poisson) peut être abordé de diverses manières. Il est alors possible de faire une résolution fine des deux équations de façon auto-cohérente jusqu'à des modèles phénoménologiques simples qui tendent juste à corriger les grandeurs physiques telles que la concentration de porteurs incluant les effets de confinement.
Dans le chapitre suivant, nous verrons que le vaste choix de méthodes de simulation peut s'appliquer également à l'étude du transport électronique dans un matériau soumis à un champ électrique extérieur. La structure électronique y est directement impliquée. Il est donc important de s'assurer de la pertinence des approches choisies aussi bien pour la structure de bandes que pour le transport.

Chapitre 2

Modélisation du transport électronique : du classique au quantique...

Sommaire

2.1 Formalismes mathématiques pour le transport 36
2.1.1 Equation de Liouville - Von Neumann 36
2.1.2 Equation de Wigner 37
2.1.3 Équation de Boltzmann 38
2.2 Approches Macroscopiques 39
2.3 Approches Microscopiques 44
2.3.1 Résolution Déterministe 44
2.3.2 Résolution Particulaire (Monte Carlo). 45
2.4 Approche Matricielle 47
2.5 Approche compacte 49

Depuis plusieurs années, la modélisation du transport électronique a été basée sur une approche classique et globale. L'approche convenait totalement puisque les résultats étaient en accord avec les données expérimentales du fait des grandes dimensions des systèmes. Cependant, la réduction des dimensions nécessite désormais une description du transport électronique incluant des effets émergeants jusqu'alors négligés. Liu [Liu90] a exprimé le principe d'incertitude d'Heisenberg [Coh95] à travers l'expression d'une valeur limite de concentration de porteurs à ne pas dépasser pour assurer la validité des équations

de transport classique :

$$n_{lim}^{-\frac{1}{3}} = \frac{4\pi\lambda}{3} \tag{2.1}$$

où λ est la longueur d'onde des porteurs.

Ainsi, en réduisant les dimensions géométriques, on impose des bornes à la valeur de cette longueur d'onde, ce qui limite notre capacité à doper le système. Sachant qu'actuellement les technologies émergentes sont non dopées ($10^{15} cm^{-3}$), la longueur limite du canal à ne pas franchir est de 28nm. Au regard des recommandations de l'ITRS (longueur bien en deçà), la validité des hypothèses classiques n'est plus vérifiée, le transport devient quantique.

Afin de modéliser le transport quantique, différentes approches peuvent être employées [Ryn08]. Tout d'abord, les approches macroscopiques qui prennent en compte l'incertitude quantique d'une particule et qui l'appliquent à tout le système à travers des fonctions statistiques (fonctions de distribution de type Fermi par exemple). La deuxième approche est une approche microscopique s'attachant à la trajectoire exacte de quelques particules extrayant ainsi la fonction de distribution du système et tous les paramètres macroscopiques qui en découlent. Ensuite, une approche matricielle, dite *"NEGF"* (Non-Equilibrium Green Function), étudie le système à travers un formalisme plus mathématique où des hamiltoniens plus complexes peuvent être traités par l'utilisation de matrice. Enfin, une dernière approche, dite "compacte", est particulièrement dédiée aux études au niveau circuit. Moins physique mais plus rapide, elle doit être calibrée puis validée par les autres approches plus amonts pour être pertinente. Dans cette partie, nous verrons les avantages de chacune de ces approches et les différents modèles de simulation qui en sont issus.

2.1 Formalismes mathématiques pour le transport

2.1.1 Equation de Liouville - Von Neumann

Si nous sommes intéressés par l'évolution d'un électron sous l'influence d'un champ électrique, alors la résolution de l'équation de Schrödinger est suffisante. Seulement pour extraire la notion de transport d'un système macroscopique, il est indispensable d'évaluer les fonctions d'onde de chaque électron ce qui devient trop coûteux en temps de calcul. Nous avons alors recourt à la notion de *matrice densité* ρ qui allie la notion d'incertitude quantique d'une particule (comme Schrödinger) et la notion de distribution statistique des

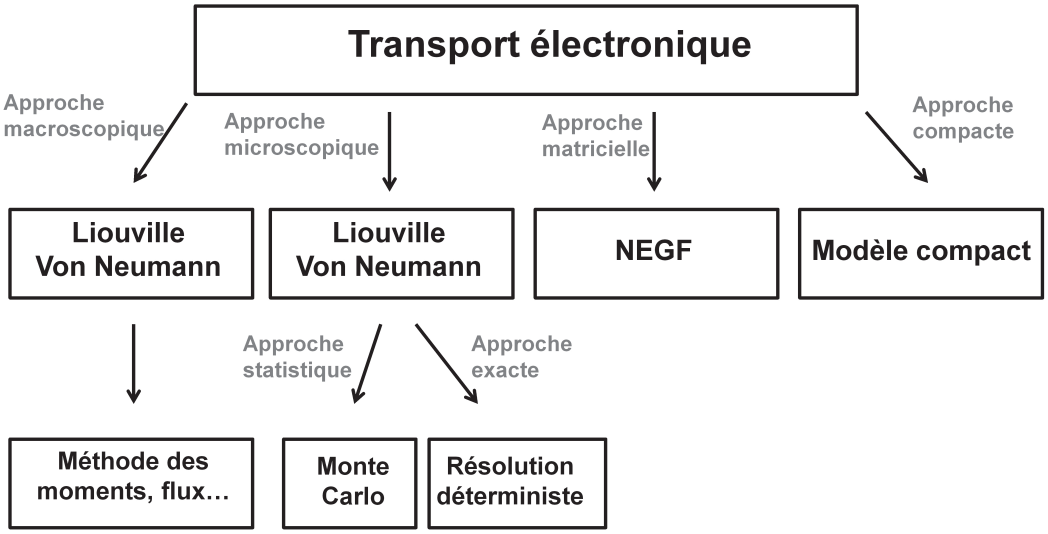


FIGURE 2.1: Différentes approches afin de simuler le transport électronique

porteurs. Une explication complète est fournie dans [Coh95] concernant la matrice densité.

L'évolution dans le temps de ce nouvel opérateur ρ peut s'écrire :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] \tag{2.2}$$

où [,] est l'opérateur "commutation" et H est l'hamiltonien défini dans le chapitre 1.

Cette équation, appelée *équation de Liouville - Von Neumanm*, est l'équation régissant le transport à partir d'une approche physique. C'est à partir de celle-ci et avec de nombreuses approximations, que l'on tire la fameuse équation de transport de Boltzmann (pour le cas classique) et l'équation de transport de Wigner (pour le cas quantique).

2.1.2 Equation de Wigner

Commençons par développer l'équation de Liouville - Von Neumann en 1D pour deux états x et x'.

$$i\hbar\frac{d\rho(x,x',t)}{dt} = [H(x)\rho(x,x',t) - \rho(x,x',t)H(x')] \tag{2.3}$$

Dans le cas d'une approche semi-empirique, l'hamiltonien peut être décrit explicitement (cf eq 1.5).

$$i\hbar\frac{d\rho(x,x',t)}{dt} = [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)]\rho(x,x',t) - \rho(x,x',t)[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V(x')] \tag{2.4}$$

$$i\hbar\frac{d\rho(x,x',t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2}]\rho(x,x',t) + [V(x) - V(x')]\rho(x,x',t) \tag{2.5}$$

Dans le but de retrouver des propriétés similaires à la fonction d'onde, il convient d'exprimer l'équation de Liouville-Von Neumann en terme de deux variables : la variable position 'r' et la variable moment 'k'. Ceci est possible en utilisant le transformation de Wigner-Weyl qui transforme l'opérateur densité en fonction de distribution de Wigner $f_w(r,k,t)$. Cette transformation consiste en un changement de coordonnées suivi d'une transformée de Fourier de la matrice densité.

$$r = \frac{1}{2}(x + x'); \qquad z = x - x' \tag{2.6}$$

L'équation 2.5 devient alors :

$$i\hbar\frac{d\rho(r,z)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}[(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial z})^2-(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\partial}{\partial z})^2]\rho(r,z)+[V(r+\frac{z}{2})-V(r-\frac{z}{2})]\rho(r,z) \tag{2.7}$$

La fonction de distribution de Wigner, définie comme la transformée de Fourier de la matrice densité, s'exprime par :

$$f_w(r,k,t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int \rho(r+\frac{z}{2}, r-\frac{z}{2}, t).exp(-ikz).dz \tag{2.8}$$

Ainsi, en appliquant la transformée de Fourier à l'équation de Liouville-Von Neumann et en ajoutant le terme de collision, nous obtenons l'équation de transport de Wigner :

$$\frac{\partial f_w(r,k,t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m}\frac{\partial f_w(r,k,t)}{\partial r} + \theta(f_w(r,k,t)) = [\frac{\partial f_w(r,k,t)}{\partial t}]_{coll} \tag{2.9}$$

où

$$\theta(f_w(r,k,t)) = -i\int V_w(r,k-k')f_w(r,k',t)dk' \tag{2.10}$$

est le terme quantique appelé "potentiel quantique de Wigner".

Bien qu'une interprétation physique de la fonction de distribution de Wigner soit difficile, ses propriétés ont l'avantage de garder les propriétés quantiques de la matrice densité. Ainsi, cette fonction de distribution peut présenter des parties négatives qui caractérisent les effets d'interférences quantiques. Cette équation est à l'origine de tous les modèles dits "quantiques" pour la modélisation du transport.

2.1.3 Équation de Boltzmann

L'équation de transport de Boltzmann est issue du même raisonnement mathématique que celui présenté précédemment incluant en plus des hypothèses afin de supprimer tous les effets quantiques. Ainsi, l'effet ondulatoire des porteurs est supprimé et l'incertitude

quant à la position n'est pas prise en compte. Nous obtenons alors une équation similaire à l'équation de Wigner où le terme quantique est fortement simplifié :

$$\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m}\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial r} + \frac{e}{\hbar}\frac{\partial V}{\partial r}\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial k} = [\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t}]_{coll} \tag{2.11}$$

Cette équation, appelée équation de transport de Boltzmann (ETB), est une équation de transport semi-classique et constituera la base pour tous les modèles dans cette configuration. Ses limitations sont les suivantes :

- La mécanique classique (loi de Newton) décrit les trajectoires entre les collisions.
- Les collisions sont binaires (un électron avec un électron), instantanées et localisées.
- Aucune corrélation entre porteurs puisque nous nous plaçons dans une description à une particule.
- Non respect du principe d'incertitude d'Heisenberg.

2.2 Approches Macroscopiques

Cette approche consiste à résoudre de façon globale une équation de transport. Pour cela, certaines méthodes comme celle des moments ou des flux permettent d'extraire les paramètres macroscopiques du système que nous allons définir.

Définition des paramètres macroscopiques du système :

- Concentration de porteurs : $n = \frac{1}{8\pi^3}\int f d^3k$
- Vitesse moyenne : $v_{moy} = \frac{1}{8\pi^3.n}\int v_n.f d^3k$
- Energie moyenne : $w = \frac{1}{8\pi^3.n}\int E.f d^3k$
- Flux d'énergie : $S = \frac{1}{8\pi^3.n}\int v_n.E.f d^3k$

où v_n est la vitesse de groupe.

Dans la suite, nous allons expliciter la méthode des moments appliquée à l'équation de transport de Boltzmann afin de lister les modèles de transport classique. Les modèles de transport quantiques sont issus du même formalisme mais basés sur l'équation de Wigner.

Transport Classique

Pour relier les paramètres macroscopiques entre eux, nous allons intégrer l'ETB à différents ordres (méthode des moments). Dans notre cas, l'intégration se fera à l'ordre 0, 1 et 2 correspondant à l'intégration sur l'espace des phases de 1, v_n et ε respectivement

(appelé θ dans la suite).

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\theta\rangle + \bigtriangledown_r\langle v_n\theta\rangle + \frac{e}{\hbar}.\frac{\partial V}{\partial r}.\bigtriangledown_k\langle\theta\rangle = -\langle\frac{\partial}{\partial t}\theta\rangle_{coll} \tag{2.12}$$

où $\langle\theta\rangle = \frac{2}{(2\pi)^3}\int f.\theta.d^3k$

Ainsi, nous obtenons un système d'équations :

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \bigtriangledown_r(n.v_{moy}) = -R_{net} \qquad (ordre0; \theta = 1) \tag{2.13}$$

(R_{net} est le coefficient de génération recombinaison étant l'intégrale du terme de collision)

$$\frac{\partial}{\partial t}(n.v_{moy}) + \frac{2}{3m}\bigtriangledown_r(n.w) + \frac{F}{m}n = -\frac{n(v_{moy} - v_{moy0})}{\tau_m} \qquad (ordre1; \theta = v_g) \tag{2.14}$$

(τ_m étant le temps de relaxation en moment)

$$\frac{\partial}{\partial t}(n.w) + \bigtriangledown_r(n.S) - F.n.v_{moy} = -n\frac{w - w_0}{\tau_\varepsilon} \qquad (ordre2; \theta = E) \tag{2.15}$$

(τ_ε étant le temps de relaxation en énergie)

Modèle Dérive-Diffusion. Le modèle Derive-Diffusion (DD) rassemble l'intégration de l'ETB d'ordre 0 et 1. Il faut donc fermer le système d'équations à l'ordre 2, c'est-à-dire imposer une condition sur l'énergie. Dans ce modèle-ci, nous considèrerons que la température des électrons est égale à la température du réseau. L'énergie est donc constante et vaut :

$$w = \frac{3}{2}k_BT \tag{2.16}$$

En multipliant par la charge élémentaire e, nous obtenons les deux équations régissant le transport du modèle Dérive-Diffusion :

$$\begin{cases} e.\frac{\partial}{\partial t}n + \bigtriangledown_r(J_n) = -e.R_{net} \\ J_n = e.D_n.\bigtriangledown_r n + e.n.\mu_n.E \end{cases} \tag{2.17}$$

où μ_n est la mobilité des électrons ($\mu_n = \frac{e.\tau_m}{m}$) et D_n est le coefficient de diffusion ($\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_B.T}{e}$).

Les hypothèses du modèle Dérive-Diffusion sont

- Approximation des bandes paraboliques (approximation de la masse effective)
- La fonction de distribution est une maxwellienne déplacée

- Les temps de relaxation sont constants par rapport à l'énergie
- L'énergie moyenne néglige la partie de conduction (uniquement énergie thermique)
- La variation temporelle de la densité de courant est négligée
- La température des électrons est égale à celle du réseau (relation de fermeture)

Modèle HydroDynamique/Energie Balance. Dans le cas du modèle HydroDynamique (HD), la fermeture se fait à un ordre supplémentaire par rapport au modèle Dérive-Diffusion, c'est-à-dire à l'ordre 3. La relation de fermeture porte donc sur le flux énergétique qui sera exprimé par Gritsch [Gri02] :

$$n.S = -\frac{5.k_B.T_n}{2.e}J_n + n.Q \tag{2.18}$$

où Q est le flux de chaleur exprimé par la loi de Fourier et la loi de Wiedermann-Frantz [Blo70].

Ainsi, le modèle HD peut se synthétiser par le système d'équations :

$$\begin{cases} q.\frac{\partial}{\partial t}n + \bigtriangledown_r(J_n) = -e.R_{net} \\ J_n = \mu_n.k_B.[\bigtriangledown_r(n.T_n) + \frac{e}{k_B}.E.n] - \tau_m.\frac{\partial J_n}{\partial t} \\ \frac{3.k_B}{2}\frac{\partial(n.T_n)}{\partial t} + \bigtriangledown_r(n.S) - E.J_n = -\frac{3.k_B}{2}\frac{T_n - T_L}{\tau_\varepsilon} \end{cases} \tag{2.19}$$

où T_n est la température des électrons et T_L est la température du réseau.

Les hypothèses du modèle HydroDynamique sont :

- Approximation des bandes paraboliques
- La fonction de distribution est une maxwellienne déplacée
- Les temps de relaxation sont constants par rapport à l'énergie
- L'énergie moyenne néglige la partie de conduction (uniquement énergie thermique)
- La variation temporelle de la densité de courant est négligée
- La température des électrons n'est pas égale à celle du réseau
- La partie diffusive du flux d'énergie est exprimée par la loi de Fourier et la loi de Wiedermann-Frantz (relation de fermeture)

Le modèle *Energie Balance* est une variante du modèle HydroDynamique issue de la méthode de R. Stratton qui considère une relation entre le temps de relaxation et l'énergie. Le développement mathématique de ce modèle est explicité dans [Apa94]. Le nouveau système pour ce modèle est :

$$\begin{cases} e.\frac{\partial}{\partial t}n + \bigtriangledown_r(J_n) = -e.R_{net} \\ J_n = \mu_n[k_B.(T_n.\bigtriangledown_r(n) + n.\bigtriangledown_r(T_n)(1+\nu_n)) + e.E.n] \\ \frac{3.k_B}{2}\frac{\partial(n.T_n)}{\partial t} + \bigtriangledown_r(n.S) - E.J_n = -\frac{3.k_B}{2}\frac{T_n - T_L}{\tau_\varepsilon} \end{cases} \tag{2.20}$$

où ν_n est un terme correctif qui traduit la dépendance en température du paramètre mobilité.

$$\nu_n = \frac{T_n.\bigtriangledown_r(\mu_n)}{\mu_n.\bigtriangledown_r(T_n)} \tag{2.21}$$

Notions quantiques : de la correction au transpor Quantique.

La notion de transport quantique est assez vaste puisque nous distinguons deux aspects d'effets quantiques : les effets quantiques électrostatiques (répartition des porteurs et quantification énergétique) et le véritable transport quantique (transport multi sous-bandes ou tunnel). Ainsi, certains modèles se limitent juste à incorporer les effets quantiques électrostatiques dans leur modèle de courant par une simple correction des paramètres macroscopiques.

Modèle Density Gradient. Ce modèle consiste à corriger le potentiel classique par un potentiel de correction quantique et à le réinjecter dans les équations de transport usuelles. Ainsi, le potentiel peut s'écrire respectivement pour les électrons (n) et pour les trous (p) :

$$V_n = V_{class} + V_{quan} \quad avec \quad V_{quan} = \alpha_n.(\frac{\bigtriangledown^2\sqrt{n}}{\sqrt{n}}) \tag{2.22}$$

$$V_p = V_{class} + V_{quan} \quad avec \quad V_{quan} = \alpha_p.(\frac{\bigtriangledown^2\sqrt{n}}{\sqrt{n}}) \tag{2.23}$$

α_n étant une constante dont l'expression est un peu controversée suivant les approches employées.

Tout d'abord, en appliquant la méthode des moments à l'équation de transport de Wigner (à l'instar du modèle dérive diffusion), il nous est possible de déterminer ce paramètre [Wet01].

$$\alpha_n = -\frac{\gamma.\hbar^2}{6m_{DOS}} \tag{2.24}$$

Dans le cas d'un conducteur multi-vallée, nous ne pouvons prévoir exactement la masse effective à prendre en compte. Pour cela, nous utiliserons la masse de densité d'états et nous gérerons le problème grâce au paramètre γ.
Deuxièmement, la formulation de Bohm de la mécanique quantique permet également

d'extraire ce potentiel de correction quantique. Le descriptif mathématique de cette formulation est donné dans [Boh52]. L'expression du paramètre α est alors :

$$\alpha_n = -\frac{\hbar^2}{2m_{eff}} \tag{2.25}$$

La dernière approche reste celle développée par Ancona [Anc89] qui a utilisé une approche microscopique pour déterminer son paramètre α. L'expression devient :

$$\alpha_n = -\frac{\hbar^2}{12m_{DOS}} \tag{2.26}$$

La différence observée par rapport à Wettstein [Wet01] est due aux approximations faites dans le développement mathématique.

Les simulateurs commerciaux de type TCAD utilisent généralement, dans leur modèle Density-Gradient, l'expression de Wettstein utilisant le paramètre γ comme paramètre de calibration. Cette calibration est généralement faite par comparaison à des résolutions Poisson-Schrödinger. Ce modèle de transport avec corrections quantiques est le plus utilisé en TCAD bien que peu physique puisqu'il modifie juste le potentiel de façon mécanique sans aucune notion de fonctions d'onde ni de niveaux d'énergie.

Résolution du système Poisson-Schrödinger couplé avec les équations de transport Dérive-Diffusion. Cette solution consiste en une résolution numérique du système Poisson-Schrödinger couplé avec l'équation de transport de dérive-Diffusion. Ainsi, nous pouvons inclure dans le formalisme classique de Boltzmann les effets quantiques dits électrostatiques (répartition des porteurs et quantification énergétique). Pour cela, les équations de Poisson, Schrödinger et de continuité sont résolues de façon cohérente par la méthode des différences finies qui contient le canal, les régions source et drain, les couches d'oxyde et les électrodes de grille du nanocomposant [Mun08]. Cependant, à l'instar du modèle Density-Gradient, il s'agit d'une correction quantique du potentiel calculé proprement avec la résolution de l'équation de Schrödinger.

Résolution de l'équation de Wigner par la méthode des moments. L'approche macroscopique la plus physique reste la résolution de l'équation de Wigner. Ainsi, l'application de la méthode des moments à cette équation permet d'extraire de nouvelles équations incluant le transport quantique. Comme dans le cas classique, nous pouvons distinguer deux modèles (Dérive Diffusion Quantique et HydroDynamique Quantique) avec les mêmes hypothèses. Les trois premiers moments de l'équation de Wigner sont [Coh95]

(pour un transport suivant l'axe z) :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}n + \bigtriangledown_r(n.v_{moy}) = -R_{net} \\ m.\frac{\partial v_{moy}}{\partial t} - \bigtriangledown_r(2n.w + \frac{\hbar^2}{4m}\frac{\partial^2 n}{\partial z^2}) + e.E.n = (m.\frac{\partial v_{moy}}{\partial t})_{coll} \\ \frac{\partial}{\partial t}(w.n + \frac{\hbar^2}{4m}\frac{\partial^2 n}{\partial z^2}) + \bigtriangledown_r(n.S) + e.E.v_{moy} = (\frac{\partial}{\partial t}(w.n + \frac{\hbar^2}{4m}\frac{\partial^2 n}{\partial z^2}))_{coll} \end{cases} \tag{2.27}$$

Ainsi, en gardant uniquement les deux premiers moments et en appliquant la relation de fermeture, on retrouve le modèle Density-Gradient [Wet01]. Par contre, les trois premiers moments permettent de limiter les approximations et de tendre vers une simulation plus physique incluant les effets non stationnaires. (Les hypothèses sont les mêmes que pour le modèle HD).

2.3 Approches Microscopiques

L'approche faite par la méthode des moments est une approche très efficace puisqu'elle mène à des équations de transport relativement simples à implémenter. Cependant, elle introduit de nombreuses approximations et hypothèses qui limitent la signification physique de cette méthode. Une étude exacte de la trajectoire au niveau de la particule (microscopique) est nécessaire pour s'affranchir de toutes les approximations précédentes.

2.3.1 Résolution Déterministe

La résolution déterministe d'une équation de transport consiste à résoudre de façon numérique une équation sans approximations (un peu comme si nous considérions tous les ordres de la méthode des moments). Pour cela, la résolution se fait généralement par discrétisation suivant l'axe de transport. Cette méthode est donc bien adaptée pour les dispositifs 1D mais devient complexe numériquement si nous voulons traiter des cas à plusieurs dimensions. De plus, afin de simplifier le calcul, les équations résolues sont souvent les équations de transport stationnaire ce qui exclut tout effets non stationnaires de cette méthode.

Nous citons ici deux approches afin de traiter le transport quantique : la résolution couplée de Boltzmann et Schrödinger, et la résolution de l'équation de Wigner. Nous avons vu dans le chapitre 1 comment extraire la fonction d'onde suivant toutes les directions de l'espace. A l'issue de la résolution de l'équation de Schrödinger dans le sens du confinement, nous avons pu extraire les fonctions énergétiques dans le sens du transport. Ce sont donc ces énergies que nous réinjectons dans les équations de transport.

Résolution déterministe de l'équation de Boltzmann. A l'instar du couplage de Schrödinger avec les équations de dérive-diffusion, cette méthode permet d'insérer les effets quantiques électrostatiques (répartition des porteurs et quantification énergétique) dans un formalisme de transport classique. Scaldaferri et al [Sca07] ont développé un algorithme de résolution basé sur ce couplage pour un transport multi bandes. Après avoir expliqué les différentes problématiques liées à la résolution numérique, ils ont pu montrer l'impact du transport balistique sur des transistors MOSFETs.

Résolution déterministe de l'équation de Wigner. Cette méthode-ci est une des méthodes les plus physiques puisque la résolution se fait sans approximations [Bar09]. Dans ce cas, tous les effets quantiques sont pris en compte ce qui impacte fortement les temps de calcul de cette résolution.

2.3.2 Résolution Particulaire (Monte Carlo).

Les simulations de transport de type Monte Carlo constituent l'outil idéal pour prendre en compte les effets hors d'équilibre. Elles consistent en des "simulations expérimentales" de problèmes mathématiques, dans lesquelles des nombres aléatoires sont utilisés pour trouver une solution proche de la réalité. Bien que gourmandes en temps de calcul, elles permettent tout type de transport (du stationnaire au balistique), mais surtout elles sont adaptées à l'étude des composants à deux (voire trois) dimensions (point limitant pour les résolutions déterministes).

Ainsi, dans un simulateur de transport de type Monte Carlo, on décompose la trajectoire des particules en un grand nombre de séquences aléatoires. Une étude préalable est donc nécessaire pour effectuer ces tirages au sort suivant des lois de probabilité issues d'une fine modélisation physique des matériaux (généralement tabulées). Durant chaque séquence, un porteur suit une trajectoire déterministe, puis subit une collision choisie de façon aléatoire. Sa trajectoire en est alors modifiée et une nouvelle séquence démarre. La simulation d'un grand nombre de particules peut nous donner les valeurs des caractéristiques macro- et microscopiques : courant, fonction de distribution, densité de charges...

L'avantage de cette méthode est que durant le temps de vol libre, nous pouvons appliquer n'importe quelle équation de transport. Ainsi, dans la littérature, nous pouvons trouver du transport classique [Jac83], du transport classique corrigé [Jau06], ou alors les équations de transport de Boltzmann (DD) couplées à une résolution de Schrödinger [Sai06]. Dans ce dernier cas, la résolution est assez complexe et se fait grâce à l'approche "Mode Space" explicitée dans le chapitre 1. Ainsi, afin de couvrir l'aspect 3D du nanodispositif, une résolution de l'équation de Schrödinger est faite dans le sens du confi-

nement puis couplée avec l'équation de Boltzmann dans le sens du transport. Toutefois, nous avons vu précédemment que le couplage Schrödinger/Boltzmann permet d'inclure les effets quantiques électrostatiques (répartition de la charge et quantification énergétique) sans considérer véritablement le transport quantique. Pour cela, une résolution Monte Carlo est faite de façon similaire à [Sai06] sauf que l'équation de transport résolue dans ce cas est celle de Wigner [Que06]. Ci dessous, nous pouvons voir l'organigramme simplifié d'un tel algorithme.

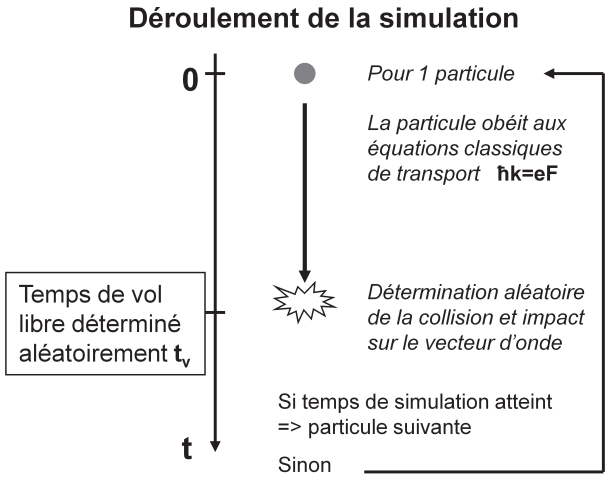


FIGURE 2.2: Organigramme simplifié d'une simulation par Monte Carlo

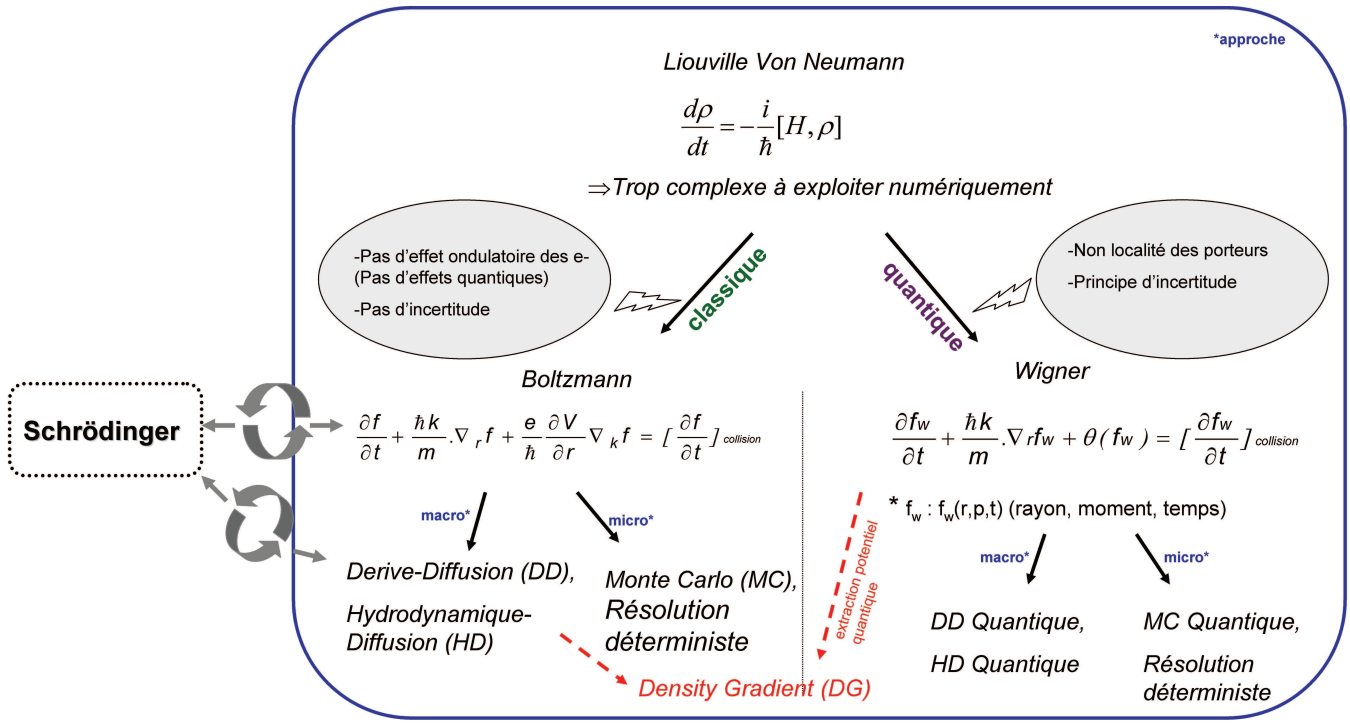


FIGURE 2.3: Arborescence des différents modèles issus de l'équation de Liouville - Von Neumann

2.4 Approche Matricielle

L'approche matricielle dans la résolution du transport électronique consiste à discrétiser les différents couplages du système. La représentation d'un nanodispositif peut donc être schématisée par [Bes04] :

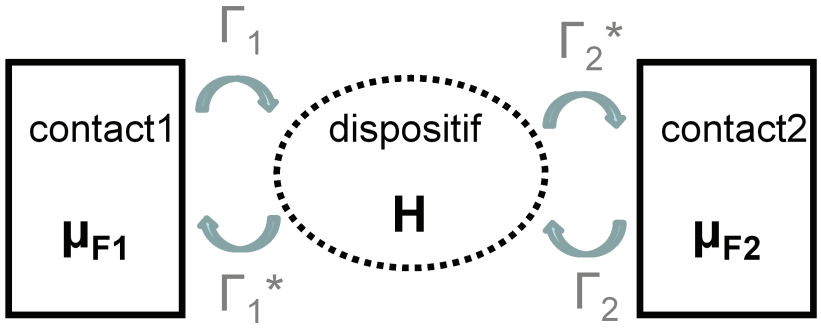


FIGURE 2.4: Représentation schématique d'un nanodispositif

Ainsi, l'effet intrinsèque de chaque élément du dispositif est indépendant de l'effet d'un élément sur l'autre. Ceci est la base pour la modélisation matricielle d'un nanocomposant qui est constitué d'une zone active (S) connectée à deux électrodes (L et R) dont les potentiels électrochimiques sont μ_L et μ_R. La différence entre ces potentiels est à l'origine

du courant généré à travers la zone active.

Formalisme de Landauer

Landauer a été l'un des premiers à modéliser le transport dans des systèmes mésoscopiques. Ainsi, chaque contact envoie un courant partiel dans la zone active. Une partie de ce courant sera transmise à l'autre contact et l'autre sera réfléchie suivant la nature diffusive du conducteur. Cette dernière caractéristique de la zone active est représentée par un coefficient de transmission T [Bes04].

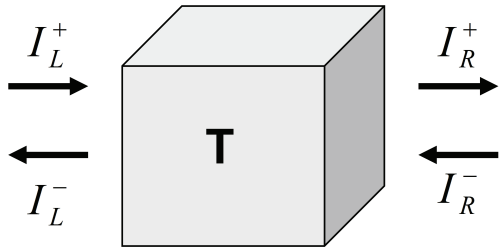


FIGURE 2.5: Bilan des courants traversant un conducteur non-transparent

Les courants injectés dans la zone active peuvent s'exprimer par (pour une seule sous-bande et par unité d'énergie)

$$I_L^+ = -\frac{e}{h} f(E - \mu_L) \tag{2.28}$$

$$I_R^- = \frac{e}{h} f(E - \mu_R) \tag{2.29}$$

où f est la fonction de distribution de Fermi.

Les courants réfléchis peuvent alors s'écrire :

$$I_L^- = (1 - T).I_L^+ + T.I_R^- \tag{2.30}$$

$$I_R^+ = T.I_L^+ + (1 - T).I_R^- \tag{2.31}$$

Le courant total traversant le système vaut alors :

$$I = I_L^+ - I_L^- = I_R^+ - I_R^- \tag{2.32}$$

$$I = -\frac{e}{h} \int T(E)[f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]dE \tag{2.33}$$

L'équation 2.33 est la formule généralisée de Landauer. Il reste maintenant à appréhender le coefficient de transmission à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger du système.

Formalisme des fonctions de Green

Les fonctions de Green sont donc un outil mathématique pour résoudre l'équation différentielle de Schrödinger utilisant l'hamiltonien défini dans le chapitre 1. Elles sont définies comme :

$$G(E) = [EI - H]^{-1} \tag{2.34}$$

où I est la matrice identité.

Cependant, H est une matrice infinie et l'inverser est une opération trop complexe numériquement. Nous décidons alors de restreindre la fonction de Green uniquement à la zone qui nous intéresse H_S (zone active) :

$$G(E) = [EI - H_S - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \tag{2.35}$$

où $\Sigma^{L,R}$ est la matrice Self-énergie représentant l'influence du contact L (R) sur la zone active.

Sommant le courant passant par chaque contact, il est possible d'exprimer le courant total traversant la zone active en fonction des paramètres définis dans le formalisme des fonctions de Green [Bes04] [Dat02] :

$$I = -\frac{e}{h}\int Trace[\Gamma_L G \Gamma_R G^+][f(E-\mu_L) - f(E-\mu_R)]dE \tag{2.36}$$

où Γ représentent la matrice de couplage définie comme :

$$\Gamma_{L(R)} = i[\Sigma_{L(R)} - \Sigma^+_{L(R)}] \tag{2.37}$$

Par analogie avec l'équation du courant issue du formalisme de Landauer (eq 2.33), nous pouvons exprimer le coefficient de transmission comme étant :

$$T(E) = Trace[\Gamma_L G \Gamma_R G^+] \tag{2.38}$$

La résolution du transport basée sur le calcul de la transmission par approche fonction de Green est très utile pour une étude complète, sans limitations grossières, d'un large éventail de systèmes. Ainsi, que l'on soit en matière condensée (MOSFET) ou en physique mésoscopique (SET *Single Electron Transistors* par exemple), toutes les interactions peuvent être considérées par implémentation directe dans l'hamiltonien. Ceci nécessite donc de considérer un hamiltonien réaliste. Pour cela, des simulations atomiques de type *ab initio* sont souvent indispensables.

2.5 Approche compacte

Les méthodes que nous venons de présenter permettent avec plus ou moins de précision de décrire le transport électronique dans les nanocomposants. Cette étape associée à l'étude de la structure de bandes décrite dans le chapitre 1 est indispensable pour la compréhension physique de notre dispositif. Toutefois, la microélectronique a pour but de fournir des circuits tels que les microprocesseurs contenant des milliards de transistors. Toujours dans l'optique d'augmentation des performances, ces circuits doivent être scrupuleusement analysés et optimisés par les concepteurs. Au regard de leur taille, il n'est donc pas envisageable d'utiliser des codes numériques comme ceux présentés ci-dessus dont le temps de calculs est incompatible avec des simulations à l'échelle multi-transistors. C'est pourquoi des modèles dits *compacts* sont nécessaires pour estimer les grandeurs électriques mises en jeu dans le circuit. Le but de cette approche est comme pour les autres méthodes d'exprimer le courant mis en jeu dans le dispositif à travers une expression simple dont le temps de calcul est quasi-instantané. Dans la communauté des modèles compacts, nous pouvons distinguer trois types d'approches.

Modèle en tension de seuil

L'approche en tension de seuil permet de séparer de façon bien distincte le courant en fonction de son régime de fonctionnement : sous le seuil $I_{DS,lin}$ et au delà $I_{DS,sat}$. Sachant que le courant de drain a une composante liée à la diffusion et une autre liée à la conduction, cette approche simplifie le problème en considérant que le mécanisme de transport est essentiellement diffusif sous le seuil et de conduction au dessus du seuil. Le modèle conventionnel utilisant cette approche est BSIM [BSI09] développé par l'université de Berkeley.

$$I_{DS,lin} = \mu.C_{ox}.\frac{W}{L_c}\left(V_{GS} - V_{th} - \frac{1}{2}V_{DS}\right)V_{DS} \tag{2.39}$$

$$I_{DS,sat} = \frac{1}{2}\mu.C_{ox}.\frac{W}{L_c}\left(V_{GS} - V_{th}\right)^2 \tag{2.40}$$

Cependant, le principal inconvénient de cette approche est qu'une fonction de raccord est nécessaire pour rendre continu le courant sur tous les régimes.

Modèle de charge

Les modèles de charge regroupent les modèles basés sur le concept de linéarisation de la charge d'inversion. Cette nouvelle approche a été introduite pour la première fois en 1994 avec le modèle EKV [Enz06] développé à l'EPFL (*Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne*). Elle consiste à linéariser la charge Q_{inv} par rapport au quasi-niveau de Fermi

des porteurs défini aussi comme le potentiel du canal E_F.

$$I_{DS} = -\mu.W.Q_{inv}\frac{dE_F}{dx} \tag{2.41}$$

Bien que l'équation du courant soit valide dans tous les régimes de fonctionnement, des approximations sont émises en amont dans le développement afin de décomposer les régimes d'inversion faible et d'inversion forte. Une fonction de lissage est donc également nécessaire.

Modèle en potentiel de surface

Le modèle en potentiel de surface consiste en une méthode mathématique d'approximation qui sort un potentiel valide dans tous les régimes de fonctionnement avec une précision de l'ordre du nanovolt. Les modèles SP et PSP basés sur cette approche sont les références actuelles en modélisation compacte [Gil04] [Gil06]. Le courant de drain est alors obtenu par résolution de l'équation suivante qui intègre le potentiel de surface entre la source et le drain du transistor.

$$I_{DS} = -\frac{W}{L}\int_{\phi_{s,source}}^{\phi_{s,drain}} \mu.Q_{inv}.d\phi_s \tag{2.42}$$

Toutefois, bien que très précis sur la description de l'électrostatique, le modèle en potentiel de surface rend difficile le couplage avec le transport électronique (mobilité généralement considérée comme constante).

Graphique résumé

Ci-dessous, nous pouvons voir une synthèse de toutes les méthodes de modélisation du transport électronique passés en revue dans ce rapport en fonction de leur précision physique et de leur cout numérique :

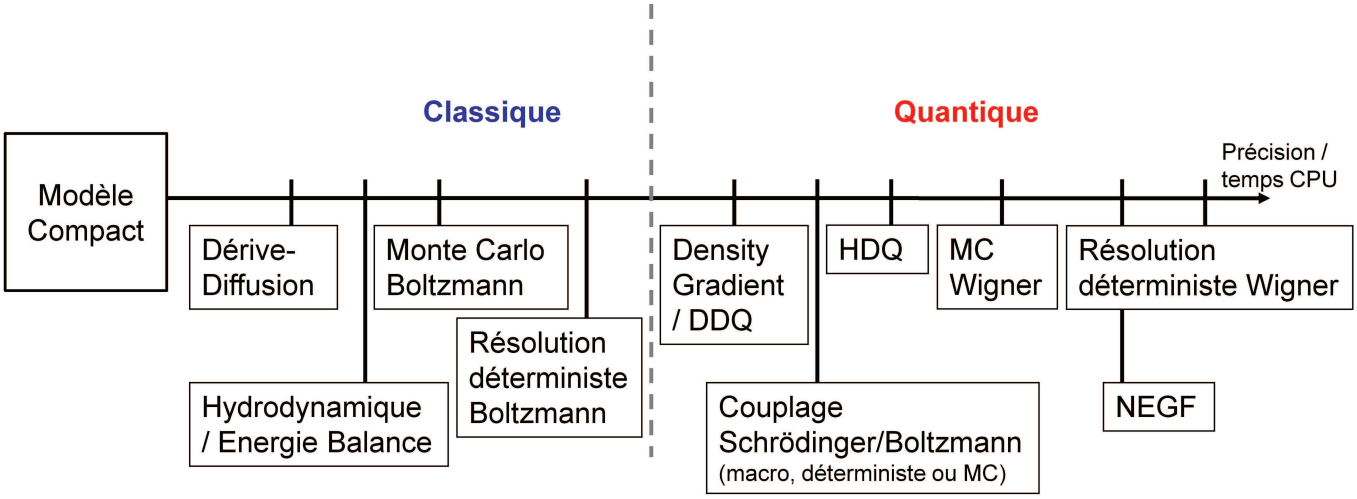


FIGURE 2.6: Récapitulatif des différents modèles pour la simulation du transport électronique en fonction de leur précision physique et de leur coût numérique.

Conclusion de la partie I

Dans cette partie, une vue d'ensemble de la simulation des nanocomposants est proposée pour l'étude de la structure électronique des matériaux et pour le transport. La théorie à N-corps est la base de l'étude des solides puisqu'elle regroupe toutes les caractéristiques d'une particule progressant dans un environnement constitué par un réseau d'atomes et d'autre particules de même nature. Cependant, la complexité du formalisme mathématique rend impossible la résolution de l'équation de Schrödinger de façon brute. Des approximations sont donc appliquées afin de simplifier le problème notamment avec l'approximation de Born-Oppenheimer et la considération d'un système mono-électronique. Toutefois, l'étude d'une seule particule ne suppose pas qu'aucune interaction entre charges ait lieu. Les différentes méthodes de résolution s'intéressent donc à cette problématique. Les méthodes *ab initio* permettent la résolution d'un tel problème en utilisant les lois physiques de base sans postulat additionnel. Cependant, leur investissement numérique ne permet pas d'étudier des gros systèmes. L'intérêt des méthodes semi-empiriques est donc de s'affranchir de cette limitation là puisqu'un hamiltonien modèle est utilisé avec des paramètres ajustés à partir de données expérimentales ou *ab initio*. Bien que moins physique, elles permettent une bonne description de la structure de bandes. Une combinaison de plusieurs approches est donc intéressante à exploiter pour allier précision physique et temps de simulation. La configuration de la simulation du transport électronique pour les nanocomposants est semblable puisque également assez vaste. Initialement focalisée sur du transport dit "classique", le transport concernait uniquement les systèmes de grandes dimensions. Ainsi, les deux modèles qui en sont issus, "dérive-diffusion" ou "Hydrodynamique" (incluant les effets non-stationnaires par rapport au premier), ont été largement utilisés ces dernières décennies. Par la suite, au regard de la réduction des dimensions, il est nécessaire d'adresser le transport dit "quantique". Nous pouvons distinguer deux types d'approches : une modélisation incluant juste les effets quantiques électrostatiques (répulsion des porteurs de l'interface et quantification énergétique) et une modélisation du véritable transport quantique (avec transport tunnel, interférences...). Dans le premier cas, le principe est de coupler les équations de transport classique avec l'équation de Schrödinger. Ainsi, nous pouvons observer l'ajout d'un terme supplémentaire dans les

équations régissant le transport. Toutefois, dans ce type d'approche, il ne s'agit uniquement que d'une correction. Afin de modéliser le transport quantique, il convient d'utiliser une méthode de résolution précise (déterministe ou Monte Carlo) sur une équation fondamentale de transport (Wigner). Les outils numériques sont alors limités et les temps de calcul deviennent beaucoup plus importants. Une autre approche, a priori non adaptée au transport dans les dispositifs de microélectronique (car trop lourde numériquement), a fait son apparition. Il s'agit de la résolution "NEGF" (Non-Equilibrium Green Function) basée sur le formalisme de transmission de Landauer. Les fonctions de Green sont donc un outil mathématique utile dans le but de résoudre des systèmes dont l'hamiltonien associé est plus complexe. Enfin, une dernière approche a été présentée pour compléter le panel d'outil indispensable à la simulation de nanodispositifs. Il s'agit de la modélisation compacte spécialement dédiée à l'étude de circuits, objectif final de l'industrie de la microélectronique. Une modélisation simple mais rapide est donc proposée pour apporter au niveau circuit toute la physique observée au niveau dispositif. Généralement, comme pour l'extraction de la structure de bandes, une combinaison de différentes approches est donc nécessaire afin de mettre en place une étude complète et pertinente.

Nous venons de voir que la modélisation du transport électronique est un sujet vaste englobant une multitude d'approches. Chaque méthode dispose de ses propres caractéristiques et de ses propres approximations. Chacun peut donc s'approprier telle ou telle méthode en fonction de ses besoins et des applications qu'il vise. C'est dans ce contexte là que ce travail s'établit puisque dans les parties suivantes un modèle compacte sera proposé pour le transport électronique dans le nanofil de silicium. Cependant, de nombreuses autres approches seront employées ou développées afin d'étudier et d'inclure dans le modèle les phénomènes physiques ultimes aussi bien pour l'électrostatique (partie II) que pour le transport électronique (Partie III).

Deuxième partie

L'architecture "nanofil" comme solution pour le contrôle électrostatique des composants nanoélectroniques

Dans le domaine de la microélectronique, le transistor MOSFET (Metal - Oxide - Semiconductor Field Effect Transistor) est actuellement le dispositif le plus répandu aussi bien en terme de recherche et développement qu'en terme de production de composants à base de semiconducteurs. L'évolution dans le temps de ses caractéristiques est extrêmement rapide au point que nous assistons à une mutation de son architecture. Le changement est tel que le nanofil semiconducteur est envisagé comme candidat potentiel pour l'avenir du MOSFET.

Dans le premier chapitre de cette partie, nous présenterons tout d'abord le transistor MOSFET dans son fonctionnement le plus basique jusqu'aux problématiques qui se soulèvent aujourd'hui. Nous expliquerons pourquoi l'intérêt qui lui est porté est toujours aussi important et pour ainsi comprendre ce qui a poussé à envisager le nanofil comme solution pour les futurs noeuds technologiques. Dans la deuxième partie, nous rentrerons plus en détails dans les caractéristiques du nanofil de silicium en explicitant des notions plus fondamentales telles que la structure de bande ainsi que le formalisme et les hypothèses utilisés dans la suite de ce travail. Les différentes approches y seront exposées afin de poser le contexte numérique de l'étude : des codes les plus poussés vers des approximations afin d'alléger le temps de calcul. Enfin, la dernière partie se concentrera sur la modélisation analytique de l'électrostatique du nanofil afin de retranscrire toute la physique observée avec des simulations plus avancées. Un modèle de la tension de seuil du transistor MOSFET à nanofil sera présenté incluant les phénomènes physiques ultimes.

Chapitre 3

Le transistor MOSFET comme brique de base de la nanoélectronique

Sommaire

3.1 Introduction au MOSFET 60

3.2 Évolution des noeuds technologiques : vers une miniaturisation agressive 61

3.3 Des effets parasites de plus en plus présents 63

3.4 Émergence de nouvelles architectures 66

L'engouement que nous connaissons actuellement pour le transistor MOSFET (et notamment celui à base de silicium) prend sa source au milieu du 19ème siècle en pleine révolution industrielle. La découverte du silicium par J. Berzellius et sa cristallisation par H. Sainte-Claire Deville marquent les prémisses de la microélectronique telle que nous la côtoyons au quotidien. Cependant, il faut attendre, bien plus tard, les travaux de F. Bloch sur la théorie cohérente de la conduction dans les solides, de N.F. Mott sur la jonction métal-semiconducteur ou encore l'introduction du concept du MOSFET par J.E. Lilienfeld pour se persuader que les semiconducteurs étaient l'avenir de l'électronique. La première réalisation de transistor a eu lieu en 1947 avec l'apparition du transistor bipolaire issu des travaux de J. Bardeen, W. Brattain et W. Schockley. Toutefois, le véritable démarrage de l'industrie dans ce domaine commence avec le dépôt du concept de technologie CMOS (*Complementary Metal-Oxide-Semiconductor*) en 1967 par F. Wanlass.

Nous pourrions nous demander pourquoi cette industrie a connu une telle évolution en seulement quelques décennies. Ceci s'explique en partie par la matière première que nous retrouvons en abondance sur terre. En effet, le silicium représente le deuxième élément (après l'oxygène) de la croute terrestre. Cette abondance couplé au fonctionnement basique du transistor suscite un fort intérêt dans la perspective de nouveaux composants électroniques capables de révolutionner notre quotidien.

3.1 Introduction au MOSFET

Le transistor MOSFET correspond à l'élément élémentaire du circuit intégré de technologie CMOS. Son principe de base repose sur la circulation ou non d'un courant entre deux électrodes appelées "source" et "drain". Il s'agit en fait de régions fortement dopées qui peuvent être modélisées au sein du transistor par deux réservoirs de porteurs. Suivant le type de porteurs, nous pouvons définir deux types de transistor : type n dans le cas d'électrons et type p dans le cas de trous. La zone active (aussi appelée canal) d'un transistor à effet de champ se situe donc entre ces deux régions et est dopée légèrement de façon opposée à la source et au drain. A ce stade là, et du fait de l'opposition des dopages, aucun courant ne circule ce qui définit l'état bloqué du transistor. Le passage du courant va donc être commandé par une troisième électrode appelée "grille". Celle-ci va être à proximité du canal, séparée par une couche diélectrique, afin d'accumuler par effet électrostatique les porteurs minoritaires et créer un canal de conduction entre la source et le drain. Dans un tel cas, le semiconducteur est dans un régime d'inversion et le transistor est dit dans un état passant.

De manière idéale, le transistor fonctionne comme un interrupteur permettant le transfert ou non d'une information via le champ électrique transverse. L'accumulation de porteurs dans le canal par l'application d'un potentiel sur la grille n'est pas aussi binaire que nous souhaiterions. Dans les faits, nous pouvons définir un troisième état intermédiaire du transistor où la polarisation n'est ni nulle afin de bloquer totalement le transistor ni forte pour permettre le passage d'un courant conséquent. Ce dernier régime est appelé régime de déplétion. Les transitions entre régimes sont assurées par des grandeurs électriques. Le passage de l'accumulation à la déplétion se marque par la tension de bandes plates V_{FB} qui correspond à la polarisation qui aligne les bandes des cotés grille et semiconducteur. La transition entre la déplétion et l'inversion est plus arbitraire car moins marquée physiquement. Il s'agit du moment où la concentration de porteurs minoritaires dépasse celle des porteurs majoritaires du substrat. Ce critère là définit la tension de seuil V_{th}. La figure 3.1 synthétise les différents régimes de fonctionnement du transistor MOSFET

en fonction du champ transverse appliqué [Mat04]. Il est important de bien comprendre les différents régimes de fonctionnement du transistor puisqu'ils apparaissent directement sur les caractéristiques en courant du transistor. La figure 3.2 montre qualitativement l'évolution du courant de drain en fonction de la tension de grille.

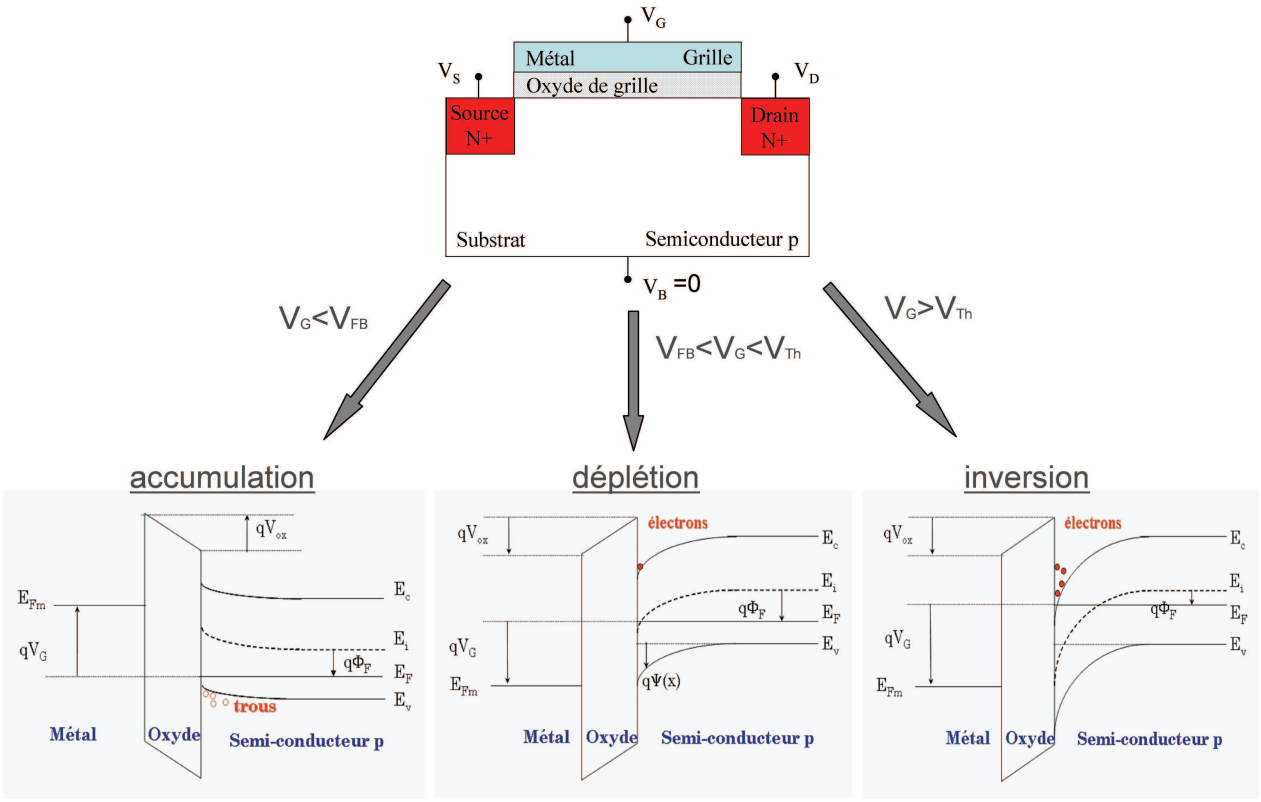


FIGURE 3.1: Représentation schématique du transistor MOSFET de type n et diagrammes de bandes associés à chaque régime en fonction de la polarisation de grille

3.2 Évolution des noeuds technologiques : vers une miniaturisation agressive

Comme nous l'avons dit précédemment, l'industrie de la microélectronique est relativement récente. Mais malgré ceci, l'évolution qu'elle a connu depuis un demi siècle montre un réel intérêt et des enjeux multiples. En effet, afin d'être toujours plus performant, le nombre de transistors n'a cessé de croître dans les dispositifs électroniques. Dès le milieu des années 1960, Gordon Moore de la société Intel a déclaré "Le nombre de transistors des processeurs devrait doubler tous les 18 mois et permettre ainsi une croissance exponentielle régulière des performances". Cette règle plus connue sous le nom de loi de Moore s'est révélée étonnamment exacte dans le temps. Actuellement, les principaux acteurs du

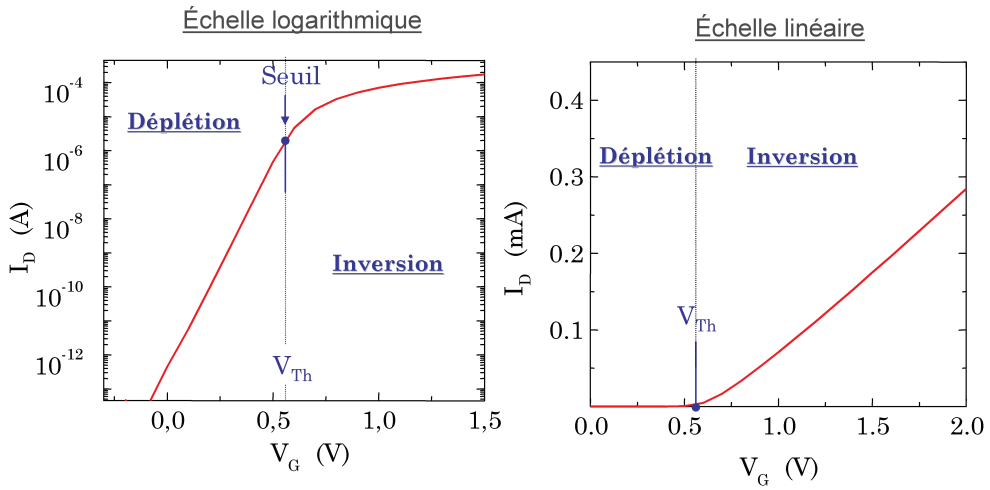


FIGURE 3.2: Caractéristique qualitative $I_D(V_G)$ pour un transistor MOSFET de type n, échelle logarithmique (gauche) et linéaire (droite)

monde du semiconducteur se réunissent tous les deux ans afin de définir l'ITRS (International Technological Roadmap for Semiconductors) [ITR05]. Il s'agit d'une feuille de route stratégique qui définit, pour les quinze prochaines années, les objectifs à atteindre afin de conserver un développement exponentiel.

Les spécifications à atteindre sont classées sous forme de noeuds technologiques. Ils définissent la taille caractéristique d'une génération de composants, souvent donnée par la demi distance minimale entre deux lignes d'interconnexion. La réduction des dimensions géométriques permet non seulement d'augmenter l'intégration des transistors (augmentation du nombre de transistors par puce) mais également d'augmenter les performances. Ainsi, à chaque noeud technologique, l'ensemble des paramètres (géométrie, polarisations...) ainsi que les performances à obtenir sont redéfinis (cf. figure 3.3). Dans les années 70, une règle d'échelle a été introduite par Dennard [Den74] qui consistait à appliquer le même coefficient de réduction aussi bien aux dimensions qu'aux polarisations. Ce principe permettait de passer d'une génération à l'autre en conservant un champ électrique constant. Toutefois, dans les faits, la réduction des transistors doit prendre en compte l'application pour laquelle ils se destinent. En effet, idéalement, un transistor doit avoir un courant de fonctionnement (I_{ON}) fort avec un courant de fuite nul (I_{off} défini à $V_G = 0V$). En pratique, ce n'est pas le cas et un compromis doit être trouvé entre les deux critères. C'est pourquoi nous avons vu apparaître dans les recommandations de l'ITRS deux familles distinctes : Hautes Performances (HP ou High Performances) et Basses Consommations (LP ou Low Power).

	Nœuds technologiques				
	90 nm	65 nm	45 nm	32 nm	22 nm
Production	2004	2007	2010	2013	2016
I_{on} (µA/µm)	1110	1510	1900	2050	2400
I_{off} (nA/µm)	50	70	100	300	500
L_g (nm)	37	25	18	13	9
t_{ox} (nm)	1.2	0.9	0.7	0.6	0.5
V_d (V)	1.2	1.1	1	0.9	0.8

FIGURE 3.3: Évolution des noeuds technologiques selon les spécifications ITRS 2005 pour application HP en architecture "bulk" (silicium massif).

3.3 Des effets parasites de plus en plus présents

Cette réduction incessante des dimensions des transistors n'est pas sans conséquence sur leur fonctionnement. Le fait d'atteindre des dimensions nanométriques induit des effets parasites qui dégradent fortement les performances électriques. Nous allons nous pencher plus en détails sur les principales problématiques sur lesquelles l'industrie de la microélectronique s'est et continue de s'intéresser.

Les effets de canaux courts

Les effets de canaux courts, dits SCE (Short-Channel Effect), constituent l'un des effets parasites les plus prédominants lorsque l'on réduit la longueur de grille. Nous avons vu précédemment que le contrôle électrostatique du canal est effectué par l'électrode de grille. Les barrières de potentiel au niveau des jonctions source et drain sont modulées par la grille. Ces mêmes jonctions n'ont donc aucun effet sur le contrôle électrostatique de la zone active dans le cas d'un canal long. En effet, du fait du dopage opposé entre le canal et les régions d'accès, des zones de désertion se forment au niveau des jonctions mais affectent peu la hauteur de barrière énergétique du canal. Cependant, la réduction de la longueur de grille va engendrer le chevauchement de ces deux zones (coté source et drain) ce qui va perturber fortement l'électrostatique et ainsi affaiblir considérablement le contrôle de la grille sur la zone active. Comme illustré figure 3.4, la principale cause de cet effet est l'abaissement de la barrière énergétique. Ceci a pour conséquence de réduire la tension de seuil du transistor et de dégrader fortement la pente sous le seuil de la caractéristique en courant. Dit simplement, le passage entre l'état bloqué et l'état passant du transistor se fait de manière moins abrupte ce qui va à l'encontre des efforts apportés au développement du MOSFET. Concrètement, bien que le courant de fonctionnement soit augmenté du fait d'un canal plus court, les performance à l'état Off (courant de

fuite) sont largement dégradées. La polarisation de drain accentue le recouvrement des zones de désertion. Ce dernier effet est connu sous le nom de DIBL (Drain Induced Barrier Lowering) [Mat04].

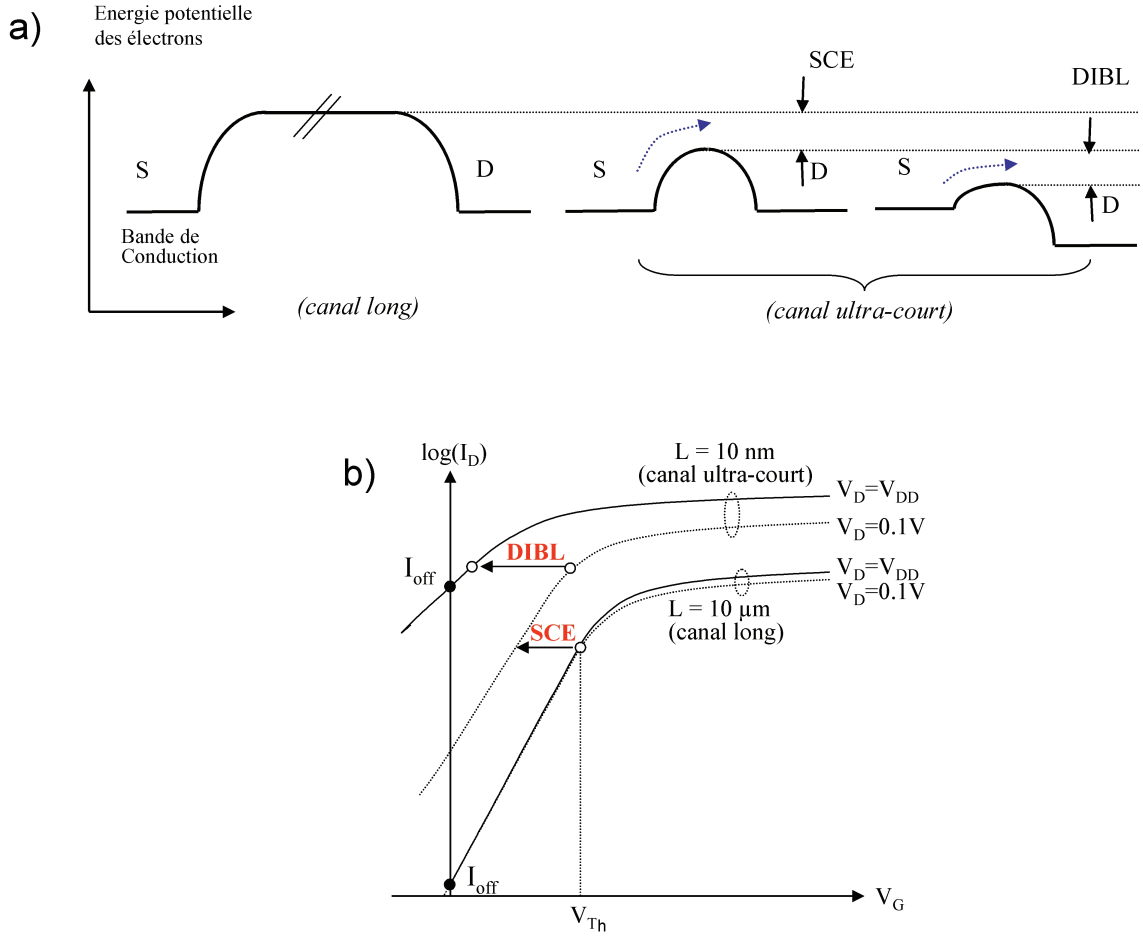


FIGURE 3.4: (a) Schéma de l'évolution de la barrière énergétique dans le canal en fonction de la longueur de grille ; (b) Impact des effets canaux courts sur la caractéristique en courant $I_D(V_G)$ du transistor

Cet effet est purement électrostatique et a des conséquences néfastes sur les performances du transistor. C'est pour cela que la réduction de la longueur de grille s'accompagne d'une diminution de l'épaisseur de l'isolant entre le canal et le métal de grille afin d'améliorer le contrôle électrostatique de la grille sur le canal. Cependant, ceci a deux conséquences principales que nous allons détailler.

Les effets de fuites de grille

Comme nous venons de le dire, la réduction de l'oxyde de grille renforce le couplage capacitif entre la grille et le canal. Historiquement, dans les transistors MOS conventionnels, la silice SiO_2 sert de diélectrique de grille et n'a jamais été remise en cause pour des

épaisseurs supérieures à 2 nm. Toutefois, en deçà de cette valeur, le courant traversant l'oxyde de grille par effet tunnel devient du même ordre de grandeur que le courant de fuite du transistor I_{off}. En dessous de 1 nm (objectif prévu par l'ITRS pour les noeuds technologiques actuels), ce courant devient prépondérant et compromet fortement le fonctionnement du dispositif.
Pour répondre à cette problématique, des solutions technologiques sont envisagées. Par exemple, l'emploi d'oxyde nitruré qui, contrairement à un oxyde pur, présente une permittivité légèrement plus importante. Une oxyde plus épais peut dont être utilisé en gardant le même effet capacitif. Cependant, l'oxyde nitruré ne pourra pas répondre aux spécifications actuelles de l'ITRS. Par conséquent, nous avons vu apparaître l'utilisation d'oxydes à haute permittivité (ou "high-κ"). La nouvelle architecture de l'empilement de grille repose sur une couche interfaciale de silice afin de garder une interface propre avec le canal puis une couche (généralement plus épaisse) d'oxyde high-κ (cf. figure 3.5). Communément, les oxydes à base d'hafnium sont les plus utilisés (HfO_2, $HfSiON$, $Hf_{1-x}Si_xO_2$). Toutefois, un large panel de diélectriques alternatifs a été envisagé ces dernières années [Wil00] [Cal01] [Gus03] [Gil03] [Ber06].

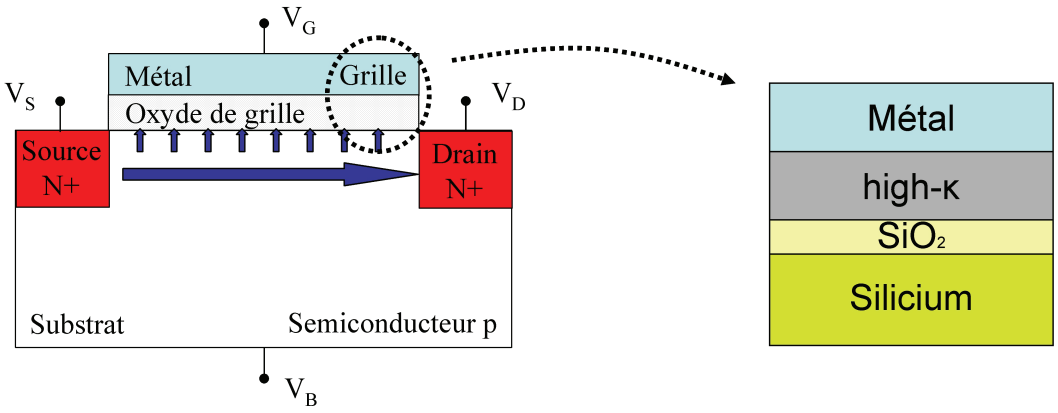


FIGURE 3.5: Nouvelle architecture de l'oxyde de grille afin d'éviter un courant de fuite par effet tunnel : couche interfaciale + high-κ

Les effets de confinement quantique

Un autre effet localisé à l'interface entre le canal et l'oxyde de grille participe à la dégradation du contrôle de grille sur le canal. En régime de forte inversion, les bandes énergétiques de valence et de conduction se courbent sous l'effet de la polarisation de grille. Il y a alors formation d'un puits de potentiel triangulaire qui va confiner les porteurs. Le continuum en énergie utilisé dans une approche classique ne peut plus être appliqué puisque les porteurs sont répartis dans des bandes de conduction associées chacune à un

niveau énergétique comme nous l'avons vu dans le chapitre 1 avec le couplage Poisson-Schrödinger. Le résultat d'un tel confinement est que le maximum de la concentration de porteurs dans le canal ne se situe plus à l'interface mais quelques angströms plus loin définissant une "zone noire" (ou "dark space"). Cet écartement des porteurs diminue le poids de la grille dans le fonctionnement du transistor en diminuant l'effet capacitif. Cette nouvelle répartition engendre une réduction de la charge impliquée dans le transport et donc une diminution du courant de fonctionnement comparé à un dispositif moins avancé avec un oxyde plus épais et un champ électrique plus faible.

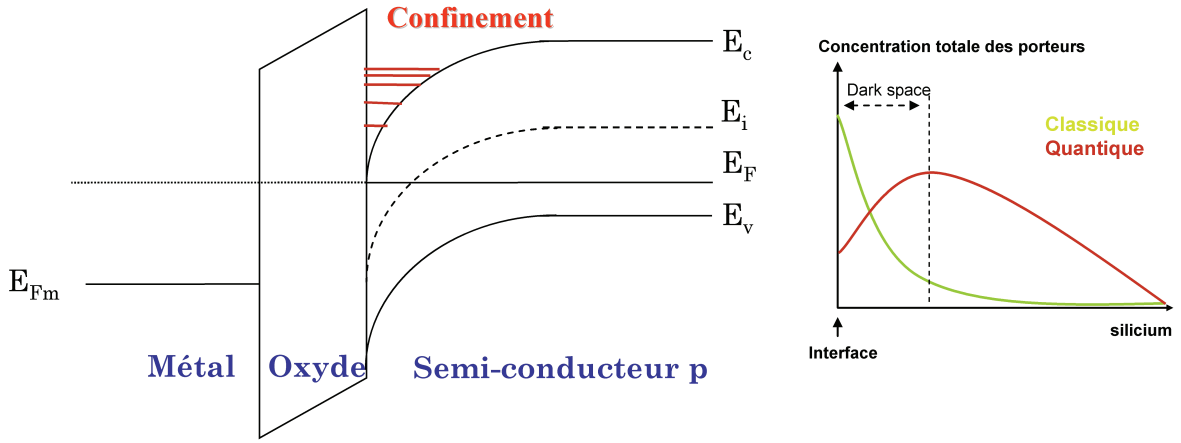


FIGURE 3.6: Principe du confinement quantique dans un transistor de type n et représentation qualitative de la concentration de porteurs dans une approche classique et quantique

3.4 Émergence de nouvelles architectures

Le problème des effets parasites sur l'électrostatique devient majeur pour les noeuds actuels au point que la structure même du transistor MOS conventionnel est remis en cause. Dans ce paragraphe, nous allons exposer les principales architectures potentielles au remplacement du transistor massif.

Afin d'optimiser le contrôle électrostatique du canal, une solution envisagée est l'utilisation de substrat de type SOI (*Silicon On Insulator*). Ce transistor reste planaire mais introduit un oxyde enterré, appelé BOX (*Burried Oxide*), entre la zone active et le substrat. En fonctionnement et au regard de la position de l'oxyde, la zone active sera partiellement (PDSOI *Partially Depleted SOI*) ou complètement déplétée (FDSOI *Fully Depleted SOI*). Ce dernier suscite particulièrement un intérêt car les lignes de champs générées par les polarisations sont impactées par la structure. Ainsi, le BOX évite l'étalement des lignes de champs dans le substrat et les limite à la zone active. Le

contrôle par la grille en est considérablement amélioré. De plus, des études plus poussées ont été faites afin d'optimiser ces capacités comme l'amincissement de l'épaisseur de BOX [Fay95] [Fen04] ou la polarisation du substrat [Web08].

Dans la prolongation de l'amincissement du BOX du FDSOI couplé avec une polarisation arrière, nous avons vu apparaître le transistor Double-Grille (DG). Il a été montré que l'immunité des transistors face aux effets électrostatiques parasites peut être sensiblement améliorée par l'ajout de grille dans la structure [Par02]. L'idée du Double-Grille est donc d'avoir un double contrôle du canal par deux grilles indépendantes ou non. Il en résulte une amélioration de la mobilité des porteurs et ainsi une augmentation de la densité de courant débité tout en limitant les effets SCE. Cependant, à l'instar du FDSOI, l'architecture du transistor DG reste planaire et donc limitée pour le contrôle électrostatique du canal de conduction des noeuds technologiques ultimes [Cel03].

Toujours dans l'optique d'architectures multi-grilles, le transistor FinFET dispose de trois grilles qui entourent le canal (cf. figure 3.7). Contrairement aux architectures présentées au dessus, la conduction du FinFET est unidimensionnelle avec un confinement 2D des porteurs. L'effet quantique y est alors beaucoup plus présent ce qui limite le courant de fonctionnement. Toutefois, cette architecture possède une très bonne immunité face aux effets de canaux courts ce qui permet d'envisager une forte intégration géométrique des transistor FinFET.

Enfin, les transistors à grille totalement enrobante ou encore GAA (*Gate All Around*) représentent la solution ultime pour s'affranchir des effets de canaux courts des technologies suivantes. De section carrée ou circulaire, le film de silicium est totalement entouré par la grille ce qui optimise la stabilité de l'électrostatique de la zone active. Contrairement à la figure 3.3 qui présente les spécifications de l'ITRS de 2005 ne considérant que l'architecture transistor massif, le dernier rapport de 2011 [ITR11] introduit les architectures alternatives dans les projections des performances. Le nanofil comme canal de conduction du MOSFET est envisagé pour les noeuds technologiques sub-20nm et devient indispensable pour les noeuds sub-11nm. Un très forte intégration géométrique peut donc être envisagée. Cependant, outre les problèmes technologiques que cela suscite, une compréhension physique plus poussée devient nécessaire puisque les dimensions visées impliquent l'émergence de phénomènes jusqu'alors négligés. Dans le chapitre suivant, nous allons décrire plus précisément la structure électronique du nanofil de silicium et les approximations qui sont faites pour la suite de ce travail.

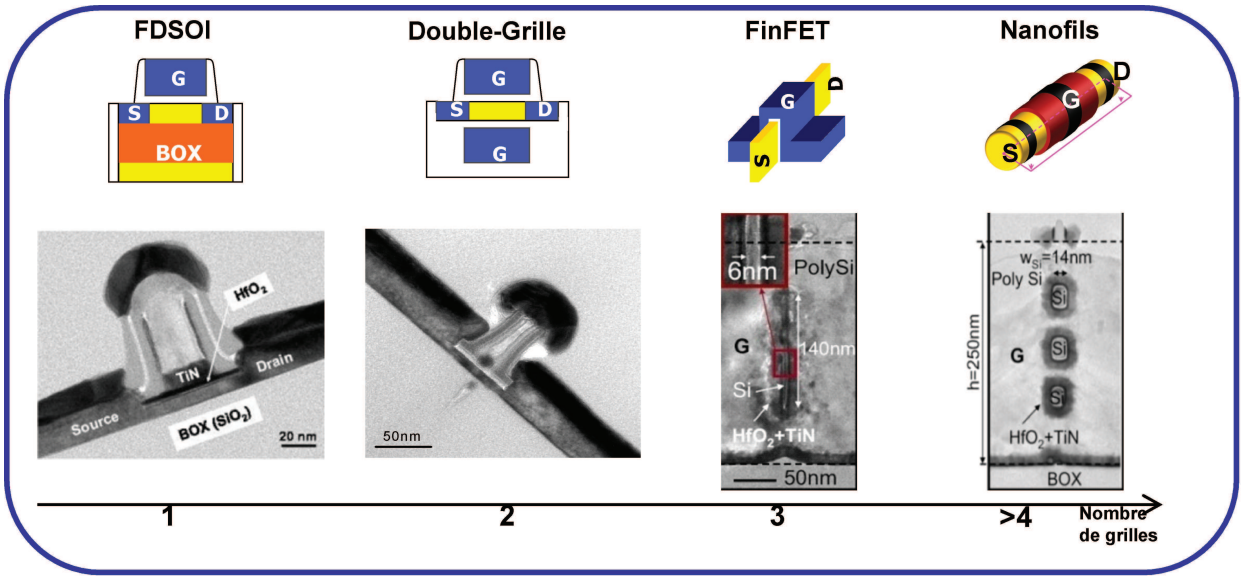


FIGURE 3.7: Evolution des architectures alternatives au transistor massif par rapport au nombre de grilles. Représentation schématique et image TEM ; de gauche à droite : FDSOI [Fen09], Double-Grille [Vin09], FinFET [Dup08], nanofil [Ern08].

Chapitre 4

Structure électronique du nanofil de silicium

Sommaire

4.1 Formalisme et approximations pour le nanofil cylindrique . . 70

4.1.1 Modèle de liaisons fortes 70

4.1.2 Description du système 71

4.1.3 Approximation de la masse effective 73

4.1.4 Approximation d'un système isotropique 75

4.1.5 Validation des hypothèses 78

4.2 Impact de la miniaturisation du transistor sur la structure électronique 78

Afin de s'affranchir des problèmes d'intégration du MOSFET, nous avons absolument besoin de connaître la structure électronique du matériau considéré (le silicium dans notre cas). Comme nous l'avons dit dans le chapitre 1, elle décrit la manière dont le matériau organise, spatialement ou énergétiquement, les porteurs minoritaires susceptibles de participer à la conduction en fonction des paramètres extérieurs comme les polarisations. Il est indispensable de décrire proprement cette structure de bandes car tous les paramètres impliqués dans les caractéristiques du transistors peuvent être déterminés à partir de celle-ci comme une alternative aux données expérimentales : densité d'états, constantes physiques du matériau comme la constante diélectrique [Del04] ou bien le descriptif énergétique du matériau qui conditionne les mécanismes d'interactions comme nous le verrons dans le chapitre 6. Elle est à la base de tous les phénomènes physiques, liés à l'intégration

des transistors, qui vont se répercuter à la fois sur les caractéristiques électrostatiques du dispositif mais aussi sur les propriétés du transport électronique.

4.1 Formalisme et approximations pour le nanofil cylindrique

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, différentes méthodes avec plusieurs niveaux d'approximations sont possibles afin d'extraire la structure de bande du silicium. Dans notre cas, nos objectifs sont d'apporter des outils et des pistes au développement industriel des futurs noeuds technologiques basés sur le nanofil. Il n'est donc pas envisagé d'utiliser des méthodes de type ab-initio qui peuvent difficilement inclure à court terme toute la physique nécessaire à des comparaisons expérimentales. Nous avons donc décidé de développer tous nos outils (numériques ou analytiques) par la méthode semi-empirique de la masse effective. Cependant, dans un soucis de pertinence et de réalisme, nous avons pu bénéficier d'un code de liaisons forte "TB_Sim" développé par Y-M. Niquet et son équipe [Niq00] [Niq06] afin d'extraire les paramètres et de valider les résultats.

4.1.1 Modèle de liaisons fortes

Dans le silicium, les bandes de valence et de conduction sont généralement décrites avec les orbitales 3s et 3p. Il est, toutefois, possible de rajouter d'autres orbitales (notamment les orbitales de type d) pour mieux décrire les bandes de conduction. Cependant, plus la base contient d'orbitales, plus le temps de calcul sera long (cf chapitre 1). Pour le silicium, les choix de bases d'orbitales sont notamment :

- sp^3 : chaque atome de silicium comporte quatre orbitales : une orbitale 3s et trois orbitales 3p,
- sp^3s^* : l'ajout d'une orbitale s^* permet d'apporter une correction due à l'influence des états excités d [Vog83],
- sp^3d^5 : la base se décompose en une orbitale 3s, trois orbitales 3p et les cinq orbitales 3d,
- $sp^3d^5s^*$: une orbitale s^* est ajoutée au modèle sp^3d^5.

Au choix de la base d'orbitales s'ajoute ceux du nombre de voisins et du nombre de centres considérés. C'est pourquoi il existe une vaste gamme de modèles [Niq00] [Vog83] [Tse93] [Jan98] [Boy04]. Dans notre cas, un modèle ayant une bonne description des premières bandes de conduction est suffisant. Nous utiliserons l'approche sp^3 aux troisièmes voisins et trois centres [Niq00]. Elle est parfaitement adapté notamment pour évaluer correctement les masses effectives et la quantification des niveaux énergétiques, paramètres

d'entrée de nos futurs développements.

4.1.2 Description du système

Le silicium utilisé pour des applications de microélectronique est cristallin. Les atomes de silicium sont disposés dans un réseau périodique avec une maille élémentaire de type tétrahédrique dont le paramètre de maille a_0 vaut 0.543nm. Cependant, les caractéristiques de transport du cristal dépendent (entre autre) de la longueur de la maille élémentaire suivant son axe de conduction et peuvent changer suivant l'orientation cristallographique :

- $L = a_0$ pour les nanofils orientés suivant la direction <001>,
- $L = a_0/\sqrt{2}$ pour les nanofils orientés suivant la direction <110>,
- $L = a_0\sqrt{3}$ pour les nanofils orientés suivant la direction <111>.

Dans la suite de ce travail, nous avons fixé l'orientation des nanofils suivant l'axe <100>. La figure 4.1 montre la structure atomistique du nanofil simulé avec le code TB_Sim. Les atomes d'hydrogène entourent totalement le film de silicium afin de passiver la surface et ainsi éviter les liaisons pendantes en surface qui créent des états dans la bande interdite [Lee04].

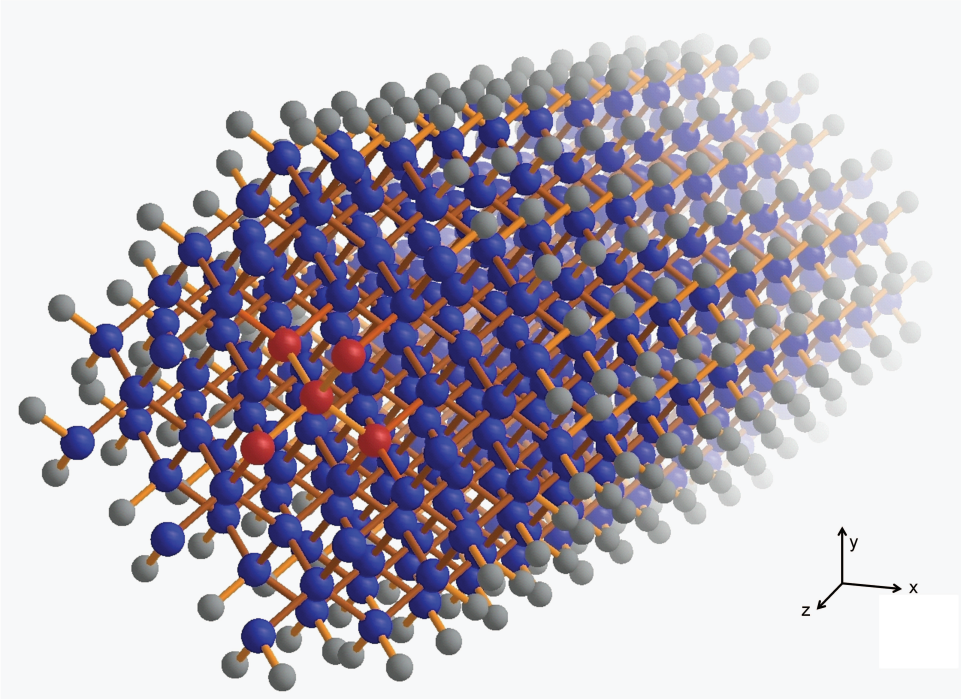


FIGURE 4.1: Représentation atomistique du nanofil de silicium orienté suivant l'axe <001> ; Bleu : atomes de silicium, Gris : atomes d'hydrogène, Rouge : maille élémentaire de la structure silicium. Dans ce cas, le nanofil est long de 5nm avec un diamètre de 1.5nm.

Une fois le modèle choisi et la structure fixée, nous disposons de tous les éléments pour extraire la relation de dispersion $E_n(k)$ du réseau cristallin 1D du nanofil dans la première zone de Brillouin par diagonalisation du hamilonien $H(k)$ d'une maille élémentaire du nanofil. Comme la structure de bandes est symétrique par rapport au point $k = 0$, nous ne représenterons que les points k positifs. La figure 4.2 montre la structure de bandes extraite avec le modèle sp^3 pour un nanofil de section circulaire de diamètre 10nm. Nous retrouvons quasiment les caractéristiques du silicium massif. C'est-à-dire que nous retrouvons les projections des 6 minima du silicium massif : 4 en $k = 0$ et 2 en $k = 0.17$ pour les bandes de conductions le long des six directions équivalentes et un maximum dégénéré en $k = 0$ pour les bandes de valence. Dans la suite, nous nous pencherons sur les caractéristiques des électrons. Plus d'informations sur la bande de valence peuvent être trouvées dans le manuscrit de thèse de K. Huet [Hue08].

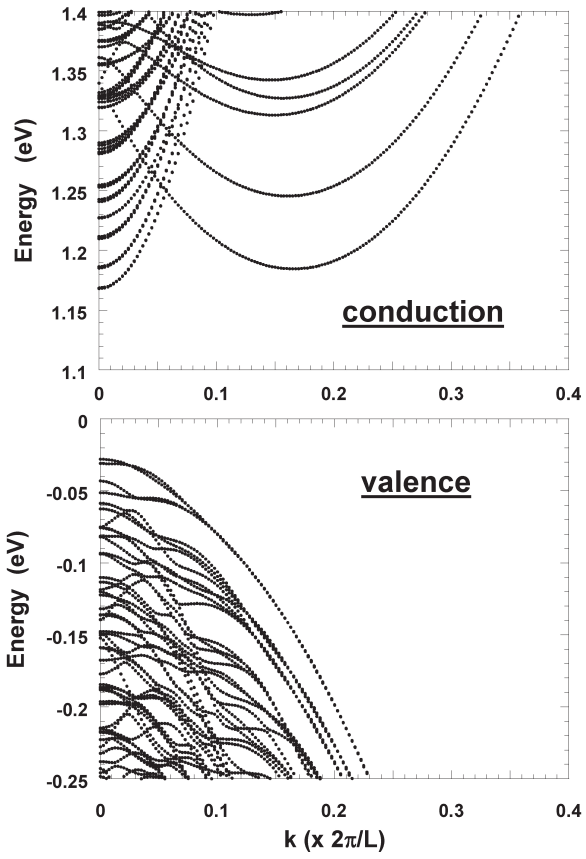


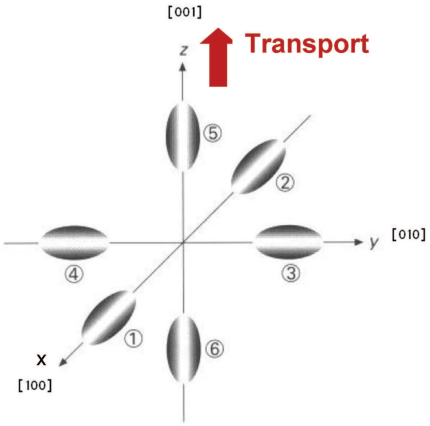
FIGURE 4.2: Structure de bandes d'un nanofil de silicium orienté suivant la direction <001> avec une section circulaire de 10nm.

4.1.3 Approximation de la masse effective

Comme explicité dans le chapitre 1, l'approximation de la masse effective suppose les bandes énergétiques de forme parabolique. Suivant la forme de la bande, le porteur va, plus ou moins bien, pouvoir suivre les champs électriques qu'il subit. Nous pouvons donc supposer que son déplacement est toujours régi par la mécanique classique de Newton mais sa masse associée n'est plus sa masse réelle mais une masse effective dépendant de la bande dans laquelle il se trouve. La masse effective est directement liée à la courbure de la bande parabolique :

$$m^* = \frac{1}{\hbar^2}.\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \tag{4.1}$$

Il est alors possible de traiter les six minima de la bande de conduction avec l'approximation de la masse effective. Les deux vallées suivant la direction [001], appelées "longitudinales", ont une masse de confinement $m_t = 0.191m_e$ et une masse de transport $m_l = 0.916m_e$. Les quatre autres vallées dites "transverses" sont anisotropiques ; c'est-à-dire que leur masse effective dépend de la direction que l'on considère dans le nanofil comme illustré figure 4.3. Dans la suite, pour chaque vallée α, la masse de transport sera notée m_c^α et la masse de confinement sera notée m_z^α. L'extraction de la relation de dispersion se fait donc par la résolution de l'équation de Schrödinger en 2 dimensions suivant le plan de confinement (xy).



axe / vallées	(0x)	(0y)	(0z)
1 - 2	ml	mt	mt
3 - 4	mt	ml	mt
5 - 6	mt	mt	ml
	confinement		transport

FIGURE 4.3: Définition des masses longitudinales et transverses pour les six vallées de confinement du silicium orienté <100>.

Les figures 4.4 et 4.5 montrent le résultat de la résolution de l'équation de Schrödinger en coordonnées cartésiennes (grâce à un module "masse effective" du code TB_Sim) pour le nanofil de 10nm de diamètre. Le carré de la fonction d'onde des seize premiers niveaux est tracé dans l'espace pour les vallées longitudinale et transverse. La valeur associée à chaque niveau représente la différence d'énergie vis-à-vis du premier niveau quantifié.

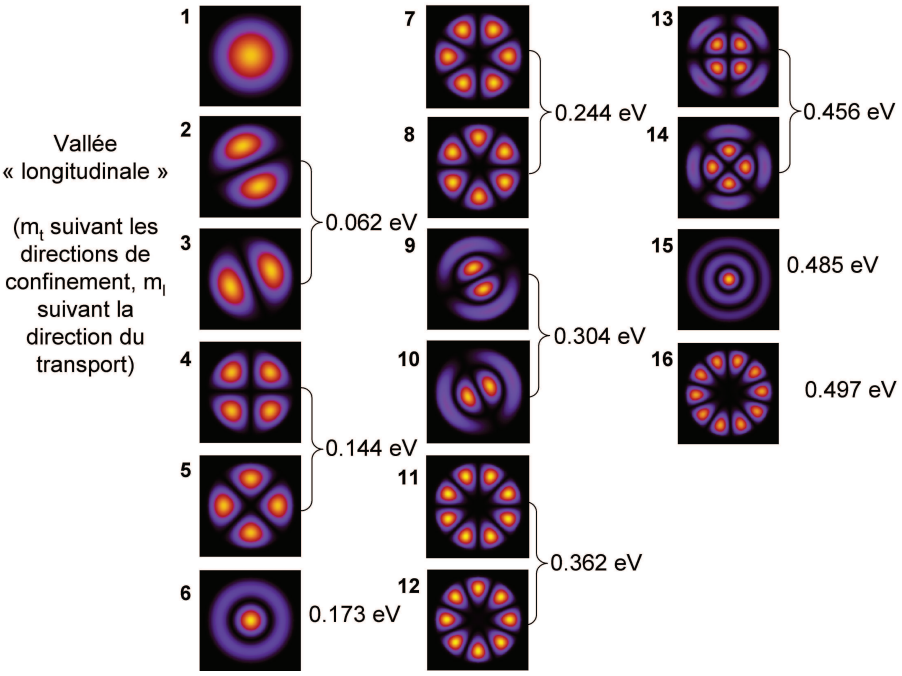


FIGURE 4.4: Module au carré de la fonction d'onde des seize premiers niveaux quantifiés d'une vallée longitudinale pour un nanofil orienté <001> de diamètre 10nm. A chaque niveau est associée la différence d'énergie vis-à-vis du premier niveau.

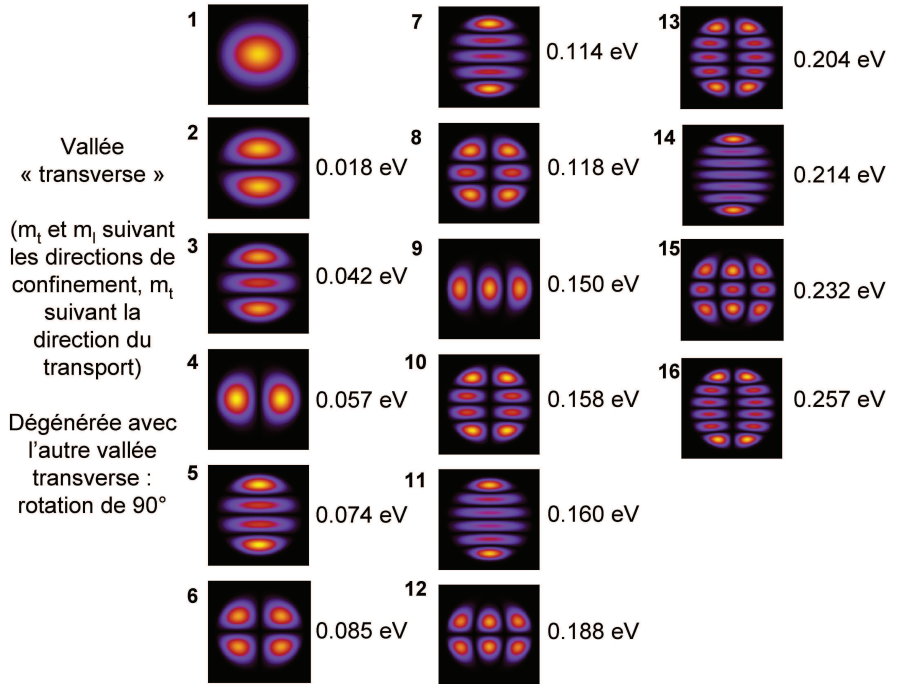


FIGURE 4.5: Module au carré de la fonction d'onde des seize premiers niveaux quantifiés d'une vallée transverse pour un nanofil orienté <001> de diamètre 10nm. A chaque niveau est associée la variation d'énergie vis-à-vis du bas de bande de chaque vallée. Les fonctions d'onde d'une vallée transverse orthogonale sont identiques mais pivotées de 90 degrés.

4.1.4 Approximation d'un système isotropique

Étant donné que nous considérons un nanofil à section circulaire, nous avons décidé de nous placer dans un repère cylindrique. Dans ce cas là, les masses suivant les deux axes de confinement (x et y) sont égales. Le Hamiltonien à résoudre est donc celui exposé dans le chapitre 1 avec un potentiel radial à symétrie cylindrique $V(\vec{r})$:

$$H = \frac{\hbar \triangle}{2m^*} + V(\vec{r}) \tag{4.2}$$

Dans le cas d'un nanofil de longueur L ayant un potentiel constant à symétrie cylindrique, la fonction d'onde de la $j^{ième}$ sous-bande de la vallée α s'écrit alors comme le produit d'une onde plane, d'une fonction angulaire et d'une fonction radiale, appelée "fonction enveloppe".

$$\psi_{\alpha j,k}(r,\phi,z) = \frac{1}{\sqrt{L_c}}.\varphi_{\alpha j}(r).e^{il_{\alpha j}\phi}.e^{ikz} \tag{4.3}$$

où r, ϕ, z sont les coordonnées cylindriques et $l_{\alpha j}$ est le nombre quantique angulaire.

L'hypothèse d'un système isotropique dans le plan de confinement consiste donc à négliger la partie angulaire de la fonction d'onde. L'extraction de la fonction d'onde se traduit donc par la résolution de l'équation de Schrödinger cylindrique (eq 4.4) que doit vérifier $\varphi_{\alpha j}(r)$. Le problème numérique est nettement simplifié puisque nous passons d'une résolution 2D à une résolution 1D le long du rayon du nanofil. Le temps de calcul y est donc fortement réduit ce qui nous permettra d'envisager des structures plus grandes afin de tendre vers les dimensions réelles des dispositifs expérimentaux.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2r}.\frac{d}{dr}\left(\frac{r}{m_c^\alpha}.\frac{d}{dr}\right) + \frac{\hbar^2 l_{\alpha j}}{2r^2 m_c^\alpha} + V(r)\right].\varphi_{\alpha j}(r) = E_{\alpha j}.\varphi_{\alpha j}(r) \tag{4.4}$$

L'énergie totale de la sous-bande (α,j) est donc $E(k) = E_{\alpha j} + E_z(k)$ où la non-parabolicité est incluse le long du transport à travers le paramètre $\beta_n = 0.5eV^{-1}$:

$$E_z.(1 + \beta_n.E_z) = \frac{\hbar^2.k^2}{2m_z^\alpha} \tag{4.5}$$

Couplage avec Poisson

Il ne reste plus qu'à coupler le résultat issu de la résolution de Schrödinger à l'équation de Poisson. Si nous considérons des conditions périodiques pour le potentiel le long de son

axe de transport, une transformée de Fourier peut s'appliquer :

$$V(r,\phi,z) = \frac{1}{2\pi L_c}\sum_{l,q} V_{lq}(r).e^{il\phi}.e^{iqz} \tag{4.6}$$

et

$$\rho(r,\phi,z) = \frac{1}{2\pi L_c}\sum_{l,q} \rho_{lq}(r).e^{il\phi}.e^{iqz} \tag{4.7}$$

où l est un entier et q est un multiple de $2\pi/L$. Sous cette forme, l'équation de Poisson devient :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} - q^2 - \frac{l^2}{r^2}\right) V_{lq}(r) = -\frac{\rho_{lq}(r)}{\varepsilon(r)} \tag{4.8}$$

Toutefois, l'approximation de l'isotropie sur la résolution de l'équation de Schrödinger engendre une densité de charge cylindriquement symétrique et constante le long de l'axe de transport z. Ceci implique que la transformée de Fourier appliquée au potentiel se réduit à $l = 0$ et $q = 0$. La partie radiale correspondante de l'équation de Poisson est résolue pour mettre à jour le potentiel et ainsi le réinjecter dans l'équation de Schrödinger.

Cette approximation de l'isotropie est la base du développement du code numérique CYLMOS [Mun03] [Zer04] développé à l'IM2NP de Marseille. Il s'agit d'un code Poisson 2D-Schrödinger 1D suivant le rayon et l'axe de transport du nanofil. Le principe numérique est celui expliqué juste au dessus et illustré sur la figure 4.6, représentant la structure maillée simulé avec CYLMOS. Bien que le potentiel varie entre la source et le drain du transistor, il est considéré constant sur chaque tranche de simulation.

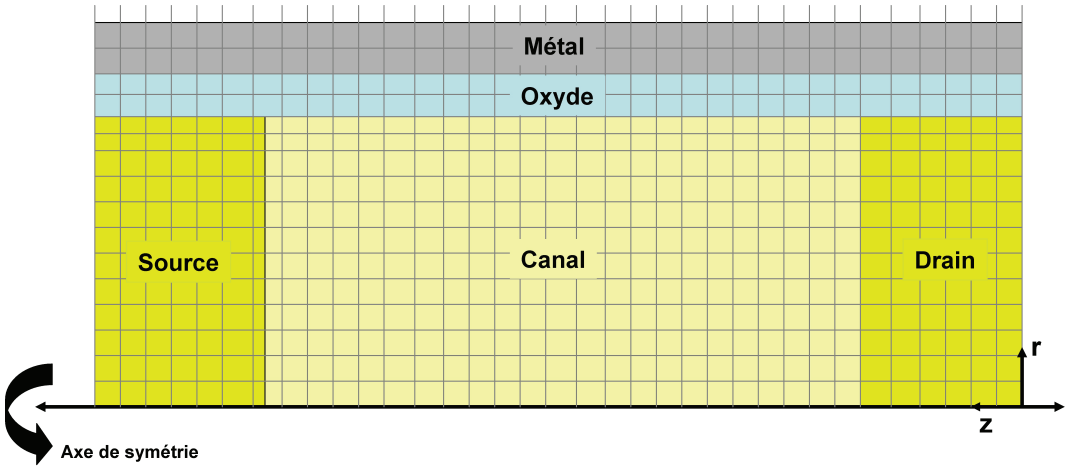
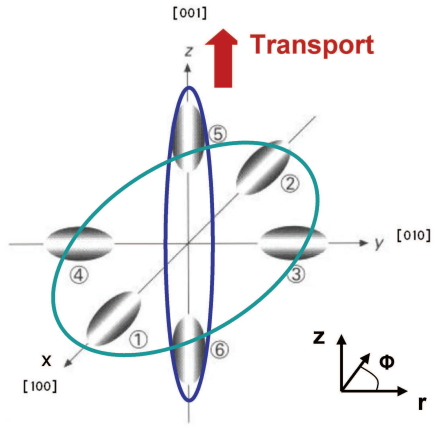


FIGURE 4.6: Représentation schématique de la structure maillée simulée avec le code CYLMOS.

Dans cette approximation isotrope, la structure de bandes du nanofil est fortement simplifiée. Nous ne considérons plus que deux vallées : une longitudinale dégénérée deux

fois et une transverse dégénérée quatre fois. La figure 4.7 indique la masse de transport et de confinement pour chaque vallée. La masse de confinement de la vallée transverse est approximée à une masse cylindrique afin de préserver la symétrie dans les calculs.



vallées \ axe	(0r)	(0z)
Transverse 1,2,3,4	$2m_t.m_l/(m_t+m_l)$	m_t
Longitudinale 5,6	m_t	m_l
	confinement	**transport**

FIGURE 4.7: Définition des masses longitudinales et transverses pour les six vallées du silicium orienté <100> dans l'approximation d'un système isotropique.

La figure 4.8 montre la fonction d'onde au carré issue du code CYLMOS pour les cinq premières sous-bandes de la vallée transverse d'un nanofil de de 10nm de diamètre et pour deux polarisations de grille différentes (sous et sur le seuil).

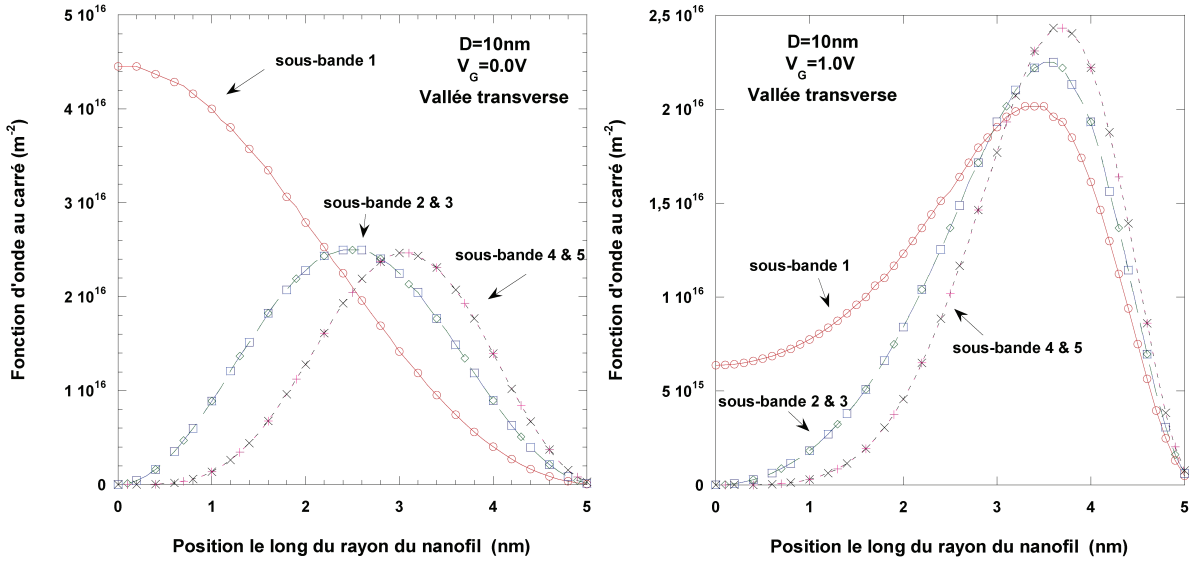


FIGURE 4.8: Module au carré de la fonction d'onde issue du code CYLMOS pour les cinq premières sous-bandes de la vallée transverse ; Deux polarisations de grille : sous (gauche) et sur le seuil (droite)

4.1.5 Validation des hypothèses

Afin de vérifier la crédibilité de notre approche, il est important de confronter nos résultats à des approches plus fondamentales. Dans la suite de ce travail, nous essaierons de comparer systématiquement nos résultats en fonctions des codes numériques auxquels nous avons accès. La figure 4.9 compare la répartition de la densité surfacique de charge en fonction de la position sur le rayon du nanofil entre la résolution des équations Poisson-Schrödinger 2D anisotropique et la résolution 1D avec hypothèse d'une masse de confinement isotrope. Nous pouvons valider cette dernière hypothèse puisque la variation de la charge pour une position fixée reste faible. L'intérêt de comparer les 3 approches que nous venons de décrire précédemment est de s'assurer de la pertinence de grandeurs dont la modélisation précise est indispensable à l'évaluation des potentialités du nanofil pour une application MOSFET.

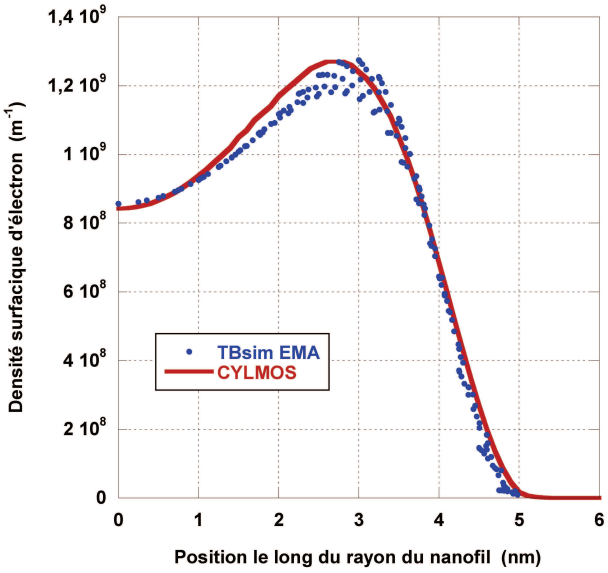


FIGURE 4.9: Densité surfacique d'électrons en fonction de la position le long du rayon du nanofil ; Comparaison entre la résolution des équations Poisson-Schrödinger 2D anisotropique (TB_Sim EMA) et la résolution 1D avec hypothèse d'une masse de confinement isotrope (CYLMOS).

4.2 Impact de la miniaturisation du transistor sur la structure électronique

Comme évoqué dans le chapitre 3, l'architecture nanofil est prévue pour des noeuds technologiques ultimes où l'intégration géométrique est extrême. Les dimensions ciblées sont d'une dizaine de nanomètre pour la longueur de canal et de seulement quelques

nanomètres pour l'épaisseur de film de silicium. A ces dimensions-là, les effets perturbatifs que nous avons décrit précédemment (comme les SCE ou le confinement quantique) sont extrêmement présents. En effet, quelques nanomètres de silicium correspondent à quelques couches atomiques ce qui modifie fortement la structure électronique comparé à un matériau massif. De plus, l'architecture particulière du nanofil avec une grille circulaire totalement enrobante confère un confinement à deux dimensions qui accentue cet effet. La figure 4.10 montre la structure de bande issue du code TB_Sim avec le modèle sp^3 pour des nanofils circulaires orientés suivant la direction <100> de diamètre 2 et 10nm.

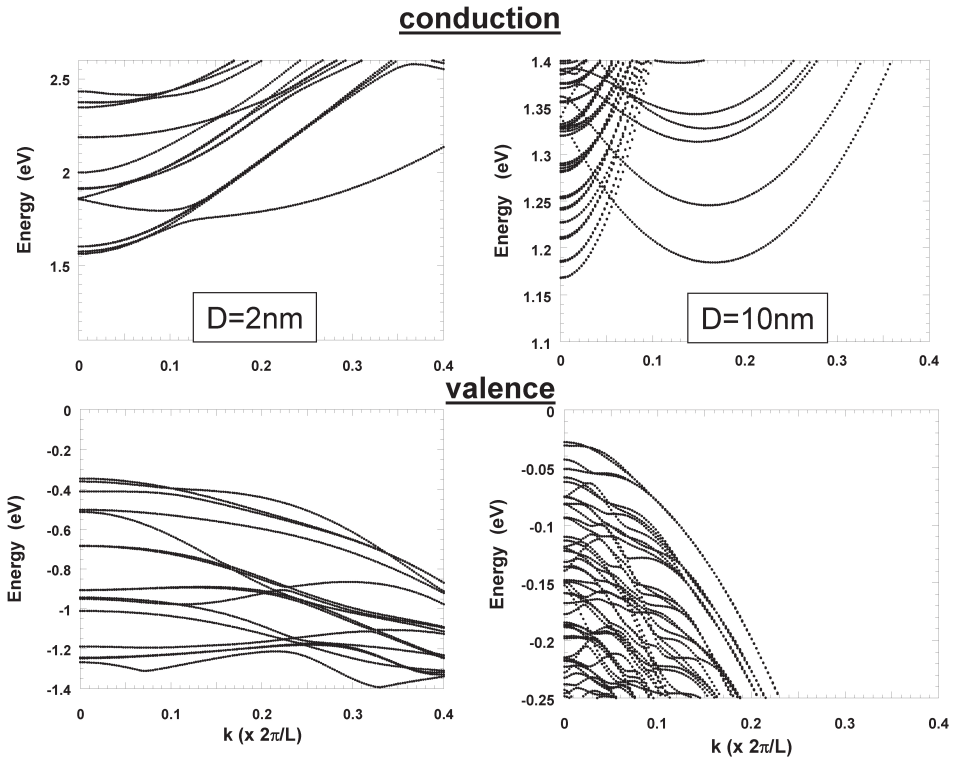


FIGURE 4.10: Structure de bandes de nanofils de silicium orientés suivant la direction <100> avec une section circulaire de 2nm (gauche) et de 10nm (droite).

Nous pouvons voir qu'à 10nm de diamètre (structure proche du matériau massif), les sous-bandes de chaque vallée sont relativement resserrées ce qui tend vers l'approche classique d'un continuum en énergie pour l'accumulation des porteurs. Cependant, à 2nm, ce n'est plus le cas, les bandes sont beaucoup plus espacées. Nous voyons clairement que le confinement et la quantification des porteurs y sont accentués. De plus, la forme même des bandes est différentes. La bande interdite du silicium (différence entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction) augmente ce qui accroit le comportement isolant du semiconducteur. Enfin, les masses effectives calibrées sur la courbure des bandes sont modifiées en réduisant l'épaisseur de film. De nombreux papiers théoriques se sont penchés sur ces effets [Neo08] [Niq00] [Niq06] [Sar08] [Neh06]. Dans la

suite, nous allons donc tenter de modéliser analytiquement l'électrostatique du transistor MOSFET à base de nanofil en incluant tous ces effets. Bien qu'il s'agisse d'un comportement global de la structure de bandes vis-à-vis de l'intégration, nous allons dissocier d'une part l'augmentation de la bande interdite et des masses effectives que nous appellerons *Effet de Structure de Bandes* (dit BSE pour *Band Structure Effet)* et d'autre part l'espacement des sous-bandes qui constituera pour nous le $confinement\ quantique$.

Chapitre 5

Modélisation analytique de l'électrostatique des MOSFETs à base de nanofil

Sommaire

5.1 État de l'art sur les principaux modèles compacts pour le transistor MOSFET à nanofil 82

5.1.1 Approche par résolution exacte de l'équation de Poisson 82

5.1.2 Approche par hypothèse d'un potentiel parabolique 83

5.2 Modélisation analytique de l'électrostatique basée sur l'hypothèse d'un potentiel parabolique 84

5.2.1 Détermination du potentiel parabolique 84

5.2.2 Définition de la tension de seuil classique canal long 85

5.2.3 Modélisation du confinement de mécanique quantique 86

5.2.4 Modélisation des effets de structure de bandes 88

5.2.5 Modélisation des effets canaux courts 90

Dans le chapitre précédent, nous avons fait le bilan des propriétés électroniques du nanofil de silicium et ainsi décrit les différentes approches numériques que nous avons utilisées. Cette étape est indispensable pour la compréhension physique de notre dispositif. Ainsi une prédiction de l'évolution de ces propriétés peut être envisagée et construite. Toutefois, la microélectronique a pour but de fournir des circuits tels que les microprocesseurs contenant des milliards de transistors. Toujours dans l'optique d'augmentation

des performances, ces circuits doivent être scrupuleusement analysés et optimisés par les concepteurs. Cependant, il n'est pas envisageable d'utiliser des codes numériques comme ceux présentés ci-dessus. Bien que très physiques, ils ont un temps de calculs incompatible avec des simulations à l'échelle multi-transistor. Sur le plan économique, il n'est également pas envisageable de fabriquer physiquement des microprocesseurs sans cette étape préalable de validation par la simulation. C'est pourquoi des modèles dits *compacts*, introduits dans le chapitre 2, sont nécessaires pour évaluer les grandeurs électriques mises en jeu dans le circuit.
Dans ce chapitre, après avoir passé en revue les différentes approches de modélisation compacte que nous retrouvons dans la littérature, nous adapterons au nanofil la modélisation de la tension de seuil incluant le confinement quantique initiée par *Harrisonet al* [Har05] et *Trivedi et al* [Tri05].

5.1 État de l'art sur les principaux modèles compacts pour le transistor MOSFET à nanofil

La modélisation de l'électrostatique d'un composant électronique passe par une description exacte du potentiel en tout point défini par l'équation de Poisson. Pour cela, deux approches ressortent dans ce domaine. Il y a tout d'abord la résolution exacte de l'équation de Poisson en coordonnées cylindriques. La deuxième approche consiste à présupposer la forme du potentiel qui sera réinjectée dans l'équation de Poisson afin d'en déduire les paramètres indéterminés. En reprenant l'équation 4.8 pour $l = 0$ et $q = 0$ et en explicitant la densité de charges, l'équation à résoudre analytiquement est exprimée en coordonnées cylindriques par :

$$\frac{d^2V}{dr^2} + \frac{1}{r}.\frac{dV}{dr} = \frac{e}{\varepsilon_{si}}(N_A + n_i.e^{\frac{eV}{kT}}) \tag{5.1}$$

5.1.1 Approche par résolution exacte de l'équation de Poisson

La double intégration de l'équation de Poisson donnant sa solution exacte est explicitée dans la littérature de façon quasi-unanime [Chi04] [Jim04] [Liu09] [Ini05] [Yu07a] [Yu07b].

$$V(r) = V_{FB} - \frac{2kT}{e} ln\left(\frac{D}{4L_c.\beta_p}\left(1 - \frac{4\beta_p r^2}{D^2}\right)\right) \tag{5.2}$$

Cependant, cette expression n'est pas une expression purement analytique puisque le paramètre β_p est indéterminé car dépendant de la structure même du composant. A partir de là, différentes approches sont utilisées dans la littérature. Dans le chapitre 2, nous avons

brièvement introduit les différents types de modèles compact. Ici, nous allons reprendre ceci mais appliqué aux nanofils.
Comme nous l'avons déjà dit, l'approche en tension de seuil permet de séparer de façon bien distincte le courant en fonction de son régime de fonctionnement : sous le seuil et au dessus du seuil. Sachant que le courant de drain a une composante liée à la diffusion et une autre liée à la conduction, cette approche simplifie le problème en considérant que le mécanisme de transport est essentiellement diffusif sous le seuil et de conduction au dessus du seuil. Le modèle conventionnel utilisant cette approche est BSIM [BSI09] développé par l'université de Berkeley. Dans le cas du nanofil, le modèle de *Chiang et al* [Chi04] utilise ce raisonnement puisque la résolution de l'équation de Poisson conduit à l'apparition d'un terme B qui varie suivant la position et les régimes de fonctionnement. Il en est de même pour le modèle de *Jiménez et al* [Jim04] qui s'applique aux nanofils peu ou faiblement dopés. Le principal inconvénient de cette approche est qu'une fonction de raccord est nécessaire pour rendre continu le courant sur tous les régimes. Ensuite, des modèles de charge tel que le modèle EKV [Enz06] ont également été transposés aux nanofils. Nous comptons notamment sur les modèles de *Liu et al* et *Iniguez et al* utilisant cette approche. Enfin, le modèle en potentiel de surface consiste en une méthode mathématique d'approximation qui sort un potentiel valide dans tous les régimes de fonctionnement avec une précision de l'ordre du nanovolt. Les modèles SP et PSP basés sur cette approche sont les références actuelles en modélisation compacte [Gil04] [Gil06]. Ce modèle a été appliqué aux nanofilx par *Yu et al* [Yu07a] [Yu07b]. Toutefois, bien que très précis sur la description de l'électrostatique, le modèle en potentiel de surface rend difficile le couplage avec le transport électronique (mobilité généralement considérée comme constante).

5.1.2 Approche par hypothèse d'un potentiel parabolique

Pour le nanofil de silicium qui dispose d'une grille totalement enrobante et dans le cas d'un film de silicium relativement fin, le potentiel ne peut atteindre un plateau. Les courbures de bande générées par la grille d'un coté et de l'autre du nanofil se recouvrent et le potentiel prend ainsi la forme proche d'une parabole [Aut05]. Il s'agit de l'approche que nous avons choisi de développer dans la suite basée sur un modèle en tension de seuil. Ainsi, toute la physique décrite précédemment pourra plus facilement être implémentée dans le modèle comparé à une approche en potentiel de surface.

5.2 Modélisation analytique de l'électrostatique basée sur l'hypothèse d'un potentiel parabolique

5.2.1 Détermination du potentiel parabolique

A l'instar des travaux de *Martinie et al* [Mar09] sur le transistor double grille, l'objectif de cette partie est de modéliser toute l'électrostatique du nanofil à section circulaire en se basant sur l'hypothèse d'un potentiel électrostatique de forme parabolique.

$$V(r,z) = A(z) + B(z).r + C(z).r^2 \tag{5.3}$$

où A, B et C sont des fonctions de z indéterminées. Dans un premier temps, nous allons considérer un canal long où le potentiel est constant donc nous allons nous affranchir de la composante en z.

Ayant un système totalement symétrique et isotrope, nous pouvons dire que les potentiels en $r = \frac{D}{2}$ et en $r = -\frac{D}{2}$ sont égaux. Donc nous pouvons écrire :

$$V(\frac{D}{2}) = V(-\frac{D}{2}) \tag{5.4}$$

$$\Rightarrow A + B.\frac{D}{2} + C.\frac{D^2}{4} = A - B.\frac{D}{2} + C.\frac{D^2}{4} \tag{5.5}$$

D'où :

$$B = 0 \tag{5.6}$$

De plus, nous pouvons définir le potentiel en $r = \frac{D}{2}$ comme étant le potentiel de surface V_s.

$$V(\frac{D}{2}) = A + C.\frac{D^2}{4} = V_s(x) \tag{5.7}$$

$$\Rightarrow A = V_s - C.\frac{D^2}{4} \tag{5.8}$$

Nous pouvons alors donner l'expression générale du potentiel électrostatique :

$$V(r) = Vs - C.\frac{D^2}{4} + C.r^2 \tag{5.9}$$

Afin d'avoir une expression analytique complète du potentiel électrostatique, il nous faut alors déterminer l'expression de la constante parabolique C.

Détermination de C

Pour cela, nous allons utiliser l'équation de Poisson (cf eq 5.1). Dans notre cas, nous avons :

$$\frac{dV}{dr} = 2C.r \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2V}{dr^2} = 2C \tag{5.10}$$

Ainsi, nous allons intégrer cette équation sur toute la surface transverse du nanofil entre 0 et $\frac{D}{2}$.

$$\int_0^{\frac{D}{2}} 4C.2\pi.r.dr = \frac{2\pi.e.N_A}{\varepsilon_{si}} \int_0^{\frac{D}{2}} r.dr + \frac{Q_{inv,2D}}{\varepsilon_{si}} \tag{5.11}$$

où $Q_{inv,2D} = \int_0^{\frac{t_{si}}{2}} 2\pi.e.n_i.e^{\frac{eV}{kT}}.r.dr$ est la charge d'inversion sur la surface (en m^{-1}).

$$\Rightarrow \quad 8\pi.C.\frac{D^2}{8} = 2\pi\frac{e.N_A}{\varepsilon_{si}}.\frac{D^2}{8} + \frac{Q_{inv,2D}}{\varepsilon_{si}} \tag{5.12}$$

$$C = \frac{e.N_A}{4\varepsilon_{si}} + \frac{Q_{inv,2D}}{\pi.\varepsilon_{si}.D^2} \tag{5.13}$$

5.2.2 Définition de la tension de seuil classique canal long

La figure 5.1 illustre le diagramme de bandes suivant une coupe transverse du nanofil.

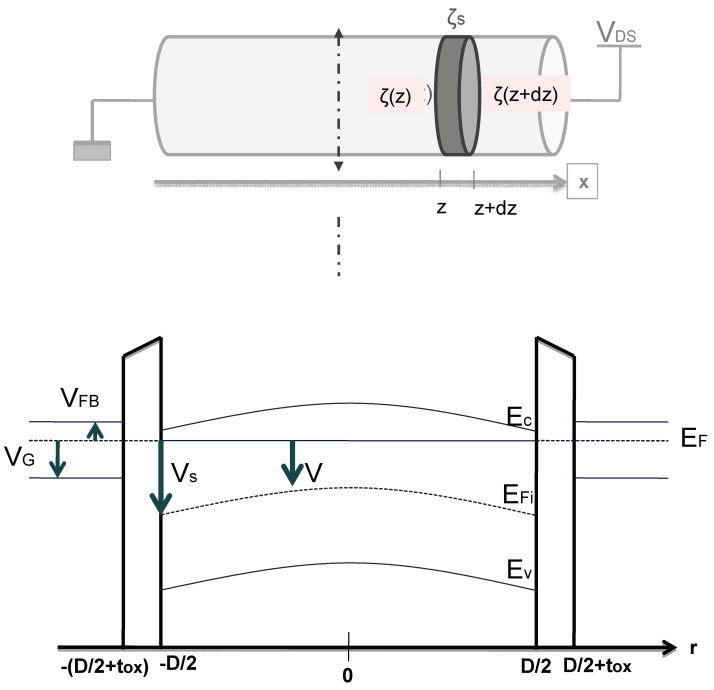


FIGURE 5.1: Diagramme de bandes suivant une coupe transverse du nanofil.

Les conditions à l'interface Si/SiO_2 nous donnent :

$$V_{GS} - V_{FB} = \frac{\varepsilon_{si}}{C_{ox}}.\zeta_s + V_s + \phi_F \tag{5.14}$$

où ζ_s est le champ électrique à l'interface défini par

$$\zeta_s = -\frac{dV}{dr}|_{r=\frac{D}{2}} = -C.D \tag{5.15}$$

L'expression finale de la tension de seuil classique canal long est alors définie comme étant la polarisation de grille lorsque le critère de seuil est atteint. Comme nous l'avons dit dans le chapitre 3, la tension de seuil est définie comme étant le moment où la concentration de porteurs minoritaires dépasse celle des dopants. Nous avons donc choisi d'imposer un critère de seuil sur la charge totale. Autour du seuil, la charge linéïque (intégrée sur le rayon par analogie au dispositif planaire) est égale à $Q_{inv,1D} = \frac{kt}{e}C_{ox}$ où C_{ox} [Mun05] est la capacité d'oxyde exprimée par :

$$C_{ox} = \frac{\varepsilon_{ox}}{\frac{D}{2}ln(2\frac{t_{ox}}{D}+1)} \tag{5.16}$$

Dans notre cas, nous avons un système 2D (suivant r et suivant l'angle θ), donc la charge totale d'inversion vaut $Q_{inv,2D} = Q_{inv,1D}.2\pi.\frac{D}{2}$.

L'expression analytique du paramètre C au seuil devient :

$$C_{th} = \frac{e.N_A}{4\varepsilon_{si}} + \frac{kT}{e}.\frac{C_{ox}}{\varepsilon_{si}.D} \tag{5.17}$$

Finalement, l'expression qui définit notre tension de seuil pour un transistor MOSFET à nanofil canal long est donnée ci-dessous. Il ne reste plus qu'à déterminer le potentiel de surface au seuil $V_{s,th}$. Nous allons par la suite utiliser ce paramètre pour inclure les phénomènes physiques décrits ci-dessus comme le confinement quantique ou les effets de structure de bandes.

$$V_{th} = V_{FB} - \frac{\varepsilon_{si}}{C_{ox}}.D.C_{th} + V_{s,th} + \phi_F \tag{5.18}$$

5.2.3 Modélisation du confinement de mécanique quantique

Afin de prendre en compte le confinement des porteurs dans l'ensemble des vallées α et des sous-bandes j de la structure de bandes, l'expression de la charge quantique intégrée

sur le rayon doit être exprimée :

$$Q_{inv,1D} = \sum_{\alpha} \sum_{j} n(E_{\alpha j}) \tag{5.19}$$

avec

$$n(E_{\alpha j}) = 2 \int_{E_{\alpha j}}^{+\infty} \rho_{1D}(E, E_{\alpha j}).f(E).dE \tag{5.20}$$

En remplaçant par l'expression de la densité d'état et de la fonction de Fermi, l'expression de la charge devient :

$$Q_{inv,1D} = e \sum_{\alpha} \sum_{j} (\frac{2}{\pi}.\sqrt{\frac{2.m_z^{\alpha}}{\hbar^2}}).\sqrt{\frac{kT}{e}}.\int_0^{\infty} \frac{r^{-0,5}}{1 + e^{r - \frac{e}{kT}.(E_{\alpha j} + \frac{E_g}{2} - V_s)}}.dr \tag{5.21}$$

Dans la condition d'un film non-dégénéré (valide au seuil), la distribution de Fermi peut être approximée par une simple exponentielle (correspondant à la distribution de Boltzmann) [Aut04].

$$Q_{inv,1D} \approx Q^*.e^{-\frac{e.\psi_s}{kT}} \tag{5.22}$$

avec

$$Q^* = e \sum_{\alpha} \sum_{j} (\frac{2}{\pi}.\sqrt{\frac{2.m_z^{\alpha}}{\hbar^2}}).\sqrt{\frac{kT}{e}}.\sqrt{\pi}.e^{-\frac{e}{kT}.(E_{\alpha j} + \frac{E_g}{2})} \tag{5.23}$$

Il devient donc nécessaire d'exprimer analytiquement la valeur énergétique des niveaux quantifiés. *Baccarani et al* [Bac08] ont exprimé la valeur de ces niveaux pour le cas du nanofil à section circulaire supposant que 1 et 2 correspondent aux vallées transverses et 3 à la vallée longitudinale :

$$E_{1(2)j} = \frac{(2.\varsigma.\hbar.j)^2}{4.e.t_{si}^2}.(\frac{1}{m_t^*} + \frac{1}{m_l^*}) \tag{5.24}$$

$$E_{3j} = \frac{(2.\varsigma.\hbar.j)^2}{2.e.t_{si}^2}.(\frac{1}{m_t^*}) \tag{5.25}$$

où ς est un paramètre numérique valant 2,405. Notons que nous retrouvons bien la masse cylindrique définie dans le chapitre 4 pour les vallées transverses.
La figure 5.2 montre la variation du premier niveau énergétique par rapport au bas de la bande de conduction en fonction du diamètre du nanofil pour les vallées longitudinale et transverse. Les masses effectives utilisées dans ce cas sont les valeurs du silicium massif. Le résultat analytique a été confronté aux deux codes numériques utilisant également la même approche : Poisson-Schrödinger 2D (TB_Sim EMA) et Poisson 2D-Schrödinger 1D en masse isotrope (CYLMOS). Étant donné que nous cherchons les niveaux quantifiés liés à la structure, les simulations ont été faites pour une polarisation de grille nulle.

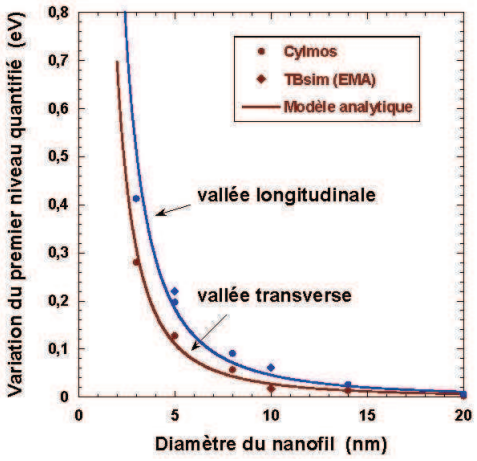


FIGURE 5.2: Variation du premier niveau quantifié par rapport au bas de la bande de conduction pour les vallées longitudinale et transverse ; Comparaison avec les codes numériques CYLMOS et TB_Sim EMA.

La tension de seuil étant toujours calculée avec la condition de seuil $Q_{inv,th} = \frac{kT}{e}.C_{ox}$, nous pouvons exprimer le potentiel de surface au seuil comme étant :

$$V_{s,th} = \frac{kT}{e}.ln(\frac{Q_{inv,th}}{Q^*}) \tag{5.26}$$

que nous réinjectons dans l'équation 5.18 pour obtenir la tension de seuil quantique.

5.2.4 Modélisation des effets de structure de bandes

Comme nous l'avons vu à la fin du chapitre 4, la structure de bandes est fortement impactée par l'intégration géométrique des transistors. Les propriétés de transport en sont alors modifiées. Dans le but d'inclure ces modifications dans le modèle que nous développons, des expressions analytiques (inspirées de [Niq00]) des paramètres affectés (bande interdite et masses effectives) sont proposées ici. La calibration se fait sur les résultats issus du code en liaisons fortes TB_Sim [Sar08] (cf figure 5.3).

$$E_g = E_{g,bulk} + \frac{K_{1,g}}{D^2 + K_{2,g}.D + K_{3,g}} \tag{5.27}$$

$$m_{t(l)} = m_{t(l),bulk} + \frac{K_{1,t(l)}}{D^2 + K_{2,t(l)}.D + K_{3,t(l)}} \tag{5.28}$$

où les constantes K sont des paramètres de calibrage dont les valeurs sont répertoriées dans le tableau ci-dessous.

	E_g	m_t	m_l
K_1	5.148	1.784	0.975
K_2	1.748	2.483	$3.9.10^{-6}$
K_3	10^{-6}	0.957	310^{-6}

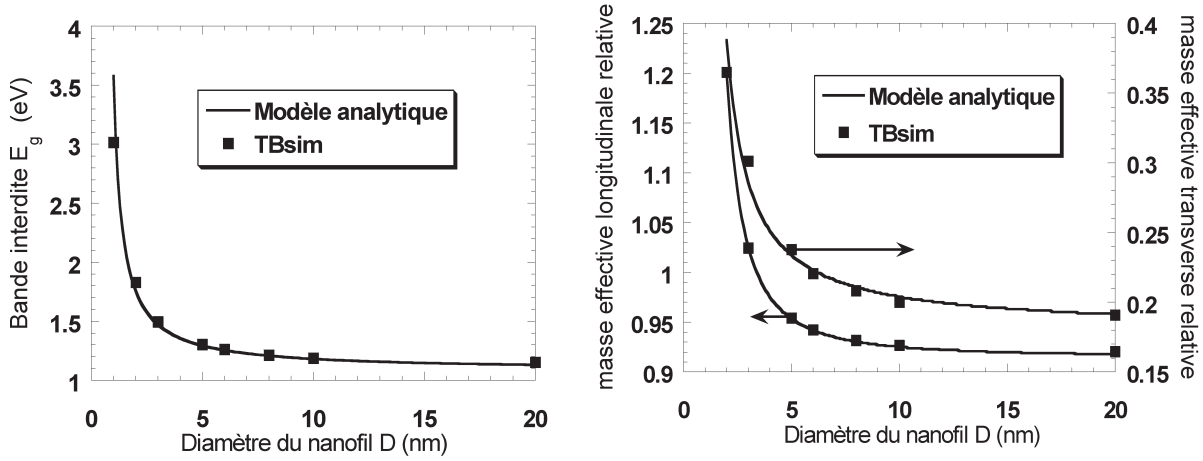


FIGURE 5.3: Variation de la bande interdite du silicium et des masses effectives relatives longitudinale et transverse en fonction du diamètre du nanofil ; Comparaison avec des résultats numériques issus de TB_Sim [Sar08].

Résultat au niveau de la tension de seuil canal long

La figure 5.4 montre l'augmentation de la tension de seuil due aux effets de confinement quantique avec (considérant les équations 5.27 et 5.28) et sans (utilisant les valeurs du silicium massif) effets de structure de bandes. Le modèle analytique est comparé aux simulations numériques mais également à des données expérimentales. Dans le papier de *Suket al* [Suk07], des nanofils "jumeaux" GAA circulaires ont été obtenus jusqu'à des diamètres d'environ 3nm.

Nous pouvons remarquer que les effets de structure de bandes limitent de façon non négligeable l'impact du confinement quantique sur la tension de seuil. Ceci est cohérent avec les équations 5.24 et 5.25. En augmentant les masses effectives, les niveaux quantifiés sont abaissés et donc le remplissage des sous-bandes est facilité. La tension de seuil du transistor diminue donc. La figure 5.4 met l'accent sur le fait que l'approximation de la masse effective est toujours valide pour des diamètres faibles mais les valeurs des masses doivent être modulées.

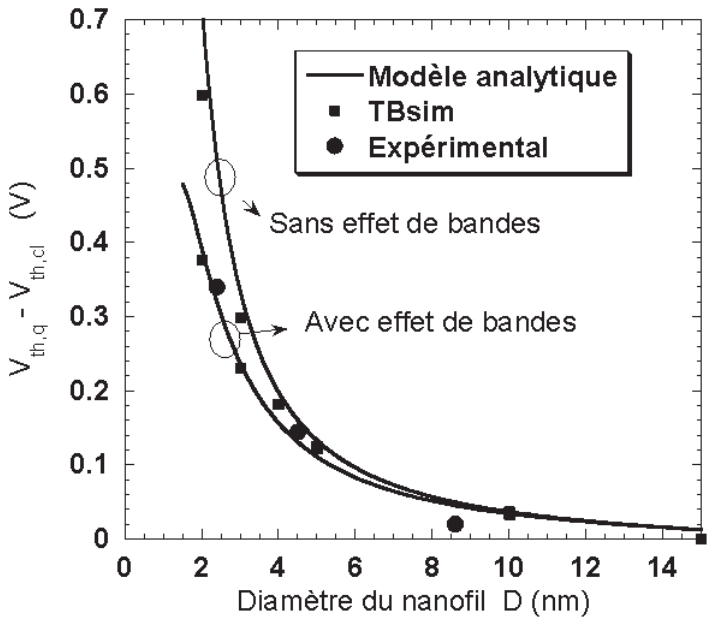


FIGURE 5.4: Différence entre la tension de seuil quantique ($V_{th,q}$) et la tension de seuil classique ($V_{th,cl}$) avec et sans effet de structure de bandes en fonction du diamètre du nanofil pour un transistor à canal long) ; Comparaison avec des résultats numériques issus de TB_Sim [Sar08] et des données expérimentales [Suk07].

5.2.5 Modélisation des effets canaux courts

Pour obtenir une modélisation analytique des effets de canal court, il est nécessaire d'avoir une description explicite du potentiel de surface et notamment sa variation suivant la direction du transport (axe z). D'un point de vue électrostatique, le contrôle du courant est déterminé par le maximum de la barrière énergétique qui correspond au minimum du potentiel de surface. L'objectif de cette partie est d'exprimer analytiquement ce potentiel de surface afin d'inclure les effets perturbatifs SCE et DIBL. L'approche développée ici suit les grandes lignes de la méthodologie proposée par *Suzuki et al* [Suz96] et revue par *Autran et al* [Aut04]. En appliquant la loi de Gauss sur une tranche du nanofil, l'équation suivante est obtenue :

$$-\zeta(z)\pi.\frac{D^2}{4}+\zeta(z+dz)\pi.\frac{D^2}{4}-\zeta_s(z)2\pi.\frac{D}{2}dx=-\frac{e.N_A.D}{2\varepsilon_{si}}.dz \tag{5.29}$$

où le champ électrique est approximé par l'expression suivante :

$$\zeta \simeq \langle\eta\rangle\frac{dV_s}{dx} \tag{5.30}$$

$\langle\eta\rangle$ est un paramètre qui inclut les effets de la variation du champ électrique latéral, paramètre qui dépend du dopage, de l'épaisseur de film est de l'épaisseur d'oxyde [Ban95].

Nous donnerons une expression analytique au moment des résultats.
En couplant les équations 5.29 et 5.5, nous obtenons :

$$\frac{d^2V_s}{dz^2} - 4\frac{C_{ox}}{\langle\eta\rangle.\varepsilon_{si}.D}.V_s = \frac{2}{\langle\eta\rangle.\varepsilon_{si}.D}.[e.N_A.\frac{D}{2} - 2.C_{ox}.(V_G - V_{FB} - \phi_F)] \tag{5.31}$$

La solution analytique de l'équation précédente est [Mun05] :

$$V_s = K_1.e^{\gamma z} + K_2.e^{-\gamma z} - \frac{K_3}{\gamma^2} \tag{5.32}$$

où tous les coefficients sont donnés par :

$$K_1 = \frac{(1 - e^{-\gamma L_c}).(V_{bi} + \frac{K_3}{\gamma^2}) + V_{DS}}{2.sh(\gamma.L_c)} \tag{5.33}$$

$$K_2 = \frac{(1 - e^{+\gamma L_c}).(V_{bi} + \frac{K_3}{\gamma^2}) + V_{DS}}{2.sh(\gamma.L_c)} \tag{5.34}$$

$$K_3 = \frac{2}{\langle\eta\rangle.\varepsilon_{si}.D}.[e.N_A.\frac{D}{2} - 2.C_{ox}.(V_G - V_{FB} - \phi_F)] \tag{5.35}$$

$$\gamma = \sqrt{\frac{4.C_{ox}}{\langle\eta\rangle.\varepsilon_{si}.D}} \tag{5.36}$$

$$V_{bi} = \frac{kT}{e}.ln\left(\frac{N_A.N_{SD}}{n_i^2}\right) \tag{5.37}$$

Afin de trouver le potentiel minimum z_{min}, la dérivée première de l'équation est fixée à zéro.

$$\frac{dV_s}{dz} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad z_{min} = \frac{1}{2.\gamma}.ln(\mid \frac{K_2}{K_1} \mid) \tag{5.38}$$

L'expression analytique du potentiel de surface minimum est alors :

$$V_s(x = x_{min}) = -\frac{K_3}{\gamma^2} + 2.\sqrt{K_1.K_2} \tag{5.39}$$

Nous supposons que le transistor change d'état quand le potentiel au seuil est égal au potentiel minimal que nous venons de décrire. En l'insérant dans l'équation 5.18, l'expression générale de la tension de seuil devient :

$$V_{th} = V_{FB} - \frac{\varepsilon_{si}}{C_{ox}}.D.C_{th} + \phi_F - \frac{K_3}{\gamma^2} + 2.\sqrt{K_1.K_2} \tag{5.40}$$

Par analogie avec l'approche de *Suzuki et al* [Suz96], nous pouvons distinguer deux termes. Le premier terme (indépendant de la longueur de canal) représente la tension de seuil pour

un transistor canal long $V_{th,long}$ et le deuxième correspond à la chute de la tension de seuil due aux effets canal court ΔV_{th}.

$$V_{th,long} = V_{FB} - \frac{\varepsilon_{si}}{C_{ox}}.D.C_{th} + \phi_F - \frac{K_3}{\gamma^2} \tag{5.41}$$

$$\Delta V_{th} = V_{th} - V_{th,long} = 2.\sqrt{K_1.K_2} \tag{5.42}$$

Au seuil, $V_G = V_{th}$ dans l'équation 5.35 et comme ΔV_{th} intervient dans K_1 et K_2, en développant l'expression, nous obtenons une équation du second ordre :

$$H_1.\Delta V_{th}^2 + H_2.\Delta V_{th} + H_3 = 0 \tag{5.43}$$

avec

$$H_1 = sh^2(\gamma.L_c) + 2.[1 - ch(\gamma.L_c)] \tag{5.44}$$

$$H_2 = 2.[1 - ch(\gamma.L_c)].[2.H_4 + V_{DS}] \tag{5.45}$$

$$H_3 = 2.H_4.[1 - ch(\gamma.L_c)].[H_4 + V_{DS}] + V_{DS}^2 \tag{5.46}$$

$$H_4 = V_{bi} - V_{th,long} + \phi_f + V_{FB} \tag{5.47}$$

La solution de la chute de tension de seuil s'exprime alors par :

$$\Delta V_{th} = \frac{-H_2 + \sqrt{H_2^2 - 4.H_1.H_3}}{2.H_1^2} \tag{5.48}$$

La dégradation de la tension de seuil due aux effets de canal court est représentée figure 5.5 pour des diamètres de nanofil de 2, 5 et 10nm. Les résultats ont été validés sur des simulations numériques de type TCAD [SIL] pour une structure cylindrique en utilisant une approche classique (modèle dérive-diffusion). La tension de seuil est extraite à partir des caractéristiques courant-tension en utilisant la méthode du courant constant. Ces résultats numériques nous ont servi à établir un modèle numérique pour le paramètre $\langle\eta\rangle$ incluant la dépendance en longueur de canal, diamètre du nanofil et en polarisation source-drain.

$$\langle\eta\rangle = \frac{D}{D + f_0} + V_{DS}.[f_1.L_c + f_2.L_c^2] \tag{5.49}$$

où f_0, f_1 et f_2 sont des paramètres calibrés sur les données numériques.

L'équation est valide pour une large gamme de diamètres (jusqu'à 2nm) et de longueur de canal (jusqu'à une longueur égale au diamètre du nanofil). Le résultat montre un bon accord entre le modèle analytique et les simulations numériques obtenues par TCAD. Au

vu des résultats, le nanofil paraît pertinent pour le contrôle électrostatique puisque les effets de canal court apparaissent peu pour un ratio longueur de canal sur diamètre valant deux. Si nous comparons aux autres architectures et pour un effet parasite équivalent, ce même ratio est deux fois plus fort pour un transistor MOSFET de type double-grille ou FDSOI optimisé [Col07].

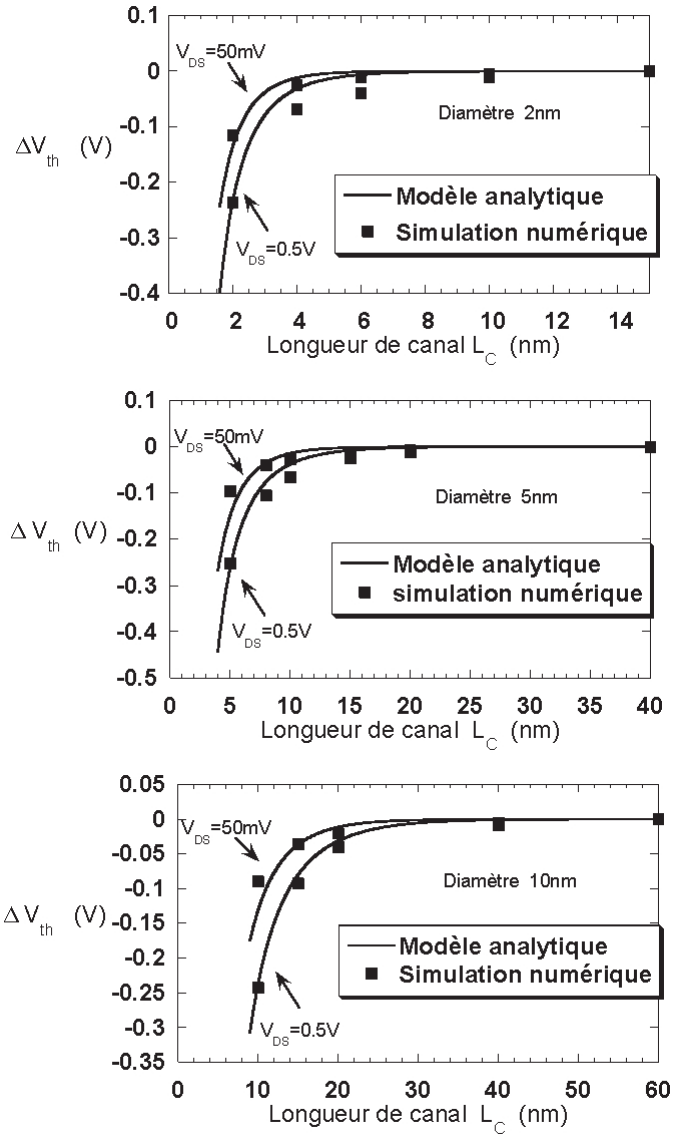


FIGURE 5.5: Chute de tension de seuil liée aux effets de canal court en fonction de la longueur de canal pour trois diamètres de nanofil différents (2, 5 et 10nm) et pour une polarisation de drain faible ($V_{DS} = 50mV$) et forte $V_{DS} = 0.5V$; Comparaison avec des résultats numériques TCAD [SIL].

De la même façon que *Suzukiet al* [Suz96], il est très simple d'obtenir une équation explicite pour l'expression de la pente sous le seuil en appliquant la définition de S (cf

figure 5.6) :

$$S = \frac{k_B T}{e}.ln(10).\left(\frac{dV_s}{dV_G}\right)^{-1} \tag{5.50}$$

$$\Rightarrow S = \frac{k_B T}{e}.ln(10).\left(1 + \frac{[1 - ch(\gamma L_c)].[2.\phi_s + V_{DS} + K_3/\gamma^2]}{2.sh(\gamma.L_c)^2.\sqrt{K_1.K_2)}}\right)^{-1} \tag{5.51}$$

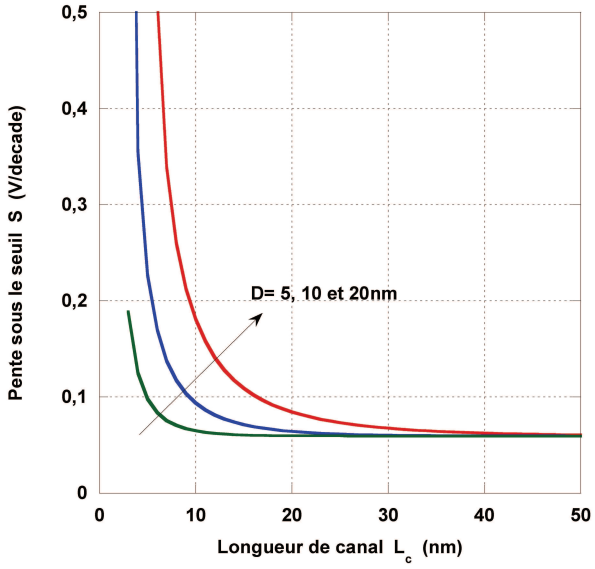


FIGURE 5.6: Evolution de la pente sous le seuil en fonction de la longueur de canal pour un nanofil de 5nm de diamètre et pour différentes polarisations de drain.

Impact des effets de confinement quantique sur les effets de canal court

Contrairement aux modèles standards qui traitent des effets de canal court [Ban95] [Suz96], ce modèle a la possibilité d'inclure les effets de confinement quantique. En effet, dans l'équation 5.47, le terme de tension de seuil canal long intervient et va impacter la chute de tension de seuil. Jusqu'ici la tension de seuil classique a été utilisée mais les effets de confinement quantiques et les effets de structure de bandes peuvent y être insérés.
La figure 5.7 montre l'impact du confinement et de la basse dimensionalité sur le SCE. La courbe trace la chute de tension de seuil pour une longueur de canal égale au diamètre du nanofil pour les trois approches : classique, quantique et quantique avec effet de structure de bandes. Les données quantiques avec effets de structure de bandes ont été validées avec le code CYLMOS (Poisson-Schrödinger couplé avec les équations de continuité afin d'obtenir le courant). Nous pouvons noter que les effets de confinement des porteurs tendent à limiter le SCE puisque le contrôle énergétique des porteurs est amélioré avec la quantification. L'énergie étant plus importante que dans l'approche classique, les porteurs sont

plus stables face à d'éventuelles perturbations. De plus, les effets de structure de bandes amplifient ce phénomène. Dans le modèle, le fait d'augmenter artificiellement la barrière énergétique (ie. la bande interdite) améliore le contrôle électrostatique indispensable pour s'affranchir des effets de canal court. Il est également important de noter que pour des nanofils ultra-minces, la chute de tension de seuil se rapproche de zéro. Le confinement est tel que les porteurs ne subissent quasiment plus la perturbation électrostatique des jonctions source et drain.

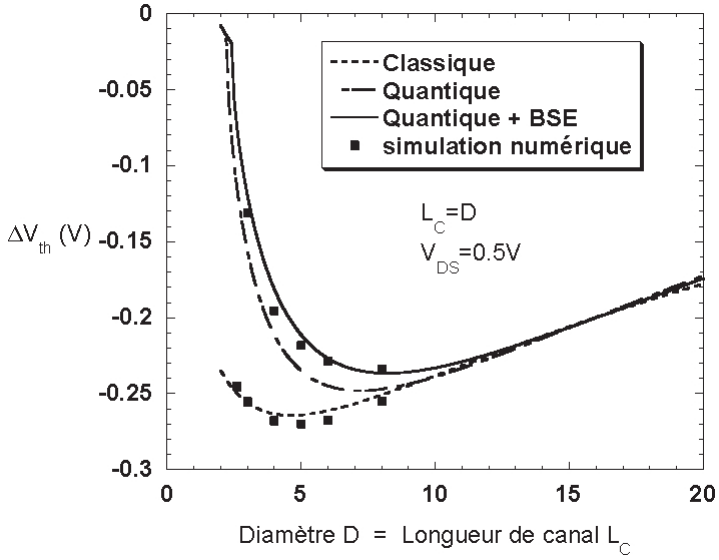


FIGURE 5.7: Impact du confinement quantique et des effets de structure de bandes sur le SCE. Chute de la tension de seuil liée aux effets de canal court en fonction du diamètre pour une longueur de canal égale au diamètre ; Comparaison avec des simulations numériques : TCAD pour le cas classique et CYLMOS pour le cas quantique avec BSE.

Conclusion de la partie II

Dans cette partie, nous avons fait un point sur les caractéristiques électrostatiques du transistor MOSFET à base de nanofil. Au regard du contexte et des enjeux économiques de la microélectronique, l'architecture même des transistors évolue constamment afin de suivre les recommandations de l'ITRS. Il en résulte que, pour permettre une forte intégration en s'affranchissant des effets parasites, le contrôle électrostatique de la zone active doit être amélioré ce qui se traduit par une augmentation du nombre de grilles du transistor. Suivant cette logique, l'architecture nanofil avec grille totalement enrobante apparaît comme la solution ultime pour les noeuds technologiques avancés.

Au regard des dimensions ciblées pour l'utilisation des nanofils (quelques nanomètres correspondant à quelques dizaines de couches atomiques), il est important de bien connaître la structure électronique du matériau et quelle sera son évolution lors de l'intégration géométrique. Pour cela, nous avons tout d'abord fait une étude de la structure avec un code de liaisons fortes sp^3 (TB_Sim). Cependant, vu le temps de calcul et pour une application microélectronique (effet d'une grille), ce code n'est pas adapté à des fils de plus de 5 nm. Nous avons donc fait des approximations supplémentaires afin de simplifier le problème numérique. L'approximation de la masse effective a été utilisée. De plus, nous avons considéré un système isotrope (indépendance vis-à-vis de l'angle du nanofil en coordonnées cylindriques) afin de rendre 1D la résolution de l'équation de Schrödinger (le long du rayon). Ceci est le coeur du code CYLMOS développé (Poisson 2D - Schrödinger 1D en coordonnées cylindrique). Toutefois, afin de vérifier la pertinence de l'approximation isotrope, des comparaisons avec un code Poisson-Schrödinger 2D en masse effective ont été faites. L'enchainement des trois codes permet donc de simplifier le problème tout en gardant une physique propre puisque les paramètres d'entrée importants pour l'approximation de la masse effective (énergie des sous-bandes et valeur des masses pour chaque vallée) ont été extraits du modèle de liaisons fortes et notamment leur évolution lors de l'amincissement du diamètre du nanofil de silicium.

Dans le dernier chapitre de cette partie, nous nous sommes penchés sur la modélisa-

tion analytique de l'électrostatique du MOSFET à nanofil à travers la tension de seuil. En effet, le but de ce travail est d'estimer les potentialités de l'architecture nanofil pour la microélectronique à tout niveaux : de la cellule unitaire jusqu'aux circuits. Des modèles dits compacts sont donc nécessaires dans l'optique d'aider les concepteurs à estimer les courants mis en jeu dans des circuits contenant plusieurs milliards de transistors. Un modèle de la tension de seuil a donc été développé en incluant tous les effets liés à l'intégration : effets de canaux courts, confinement quantique et effet de structure de bandes. Les masses effectives ont été modélisées analytiquement et calibrées sur le modèle de liaisons fortes. Le résultat montre que leur variation a un effet non-négligeable sur le confinement quantique comparé à un modèle utilisant uniquement les valeurs du matériau massif. Au niveau perturbation des performances due aux effets canal court, la nanofil permet de réduire la longueur de canal jusqu'à un facteur deux par rapport au diamètre sans forte chute de la tension de seuil. Le nanofil confirme donc son intérêt pour le contrôle électrostatique puisque ce rapport était de quatre pour les anciennes meilleures architectures : double-grille ou FDSOI optimisé. Dans la suite, nous allons nous intéresser au transport électronique qui est le second aspect susceptible d'affecter les performances d'un dispositif à nanofil.

Troisième partie

Étude et modélisation du transport électronique

Comme nous l'avons vu dans la partie 1, les approches utilisées pour l'étude du transport électronique peuvent être très diverses : de l'approche macroscopique simple jusqu'à l'étude de la trajectoire d'une particule. L'émergence de nouvelles méthodes est liée, comme pour l'électrostatique, d'une part à la réduction importante des dimensions qui affecte le transport et d'autre part au développement de nouvelles architectures comme exposé dans la partie 2 pour les transistors MOSFETs. Du fait d'une épaisseur de film de quelques nanomètres et de la présence de plusieurs électrodes de grille, la mobilité des porteurs va être impactée par rapport à celle du matériau massif. Dans le premier chapitre de cette partie 3, nous allons nous pencher sur la mobilité canal long du nanofil à grille totalement enrobante incluant les principaux mécanismes limitant la mobilité : les phonons, la rugosité de surface et l'interaction Coulombienne à distance due aux charges piégées dans l'empilement d'oxydes de grille lors des étapes de fabrication. Un code basé sur la formule de Kubo-Greenwood a été développé à cette occasion. Ainsi, une première étude peut être faite de façon prédictive notamment en ce qui concerne la réduction du diamètre du fil. D'autres paramètres ont également été regardés comme les paramètres technologiques (épaisseurs de l'empilement de grille ou bien la permittivité) afin d'optimiser la mobilité. Ensuite, dans le deuxième chapitre de cette partie, nous nous attarderons sur la modélisation compacte du transport électronique du transistor MOSFET à base de nanofil cylindrique et notamment sa prédictibilité quant à la réduction du diamètre et de la longueur de grille. Pour l'impact du diamètre, l'étude numérique faite dans le premier chapitre de cette partie nous permet de connaitre l'évolution de la mobilité via-à-vis de l'épaisseur du fil. Ceci va directement être inclus à travers un modèle analytique de mobilité pour le nanofil. Pour l'effet de la longueur de grille, généralement, une modélisation simple est précise à partir du moment où la mobilité des porteurs est parfaitement connue et surtout constante vis-à-vis des paramètres extérieurs. C'était jusqu'alors le cas pour des systèmes de grandes dimensions. Dans le cas du silicium massif, nous estimons qu'un porteur va subir une interaction tout les 10 nm. Le fait de grandes dimensions va moyenner ses interactions et il est alors possible d'extraire un paramètre macroscopique (la mobilité) de façon assez précise représentant des interactions locales. Cependant, aujourd'hui nous arrivons à des longueurs de grille de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres ce qui correspond à quelques interactions pour le porteur. La probabilité qu'un porteur ne subisse aucune interaction lors de son trajet est alors beaucoup plus importante. Par conséquent, de façon globale, nous estimons qu'en réduisant la longueur de grille, le nombre d'interactions va diminuer en moyenne sur l'ensemble des porteurs pour tendre vers un régime de transport théorique sans interaction appelé transport balistique. Il est alors possible de définir un régime transitoire où le nombre d'interactions n'est pas nul mais limité par rapport à un régime diffusif, appelé quasi-balistique. Ce dernier point doit évidemment être inclus

et validé dans le modèle compact. Enfin, la dernière section illustrera l'intérêt du modèle compact puisque nous présenterons le résultat de simulations de petits circuits à base de nanofils implémentés dans un environnement ELDO.

Chapitre 6

Étude numérique des mécanismes d'interactions

Sommaire

6.1 Calcul numérique de la mobilité par approche Kubo-Greenwood 104

6.1.1 Détermination du temps de relaxation des porteurs 104

6.1.2 Expression de la mobilité multi sous-bandes 107

6.2 Interaction "phonons" 108

6.3 Interaction "rugosité de surface" 111

6.4 Interaction "Coulombienne à distance" 115

6.4.1 Potentiel d'interaction Coulombien NON écranté 115

6.4.2 Potentiel d'interaction Coulombien écranté 118

6.5 Comparaison et validation sur données expérimentales 120

6.6 Résultats et discussions 122

6.6.1 Impact du diamètre du nanofil 122

6.6.2 Impact des paramètres technologiques 122

Avant toute modélisation ou application du transistor MOSFET à base de nanofil, il est important de comprendre les mécanismes d'interactions qui régissent le transport électronique. En effet, lors de son déplacement dans le réseau cristallin, un porteur subit des interactions susceptibles de perturber son état, entrainant une modification de sa vitesse voire de son énergie. Ces perturbations ont plusieurs origines : les interactions avec d'autres porteurs ou des impuretés, des imperfections du réseau ou simplement l'agitation thermique. Ceci explique notamment la grande différence que nous retrouvons générale-

ment entre les études théoriques de mobilité et les données expérimentales. Dans cette partie, nous allons nous intéresser aux principaux mécanismes d'interactions qui limitent le transport dans le nanofil à grille enrobante : les phonons, la rugosité de surface qui est importante dans l'architecture particulière du nanofil et enfin l'impact de charges piégées dans l'oxyde lors de la fabrication des dispositifs (RCS pour *Remote Coulomb Scattering*). L'interaction Coulombienne par les impuretés dans le canal n'est pas considérée car les transistors à nanofil sont généralement non dopés et elle a donc peu d'effet sur la mobilité totale [Zha10].
Le formalisme employé dans ce chapitre pour le calcul de la mobilité est celui basé sur la formule de Kubo-Greenwood. Nous le détaillerons dans la section 1 puis nous nous pencherons sur les probabilités d'interactions de chaque mécanisme considéré.

6.1 Calcul numérique de la mobilité par approche Kubo-Greenwood

Le calcul de la mobilité peut se faire de manière très variée. En effet, comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, il est possible de relier directement le terme de collision de l'équation de Boltzmann ou de Wigner avec les fréquences d'interaction qu'un porteur subit lors de son déplacement. Une résolution déterministe (lourde numériquement) ou une approche Monte-Carlo peuvent également nous donner une valeur de mobilité. Une approche plus rapide peut être utilisée en calculant de façon directe la mobilité. Il s'agit de l'approche Kubo-Greenwood. Cependant, cette approche ne peut être employée que pour un canal long avec un champ faible [Kub57] [Gre58].

6.1.1 Détermination du temps de relaxation des porteurs

Nous décrivons le transport (suivant l'axe z) le long du fil par l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m}\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial z} + \frac{e}{\hbar}\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial k} = [\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial t}]_{coll} \tag{6.1}$$

Le terme de droite est totalement dédié à la description des collisions dans le matériau. Il est donc indispensable de le décrire proprement en considérant certaines approximations sans modifier sa réelle signification. De façon générale, nous pouvons développer ce terme en fonction de $S_{k\to k'}$ qui définit la probabilité de passage d'un état $\mid$ n $\mathbf{k}$ $\rangle$ vers un état $\mid$

n' **k'** $\rangle$.

$$[\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial t}]_{coll} = -\sum_{k'} S_{k\to k'}.f(z,k,t).[1-f(z,k',t)] + \sum_{k'} S_{k'\to k}.f(z,k',t).[1-f(z,k,t)] \tag{6.2}$$

A champ faible, afin d'isoler la partie perturbative de la fonction de distribution, il convient de l'exprimer comme la somme d'une partie correspondant à son état d'équilibre f_0 et une partie liée à sa variation g.

$$f(z,k,t) = f_0(z,k,t) + g(z,k,t) \tag{6.3}$$

En remplaçant cette dernière expression dans l'équation 6.2 et en s'arrêtant au premier ordre en g, nous obtenons la relation suivante :

$$[\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial t}]_{coll} = -\sum_{k'}[S_{k\to k'}.g(z,k,t).[1-f_0(z,k',t)] - S_{k\to k'}.g(z,k',t).f_0(z,k,t)]$$

$$+\sum_{k'} S_{k'\to k}.[g(z,k',t).[1-f_0(z,k,t)] - g(z,k,t).f_0(z,k',t)] \tag{6.4}$$

où nous avons utilisé le principe de balance détaillée : à l'équilibre, nous savons que les collisions de l'état | n **k** $\rangle$ vers l'état | n **k'** $\rangle$ équivalent au mécanisme inverse (de l'état | n **k'** $\rangle$ vers l'état | n **k** $\rangle$). Ceci nous donne la relation :

$$S_{k\to k'}.f_0(z,k,t).[1-f_0(z,k',t)] = S_{k'\to k}.f_0(z,k',t).[1-f_0(z,k,t)] \tag{6.5}$$

En remplaçant le terme $S_{k'\to k}$ dans l'équation 6.4, nous obtenons l'expression du terme de collision suivante :

$$[\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial t}]_{coll} = -\sum_{k'}[S_{k\to k'}.\left(\frac{1-f_0(z,k',t)}{1-f_0(z,k,t)}\right).[g(z,k,t) - g(z,k',t).\frac{f_0(z,k,t)}{f_0(z,k',t)}.\frac{1-f_0(z,k,t)}{1-f_0(z,k',t)}]] \tag{6.6}$$

Il ne reste plus qu'à exprimer le terme de perturbation g. Pour cela, nous appliquons l'approximation du temps de relaxation à l'équation de Boltzmann. Il est donc possible d'exprimer le terme de collision en fonction du temps de relaxation des porteurs τ.

$$[\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial t}]_{coll} = -\frac{f(z,k,t)-f_0(z,k,t)}{\tau(k)} = -\frac{g(z,k,t)}{\tau(k)} \tag{6.7}$$

En remplaçant ce terme là dans l'équation de Boltzmann (équation 6.1), nous obtenons dans le cas stationnaire et dans l'hypothèse d'une fonction de distribution variant peu

selon l'axe de transport :

$$g(z,k,t) = -e.\tau(k).v(k).\frac{\partial U}{\partial z}.\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial E} \tag{6.8}$$

Une des propriétés de dérivation de la fonction de distribution par rapport à l'énergie est :

$$\frac{\partial f(z,k,t)}{\partial E} = \frac{1}{k_B T}.f_0(z,k,t)[1 - f_0(z,k,t)] \tag{6.9}$$

Finalement, la fréquence d'interaction des porteurs devient :

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{k'}[S_{k\to k'}.\left(\frac{1 - f_0(z,k',t)}{1 - f_0(z,k,t)}\right).[1 - \frac{\tau(k').v(k')}{\tau(k).v(k)}]] \tag{6.10}$$

Dans la suite de ce travail, nous simplifierons d'avantage cette expression. En effet, dans l'expression précédente, nous voyons que le temps de relaxation dépend de lui-même. Afin d'éviter numériquement des boucles de cohérence, nous considérerons que le terme $(1 - \frac{\tau(k').v(k')}{\tau(k).v(k)})$ (qui peut s'apparenter à un facteur angulaire) vaut 1 alors que théoriquement il peut prendre les valeurs proches de 0 ou 2 en fonction du type d'interaction (transmission ou rétrodiffusion). L'expression précédente se simplifie et devient :

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{k'} S_{k\to k'} \tag{6.11}$$

A partir de là, il ne reste plus qu'à exprimer la règle d'or de Fermi pour chaque mécanisme d'interaction pour déterminer la mobilité totale.
Afin de calculer la probabilité qu'un porteur passe de l'état $\mid \alpha$ j k $\rangle$ vers un état $\mid \alpha$' j' k' $\rangle$, une approche perturbative limitée au premier ordre est utilisée à travers la règle d'or de Fermi associée à l'approximation de Born [Coh95] [Sar09]. La probabilité que cet événement ait lieu est donc :

$$\left(\frac{1}{\tau(k)}\right)_{\alpha j,\alpha' j'} = \frac{2\pi}{\hbar}.\langle\varphi_{\alpha j} \mid \Upsilon \mid \varphi_{\alpha' j'}\rangle^2.\delta(E_{\alpha' j'} - E_{\alpha j} \pm \hbar\omega).\rho_k \tag{6.12}$$

où Υ est l'hamiltonien de la perturbation considérée.
Dans le cas où l'énergie n'est pas modifiée ($\hbar\omega = 0$), nous parlons d'interaction élastique alors que dans le cas contraire, l'interaction est inélastique.

6.1.2 Expression de la mobilité multi sous-bandes

Depuis le début de ce manuscrit, nous avons vu que le transport multi sous-bandes devient inévitable pour les noeuds technologiques actuels et d'autant plus pour l'architecture nanofil dont le confinement est renforcé par l'aspect 2D. Il est donc nécessaire de traiter l'ensemble des différentes vallées et des différentes sous-bandes (du moins celles de plus basses énergies) pour respecter les propriétés physiques de transport des porteurs dans le matériau.
Si on applique un champ électrique constant le long du nanofil, la mobilité des électrons de la bande j de la vallée α s'obtient par l'expression suivante :

$$\mu^{\alpha j} = lim_{E\to 0}\frac{I^{\alpha j}}{e.n_{\alpha j}.E} \tag{6.13}$$

où $n_{\alpha j}$ est la densité électronique de la bande j de la vallée α et $I^{\alpha j}$ le courant issu des électrons de cette bande.
En exprimant le courant à partir de la fonction de distribution exprimée précédemment :

$$I^{\alpha j} = \frac{e}{L_c}.\int dz \int dk f(z,k,t)v(k) \tag{6.14}$$

et en utilisant l'équation (6.8), il est alors possible d'exprimer la mobilité (en considérant le régime stationnaire et homogène suivant z) :

$$\mu^{\alpha j} = \frac{e.g_\alpha.g_s}{n^{\alpha j}.k_B T.\pi.\hbar\sqrt{2m_{eff}^{\alpha j}}}.\int_{E_{\alpha j}}^{\infty} dE.\tau_{\alpha j}(E).\sqrt{E-E_{\alpha j}}.\frac{1+2.\beta_n.(E_{\alpha j'}-E_{\alpha j})}{\sqrt{1+\beta_n(E_{\alpha j'}-E_{\alpha j})}}.f(E).[1-f(E)] \tag{6.15}$$

où g_α et g_s représentent respectivement la dégénérescence de la vallée α et du spin et $\tau_{\alpha j}$ le temps de relaxation du porteur dans la bande concernée. Ce temps de relaxation est l'inverse de la probabilité totale d'interaction qui est la somme de toutes les interactions possibles :

$$\frac{1}{\tau_{\alpha j}} = \sum_i \frac{1}{\tau_{\alpha j,i}} \tag{6.16}$$

La mobilité totale du système s'obtient en moyennant toutes les mobilités de chaque bande vis-à-vis de leur taux d'occupation :

$$\mu_{total} = \frac{1}{n_{tot}}.\sum_{\alpha j} n_{\alpha j}.\mu^{\alpha j} \tag{6.17}$$

où n_{tot} est la densité totale de porteurs.
Dans la suite, nous nous attacherons aux trois principales limitations du déplacement du porteur dans le nanofil de silicium ; à savoir les phonons, la rugosité de surface et

l'interaction Coulombienne à distance due aux charges piégées dans l'oxyde de grille. La structure électronique considérée est celle obtenue par le code CYLMOS (cf chapitre 4) avec l'approximation de la masse effective et un système isotrope (indépendance vis-à-vis de la coordonnée ϕ). Nous nous retrouvons donc avec un système à deux vallées : une longitudinale dégénérée deux fois et une transverse dégénérée quatre fois.

6.2 Interaction "phonons"

Lorsque la température est non nulle, les atomes du réseau ont la capacité de vibrer. Quand cela se produit, un "paquet" d'énergie est associé, appelé *phonon*. Les porteurs peuvent alors échanger de l'énergie avec le réseau soit en fournissant de l'énergie (émission d'un phonon) soit en absorbant cette énergie (absorption d'un phonon). Toutefois, l'activation de ces vibrations du réseau peut se faire de différentes manières et différents modes en résultent. Nous comptons notamment les phonons acoustiques, optiques et intervallées. De part leur différence de propagation dans le cristal, nous devons alors distinguer leur cas dans le traitement numérique. Dans cette section, nous exposerons succinctement la théorie du potentiel de déformation ainsi que les principales équations impliquées dans notre développement Kubo-Greenwood. L'interaction phonon est développée dans la littérature avec divers formalismes : taux d'interaction [Kot04] [Ram07] [Jin06] [Jin07], NEGF [Pol08] [Rog09] [Pal09] [Akh11], Wigner déterministe [Bar09] ou approche atomistique [Zha10] [Wan05] [Lui11] [Per08].

Interaction avec les phonons acoustiques

Du fait de la présence de phonons acoustiques, les mailles du réseau vont se distordre. Ceci a pour conséquence de créer un déplacement des atomes par rapport à l'équilibre représenté par le vecteur déplacement $\mathbf{u}$. Cette contrainte microscopique affecte les électrons en modifiant la structure de bande. On fait l'hypothèse que seule la position des niveaux d'énergie est altérée. Dans l'approximation du potentiel de déformation, il est alors possible de définir l'hamiltonien de l'interaction électron-phonon comme :

$$\Upsilon_{el-ph} = \Xi_{ac}.\nabla\mathbf{u} \tag{6.18}$$

où Ξ_{ac} est le potentiel de déformation pour les phonons acoustiques.
Dans le cas de modes de phonons quantifiés, nous pouvons écrire le déplacement (uniquement le déplacement longitudinal entre en jeu) comme :

$$\mathbf{u} = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho_c.\Omega.e.v_l}}.\left(a_q + a_{-q}^+\right)e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}}.\widehat{q} \tag{6.19}$$

où ρ_c est la densité volumique, Ω est le volume du système, v_l est la vitesse du son selon l'axe longitudinal, a_q et a^+_{-q} sont les opérateurs création et annihilation et $\widehat{q}$ est le vecteur unitaire défini par $\vec{q}/q$.

En considérant l'interaction comme élastique, il est alors possible d'écrire la probabilité de l'interaction avec un phonon acoustique en réinjectant l'expression de l'hamiltonien de la perturbation dans l'équation 6.12. Par conséquent, nous ne considérons ici que les transitions intravallées ($\alpha = \alpha'$). Nous obtenons :

$$\left(\frac{1}{\tau_{ac}(k)}\right)_{\alpha j,\alpha j'} = \frac{\Xi^2_{ac}.k_B.T}{\rho_c.\hbar^2.v_l^2}.\sqrt{2.m_z^\alpha}.F_{\alpha j,\alpha j'}.\frac{\Theta(E-E_{\alpha j'})}{\sqrt{E-E_{\alpha j'}}}.\frac{1+2.\beta_n.(E-E_{\alpha j'})}{\sqrt{1+\beta_n(E-E_{\alpha j'})}} \tag{6.20}$$

où β_n est le coefficient de non-parabolicité (permettant de corriger l'approximation des bandes paraboliques) et $F_{\alpha j,\alpha' j'}$ est l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde issues du code CYLMOS (cf chapitre 4) :

$$F_{\alpha j,\alpha' j'} = \int \varphi^2_{\alpha j}(r)\varphi^2_{\alpha' j'}(r)2\pi.r.dr \tag{6.21}$$

Il suffit alors de sommer cette probabilité sur toutes les sous-bandes pour avoir la probabilité totale :

$$\left(\frac{1}{\tau_{ac}(k)}\right)_{\alpha j} = \sum_{j'}\left(\frac{1}{\tau_{ac}(k)}\right)_{\alpha j,\alpha j'} \tag{6.22}$$

Rq : Le développement que nous venons d'exposer a été fait pour du matériau massif où la relation de dispersion des phonons est linéaire. Pour de petits diamètres de nanofil, ce n'est plus le cas et l'expression de la probabilité d'interaction est plus complexe [Sar09]. Dans notre étude, nous considérons les phonons du matériau massif.

Interaction intervallée

Pour le cas du silicium massif, le calcul de mobilité diffère des données expérimentales si on se limite aux seules interactions intravallées. Il est nécessaire de considérer les interactions intervallées induites par des phonons acoustiques ou optiques de grands vecteurs d'onde. Les porteurs peuvent alors complètement changer de vallées (phonon de type g pour la vallée de même direction et phonon de type f pour les vallées orthogonales).
Toutefois, contrairement à l'interaction acoustique, nous notons une variation d'énergie des porteurs qui est directement la conséquence de l'absorption ou de l'émission d'un phonon. Les phonons considérés ont une énergie de 63meV pour les phonons optiques et de 46 et 59meV pour les autres types de transitions intervallées. Comme pour les autres types de phonons, l'interaction avec les phonons intervallées est caractérisée par un potentiel

de déformation Ξ_{iv}. L'expression de la probabilité d'interaction est donc développée en considérant maintenant le changement de vallée.

$$\left(\frac{1}{\tau_{iv}(k)}\right)_{\alpha j} = \frac{\Xi_{iv}^2.\sqrt{m_z^\alpha}}{\sqrt{2}.\rho_c.E_{iv}}.(N_{iv}+1).\sum_{\alpha',j'} F_{\alpha j,\alpha' j'}.\frac{\Theta(E-E_{\alpha' j'}-E_{iv})}{\sqrt{E-E_{\alpha' j'}-E_{iv}}}.\frac{1+2.\beta_n.(E-E_{\alpha' j'}-E_{iv})}{\sqrt{1+\beta_n(E-E_{\alpha' j'}-E_{iv})}}$$

$$+\frac{\Xi_{iv}^2.\sqrt{m_z^\alpha}}{\sqrt{2}.\rho_c.E_{iv}}.N_{iv}.\sum_{\alpha',j'} F_{\alpha j,\alpha' j'}.\frac{\Theta(E-E_{\alpha' j'}+E_{iv})}{\sqrt{E-E_{\alpha' j'}+E_{iv}}}.\frac{1+2.\beta_n.(E-E_{\alpha' j'}+E_{iv})}{\sqrt{1+\beta_n(E-E_{\alpha' j'}+E_{iv})}} \quad (6.23)$$

Le premier terme de l'équation correspond à l'émission d'un phonon alors que la deuxième partie fait référence à l'absorption. E_{iv} correspond à l'énergie du phonon. Pour le cas du silicium, E_{iv} est égal à 63 meV. N_{iv} représente le nombre de phonons à l'énergie E_{opt} défini par la statistique de Bose-Einstein :

$$N_{iv} = \frac{1}{e^{\frac{E_{iv}}{k_B.T}} - 1} \quad (6.24)$$

A cela il faut considérer la dégénérescence des vallées qui rend les transitions de type g comme intravallée mais avec variation d'énergie. Il faut donc multiplier l'expression précédente par le symbole de Kronecker $\delta_{\alpha\alpha'}$ pour les interactions avec phonons de type g et par $2(1-\delta_{\alpha\alpha'})$ pour les interactions avec phonons de type f.

Rq : Il a été montré que, pour obtenir un bon accord entre mobilités expérimentales et théoriques sur une large gamme de température, il fallait considérer des phonons d'énergie plus faibles [Fer76]. Le développement mathématique présenté ci-dessus donne un élément de matrice nul. Ferry a proposé d'utiliser l'ordre supérieur, c'est pourquoi ces interactions sont appelés interactions intervallées d'ordre 1. Dans notre cas, pour des températures ambiantes, nous négligeons ce terme.

La figure 6.1 montre les fréquences d'interaction avec les phonons en fonction de l'énergie du porteur pour les vallées longitudinale et transverse. Nous distinguons les cas phonons acoustiques et optiques. Dans la simulation, le potentiel de déformation des phonons acoustique est pris égal à $\Xi_{ac} = 14.6eV$ alors que pour les cas des différentes transitions intervallées (de type f ou g), les valeurs de Ξ_{iv} sont prises d'après Jacoboni et Reggiani [Jac83].

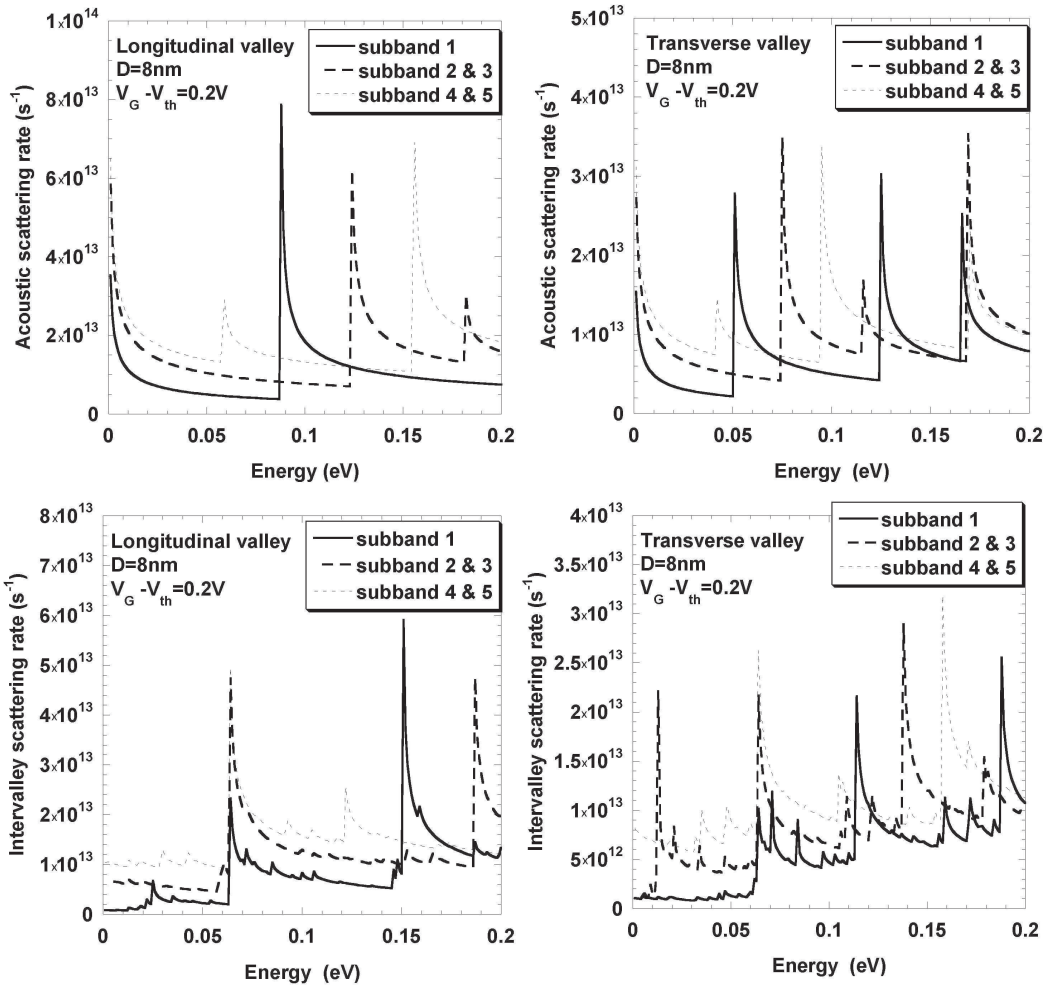


FIGURE 6.1: Fréquences d'interaction avec un phonon acoustique ou intervallée en fonction de l'énergie du porteur et pour les cinq premières sous-bandes des vallées longitudinale et transverse.

6.3 Interaction "rugosité de surface"

Un autre facteur limitant de la mobilité est dû au fait que l'interface entre deux matériaux (dans notre cas, le film de silicium et l'oxyde de grille) n'est pas parfaite. En pratique, les procédés de fabrication créent des aspérités qui interagissent avec le déplacement des porteurs et qui sont responsables d'une réduction de mobilité. Il est à noter que cette limitation concerne donc les porteurs qui se situent près de l'interface. La réduction des épaisseurs de film accentue alors cet effet.

Concrètement, la rugosité se représente comme une modification de la section du nanofil ce qui va entrainer une fluctuation du potentiel électrostatique, de la densité électronique, des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde associées. Ce sont ces fluctuations qu'il va falloir considérer à travers l'élément de matrice $V_{SR}(\alpha j; \alpha j')$. Cette rugosité est modélisée de manière empirique par une série de Fourier de la variation du rayon du

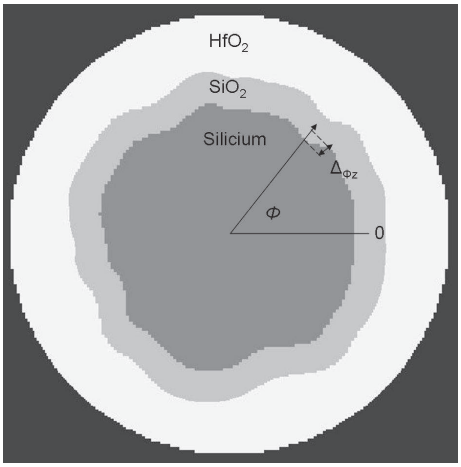


FIGURE 6.2: Schéma d'une coupe transverse du nanofil représentant la rugosité de surface à l'interface Si/SiO_2.

nanofil :

$$\Delta_{\phi z} = \sum_{l,q} \widehat{\Delta}_{lq}.e^{i(l\phi+qz)} \tag{6.25}$$

où $\Delta_{\phi z}$ représente la variation de la surface au point défini par la coordonnée selon le transport z et l'angle ϕ.

La densité spectrale qui intervient dans le calcul des fréquences d'interaction est directement reliée à la fonction de corrélation spatiale de $\Delta_{\phi z}$:

$$\left\langle \mid S_{lq} \mid^2 \right\rangle = L_c.\langle|\widehat{\Delta}_{lq}|^2\rangle \tag{6.26}$$

Cependant, il existe différentes modélisations pour cette fonction. Les deux principales sont celle d'Ando [And82] de type gaussien ou celle de Goodnick [Goo85] de type exponentiel. Afin d'être au plus proche des mesures expérimentales, le modèle proposé par Goodnick sera utilisé. La densité spectrale s'exprime alors :

$$\left\langle \mid S_{lq} \mid^2 \right\rangle = \frac{\Delta^2.\Lambda^2}{D}\left[1+\frac{\Lambda^2}{2}\left(\frac{l^2}{D^2}+q^2\right)\right]^{-3/2} \tag{6.27}$$

Les paramètres Δ et Λ correspondent respectivement à la moyenne quadratique de la rugosité et à la longueur de corrélation.
Afin d'obtenir l'élément de matrice représentant la perturbation, il est nécessaire de repartir de l'équation de Schrödinger. Nous allons maintenant exposer les principaux résultats qui vont permettre d'exprimer la fréquence d'interaction. Le détail des calculs peut se retrouver dans [Jin07] pour un nanofil à section circulaire et dans [Sar09] pour une section carrée. Il est à noter que contrairement à l'interaction avec les phonons, il n'y a pas

d'échange d'énergie avec la surface. De plus, la variation spatiale de la rugosité est trop faible pour permettre un changement de vallée lors de l'interaction.
L'élément de matrice dû à l'interaction de la rugosité de surface s'écrit :

$$V_{SR}(\alpha j;\alpha' j') = \delta_{\alpha\alpha'}(\Gamma^{GPN}_{\alpha j,\alpha j'} + \Gamma^{q}_{\alpha j,\alpha j'}).\langle|\widehat{\Delta}_{l_{jj'}q\pm}|\rangle \tag{6.28}$$

où $l_{jj'}$ est la différence des moments angulaires entre les sous-bandes initiales et finales $l_{jj'} = l_j - l_{j'}$ et $q\pm$ est la différence de vecteur d'onde entre les états initiaux et finaux (- pour les interactions transmises et + pour les interactions rétroréfléchies).

Le terme $\Gamma^{GPN}_{\alpha j,\alpha j'}$, appelé terme Généralisé de Prange-Nee, réunit toutes les conséquences du fait de la variation de la surface. Ainsi, il est constitué de trois termes :

- Fluctuation des nivaux d'énergie due au changement de la section du nanofil (1° terme)
- Fluctuation des fonctions d'onde (2° terme)
- Impact du champ électrique (3° terme)

L'expression de $\Gamma^{GPN}_{\alpha j,\alpha j'}$ est :

$$\begin{aligned}\Gamma^{GPN}_{\alpha j,\alpha j'} = \int_0^\infty dr.\frac{r}{D}.(E_{\alpha j'} - E_{\alpha j}).\varphi_{\alpha j}.\left(\varphi_{\alpha j'} + r.\frac{\partial\varphi_{\alpha j'}}{\partial r}\right)\\ +\frac{\hbar^2}{m_{eff}}.\int_0^\infty dr.\frac{r}{D}.\frac{\partial\varphi_{\alpha j}}{\partial r}.\frac{\partial\varphi_{\alpha j'}}{\partial r}\\ +\int_0^\infty dr.\frac{r}{D}.\left(-\frac{\partial V}{\partial r}\right).r.\varphi_{\alpha j}.\varphi_{\alpha j'}\end{aligned} \tag{6.29}$$

Le terme $\Gamma^{q}_{\alpha j,\alpha j'}$, quant à lui, provient de la fluctuation de la charge causée par la rugosité. En effet, la redistribution de la charge se met en place en respectant toujours l'équation de Poisson ce qui va avoir tendance à atténuer les effets précédemment cités. Ce phénomène s'appelle l'écrantage.
Le terme $\Gamma^{q}_{\alpha j,\alpha j'}$ est lié aux interactions Coulombiennes entre les charges accumulées dans le silicium qui vont impacter la redistribution des porteurs. Il est défini par :

$$\Gamma^{q}_{\alpha j,\alpha j'} = 2\pi.\int_0^\infty dr.r.\varphi_{\alpha j}.\varphi_{\alpha j'}.V^{T}_{l_{jj'}q\pm}(r) \tag{6.30}$$

où le potentiel de perturbation $V^T(r)$ est la somme de deux termes ; le premier $(V^n(r))$ lié à la redistribution de la densité de charges dû au changement de section et le deuxième

$(V^{\sigma}(r))$ due au décalage de la polarisation.

$$V_{lq}^{T}(r) = V_{lq}^{n}(r) + V_{lq}^{\sigma}(r) \tag{6.31}$$

avec

$$V_{lq}^{n}(r) = -e.\int_{0}^{\infty} dr'.r'.V_{lq}(r).\left[\frac{2n_{tot}(r')}{r_s} + \frac{r'}{r_s}.\frac{\partial n_{tot}(r')}{\partial r'}\right] \tag{6.32}$$

$$V_{lq}^{\sigma}(r) = \frac{\varepsilon_{Si} - \varepsilon_{SiO2}}{\varepsilon_{SiO2}}.\frac{\varepsilon_{si}}{e}.r_s.\frac{\partial V(r_s)}{\partial r}.\frac{\partial V_{lq}(r)}{\partial r}\mid_{r'=r_s} \tag{6.33}$$

où nous rappelons que le terme V_{lq} est la composante de Fourier du potentiel non perturbé.

Ainsi, la probabilité d'interaction liée à la rugosité de surface avec écrantage s'écrit alors :

$$\left(\frac{1}{\tau_{SR}(k)}\right)_{\alpha j} = \frac{L_c.\sqrt{2.m_z^{\alpha}}}{\hbar^2}.\left\langle \mid \widehat{\Delta}_{l_{jj'}q\pm} \mid^2 \right\rangle.\sum_{j'}\left(\Gamma_{\alpha j,\alpha j'}^{GPN} + \Gamma_{\alpha j,\alpha j'}^{q}\right)^2.\frac{\Theta(E-E_{\alpha j'})}{\sqrt{E-E_{\alpha j'}}}.\frac{1+2.\beta_n.(E-E_{\alpha j'})}{\sqrt{1+\beta_n(E-E_{\alpha j'})}} \tag{6.34}$$

La figure 6.3 montre les fréquences d'interaction avec la rugosité de surface en fonction de l'énergie du porteur pour les vallées longitudinale et transverse. Dans la simulation, la valeur des paramètres de rugosité est extraite à partir de caractérisation TEM (*Transmission Electron Microscopy*) d'interface Si/SiO_2. Δ vaut 0.25nm tandis que Λ est pris égal à 1.3nm.

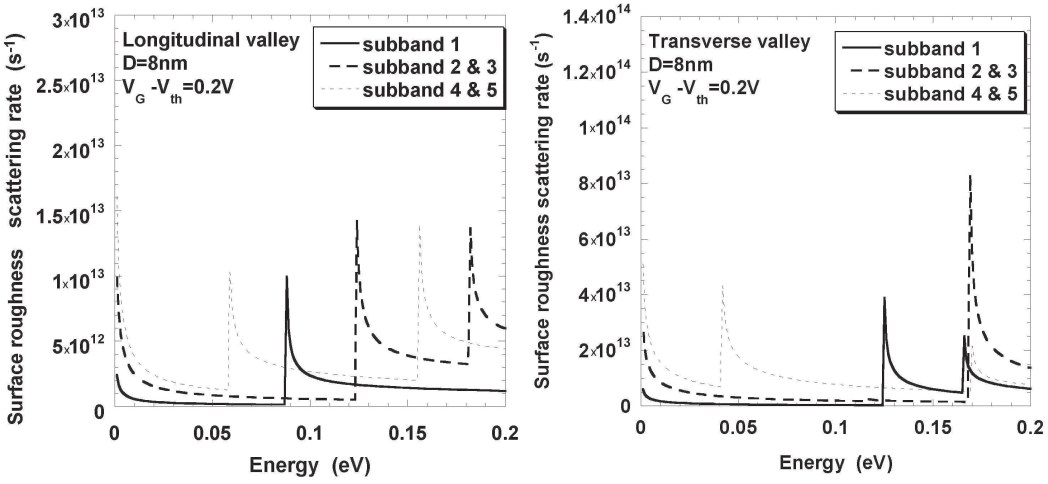


FIGURE 6.3: Fréquences d'interaction pour la rugosité de surface en fonction de l'énergie du porteur et pour les cinq premières sous-bandes des vallées longitudinale et transverse.

6.4 Interaction "Coulombienne à distance"

Comme nous l'avons évoqué dans le chapitre 3, les technologies CMOS actuelles utilisent un empilement de grille constitué d'un oxyde interfacial sur lequel repose un couche de diélectrique à haute permittivité. Cependant, à la sortie de son processus de fabrication, le composant à base de nanofil présente des impuretés ionisées qui vont altérer le déplacement des porteurs dans le canal. Que ce soit volontaire comme la présence de dopants dans le canal ou involontaire comme les impuretés piégées dans l'oxyde de grille, un potentiel Coulombien centré sur la position de la charge se mêle à l'énergétique du système en la modifiant. Dans le cas du nanofil, vu le faible dopage du canal, il a été montré que l'interaction liée aux dopants n'est pas un facteur limitant pour la mobilité [Zha10]. Dans cette partie, nous allons donc nous concentrer sur l'interaction Coulombienne à distance (*Remote Coulomb Scaterring RCS*) due aux charges piégées dans l'oxyde de grille. L'empilement considéré par la suite est constitué d'une couche interfaciale de SiO_2, du HfO_2 pour le diélectrique à haute permittivité puis le métal. L'oxyde d'hafnium est généralement le plus utilisé et étudié grâce à sa stabilité thermique et son faible courant de fuite [Wil00] [Cal01] [Ber06].

6.4.1 Potentiel d'interaction Coulombien NON écranté

Dans notre formalisme à coordonnées cylindriques, nous avons exprimé le potentiel dans toute la zone active du nanofil, solution de l'équation de Poisson.

$$V(r,\phi,z) = \frac{1}{2\pi L_c}\sum_{l,q} V_{lq}(r).e^{il\phi}.e^{iqz} \tag{6.35}$$

Dans le cas d'une interaction Coulombienne à distance générée par une charge unique dans l'oxyde de grille (localisée en r_c), chaque composante de Fourier (lq) est liée à la fonction de Green G_{lq}.

$$V_{lq}(r) = -\frac{e}{\epsilon_{Si}}.G_{lq}(r,r_c) \tag{6.36}$$

L'élément de matrice de la perturbation causée par un seul centre Coulombien de charge Q est défini alors par :

$$V^C_{\alpha j,\alpha j'} = \frac{Q^2}{L_c.\epsilon_{Si}}.\int_0^\infty dr.r.\varphi_{\alpha j}(r).\varphi_{\alpha j'}(r).G_{l_{jj'}q\pm}(r,r_c) \tag{6.37}$$

où $l_{jj'}$ représente la différence des moments angulaires entre la sous-bande finale et la sous-bande initiale. L'intérêt est donc de simplifier la dépendance angulaire de la fonction d'onde puisque uniquement sa partie radiale est utilisée.

Il est alors possible d'exprimer l'élément de matrice du système global en intégrant ce terme sur l'ensemble des charges Coulombiennes :

$$I^C_{\alpha j,\alpha j'} = 2\pi.L_c.\int_0^\infty dr_c.r_c.n_c(r_c).\mid V^C_{\alpha j,\alpha j'}\mid^2 \tag{6.38}$$

où $n_c(r_c)$ est la densité de centres Coulombiens suivant l'axe r. Cette formule néglige les effets de corrélations possibles entre les centres Coulombiens qui tendent à réduire l'élément de matrice de la perturbation [Ess03].

Comme précédemment, nous obtenons la probabilité d'interaction en injectant cet élément de matrice dans l'expression générale de la règle d'or de Fermi :

$$\left(\frac{1}{\tau_{RCS}(k)}\right)_{\alpha j} = \frac{L_c.\sqrt{2.m_{eff}}}{\hbar^2}.\sum_{j'} I^C_{\alpha j,\alpha j'}.\frac{\Theta(E-E_{\alpha j'})}{\sqrt{E-E_{\alpha j'}}}.\frac{1+2.\beta_n.(E-E_{\alpha j'})}{\sqrt{1+\beta_n(E-E_{\alpha j'})}}$$

Le seul terme restant à déterminer est donc la fonction de green $G_{lq}(r,r_c)$ représentant le potentiel de perturbation de la charge localisée en r_c et satisfaisant l'équation de Poisson. Il est donc nécessaire d'obtenir une expression explicite et analytique de cette fonction de Green. L'équation de Poisson en coordonnées cylindriques dans le cas sans écrantage s'écrit considérant une charge ponctuelle en r_c :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}.\frac{\partial}{\partial r}-q^2-\frac{l^2}{r^2}\right)G_{lq}(r,r_c) = \frac{\gamma}{r_c}.\delta(r-r_c) \tag{6.39}$$

où γ dépend de la position de la charge (1 pour une charge dans le silicium et $\epsilon_{si}/\epsilon_{ox}$ pour une charge dans l'un des oxydes).

Il ne suffit plus qu'à résoudre cette dernière équation couplée aux conditions aux limites du système. La fonction de Green, à l'instar d'un potentiel, doit être continue dans tout le système et nulle au niveau de la grille métallique. De plus, la conservation du flux électrique donne des conditions aux limites supplémentaires. Dans le cas d'un empilement de grille SiO_2/HfO_2/métal, les équations à vérifier sont :

$$\epsilon_{Si}.\frac{\partial G_{lq}(r_s^-,r_c)}{\partial r} = \epsilon_{SiO_2}.\frac{\partial G_{lq}(r_s^+,r_c)}{\partial r} \tag{6.40}$$

$$\epsilon_{SiO_2}.\frac{\partial G_{lq}(r_{ox}^-,r_c)}{\partial r} = \epsilon_{HfO_2}.\frac{\partial G_{lq}(r_{ox}^+,r_c)}{\partial r} \tag{6.41}$$

$$\frac{\partial G_{lq}(r_c^+,r_c)}{\partial r} - \frac{\partial G_{lq}(r_c^-,r_c)}{\partial r} = \frac{1}{r_c}.\frac{\epsilon_{Si}}{\epsilon_{HfO_2}} \tag{6.42}$$

où les notations r_i sont définies sur la figure 6.4.

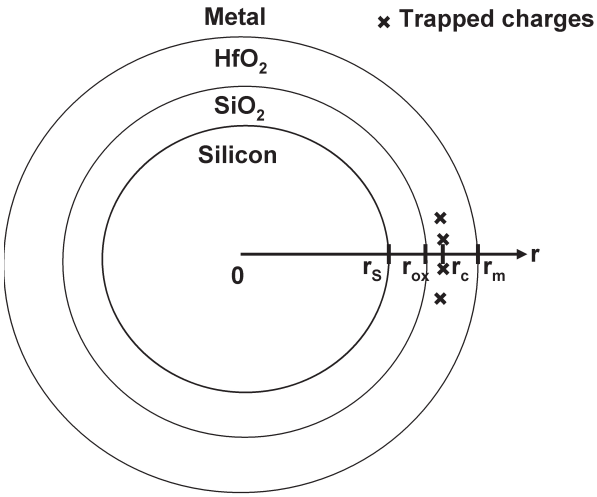


FIGURE 6.4: Schéma d'une coupe transverse du nanofil représentant l'empilement à double oxyde utilisé ; Définition des différentes notations : r_s : interface Si/SiO_2, r_{ox} : interface $Si0_2/HfO_2$, r_m : interface HfO_2/métal, r_c : position des charges.

La forme de la fonction de Green est donnée grâce à la résolution de l'équation de Poisson en utilisant les fonctions de Bessel modifiées d'ordre 0 (I) et d'ordre 1 (K). Nous retrouvons là un autre avantage de l'utilisation de coordonnées cylindriques puisque la résolution de l'équation de Poisson se fait de façon exacte contrairement au cas 2D cartésien où aucune solution analytique existe. Nous pouvons distinguer deux cas dans la résolution de l'équation de Poisson en fonction de la position de la charge : dans le silicium et dans l'oxyde. Bien que nous nous intéressons uniquement à l'interaction Coulombienne à distance (avec charge dans l'oxyde), la résolution du potentiel avec charge dans le silicium nous servira par la suite. Tout d'abord, voyons le cas où la charge est dans l'oxyde.

Résolution de Poisson considérant la charge dans l'oxyde

Dans cette configuration, la fonction de Green s'écrit :

$$G_{lq}(r,r_c) = \begin{cases} A_{NE}.I_l(qr), & 0 < r < r_s \\ B_{NE}.I_l(qr) + C_{NE}.K_l(qr), & r_s < r < r_{ox} \\ D_{NE}.I_l(qr) + E_{NE}.K_l(qr), & r_{ox} < r < r_c \\ F_{NE}.I_l(qr) + H_{NE}.K_l(qr), & r_c < r < r_m \end{cases} \tag{6.43}$$

Nous avons donc un système de 7 équations à 7 inconnues. La résolution de ce système donne l'expression des constantes (A_{NE}, B_{NE}, C_{NE}, D_{NE}, E_{NE}, F_{NE} et H_{NE}) de la fonction de Green non écrantée (la notation utilisée est $I_x = I_l(q.r_x)$ et I'_x est sa dérivée

par rapport au rayon).

$$\begin{pmatrix} I_s & -I_s & -K_s & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_{ox} & K_{ox} & -I_{ox} & -K_{ox} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_c & K_c & -I_c & -K_c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0I_m & K_m & \\ \epsilon_{Si}I_s^{'} & -\epsilon_{SiO_2}I_s^{'} & -\epsilon_{SiO_2}K_s^{'} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{SiO_2}I_{ox}^{'} & \epsilon_{SiO_2}K_{ox}^{'} & -\epsilon_{HfO_2}I_{ox}^{'} & \epsilon_{HfO_2}K_{ox}^{'} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -I_c^{'} & -K_c^{'} & I_c^{'} & K_c^{'} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} A_{NE} \\ B_{NE} \\ C_{NE} \\ D_{NE} \\ E_{NE} \\ F_{NE} \\ H_{NE} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\epsilon_{Si}}{\epsilon_{HfO_2}} . \frac{1}{r_c} \end{pmatrix} \tag{6.44}$$

Résolution de Poisson considérant la charge dans le silicium

Dans ce cas là, seule la forme de la fonction de Green est modifiée. Les équations de continuité et les conditions aux limites restent inchangées. Dans le cas d'un double oxyde, la solution est :

$$G_l(r, r_c) = \begin{cases} A_{NE}^{'}.I_l(qr), & 0 < r < r_c \\ B_{NE}^{'}.I_l(qr) + C_{NE}^{'}.K_l(qr), & r_c < r < r_s \\ D_{NE}^{'}.I_l(qr) + E_{NE}^{'}.K_l(qr), & r_s < r < r_{ox} \\ F_{NE}^{'}.I_l(qr) + H_{NE}^{'}.K_l(qr), & r_{ox} < r < r_m \end{cases} \tag{6.45}$$

La résolution se fait de la même manière que le cas précédent en adaptant les conditions aux limites.

6.4.2 Potentiel d'interaction Coulombien écranté

Comme pour l'écrantage de la rugosité de surface, le potentiel supplémentaire introduit par la présence de charges piégées est partiellement atténué par la charge d'inversion du canal du transistor. Pour inclure cet effet dans la modélisation numérique du RCS, nous devons réécrire proprement le potentiel dans le film de silicium incluant la perturbation (créant un potentiel V) et la charge d'écrantage (générant un potentiel induit V_{ind}). Le potentiel total s'écrit donc :

$$\widehat{V}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V_{ind}(\vec{r}) = -\frac{e}{\epsilon_{Si}} . \frac{1}{2\pi L_c} \sum_{lq} \widehat{G}_{lq}(\vec{r}) . e^{il\phi} . e^{iqz} \tag{6.46}$$

où $\widehat{G}$ est la fonction de Green écrantée.
La charge d'écrantage est obtenue en utilisant l'approximation de Debye-Hückel qui nous

donne la paramètre d'écrantage [Ess03] [Fis93].

$$S_e = \frac{e}{2\epsilon_{Si}}.\frac{\partial n_{tot}}{\partial \eta_F} \tag{6.47}$$

où n_{tot} est la densité totale de porteurs (en m^{-1}) et E_F est l'énergie de Fermi.
Une charge piégée dans l'oxyde de grille induit donc une variation de charge dans le canal qui est proportionnelle au potentiel :

$$\Delta Q = -2\epsilon_{Si}.S_e.\langle \widehat{V} \rangle \tag{6.48}$$

où ΔQ est exprimée en C.m^{-1}.
Dans la suite, au lieu d'intégrer la charge le long du rayon du nanofil, nous considérons la charge comme un Dirac à la position r_{max} où la densité de charge est maximale [Yok86].

$$\Delta Q = -2\epsilon_{Si}.S_e.\widehat{V}(r_{max}) \tag{6.49}$$

Donc la charge est sur un cylindre de rayon r_{max}.

$$\rho_{ind}(r) = \frac{\delta(r - r_{max})}{2\pi r_{max}}.\Delta Q \tag{6.50}$$

$$\Rightarrow \rho_{ind}(r) = \frac{\delta(r - r_{max})}{2\pi r_{max}}.(-2\epsilon_{Si}.S_e).(-\frac{e}{\epsilon_{Si}}.\frac{1}{2\pi L_c}\sum_{lq}\widehat{G}_{lq}(r_{max}).e^{il\phi}.e^{iqz}) \tag{6.51}$$

Dans cette expression, nous identifions chaque composante de Fourier à celle d'une charge localisée en r_{max} multiplié par un facteur $\frac{S_e}{\pi}.\widehat{G}_{lq}(r_{max})$. Par analogie avec le cas non écranté, le potentiel induit associé à cette densité de charge vaut :

$$V_{ind}(r) = -\frac{e}{\epsilon_{Si}}.\frac{1}{2\pi L_c}\sum_{lq}\frac{S_e}{\pi}.\widehat{G}_{lq}(r_{max}).G_{lq}(r, r_{max}).e^{il\phi}.e^{iqz} \tag{6.52}$$

Finalement, le potentiel total incluant les effets d'écrantage s'écrit :

$$\widehat{V}(r) = -\frac{e}{\epsilon_{Si}}.\frac{1}{2\pi L_c}\sum_{lq}[G_{lq}(r, r_c) + \frac{S_e}{\pi}.\widehat{G}_{lq}(r_{max}).G_{lq}(r, r_{max})].e^{il\phi}.e^{iqz} \tag{6.53}$$

Pour résumer, une correction est faite sur la fonction de Green :

$$\widehat{G}_{lq}(r) = G_{lq}(r, r_c) + \frac{S_e}{\pi}.\widehat{G}_{lq}(r_{max}).G_{lq}(r, r_{max}) \tag{6.54}$$

A la position $r = r_{max}$, $\widehat{G}_{lq}(r_{max})$ est une solution particulière de $\widehat{G}_{lq}(r)$ donc nous nous plaçons à cette position précise dans l'équation précédente pour trouver cette solution

particulière :

$$\widehat{G}_{lq}(r_{max}) = \frac{G_{lq}(r_{max}, r_c)}{1 - \frac{S_e}{\pi}.G_{lq}(r_{max}, r_{max})} \tag{6.55}$$

En réinjectant cette expression dans l'équation 6.54, nous trouvons l'expression du potentiel écranté pour une charge piégée en r_c :

$$\widehat{G}_{lq}(r) = G_{lq}(r, r_c) + \frac{\frac{S}{\pi}.G_{lq}(r, r_{max}).G_{lq}(r_{max}, r_c)}{1 - \frac{S_e}{\pi}.G_{lq}(r_{max}, r_{max})} \tag{6.56}$$

Le signe "moins" au dénominateur ne pose pas de problème puisque, selon nos définitions, la fonction de Green G est négative.

La figure 6.5(a) montre la fonction de Green écrantée ou non écrantée en fonction de la position sur le rayon du nanofil pour différents vecteurs d'onde et pour une charge située à l'interface entre la couche interfaciale (SiO_2) et le diélectrique haute permittivité (dans notre cas du HfO_2). La figure 6.5(b) montre les fréquences d'interaction RCS en fonction de l'énergie du porteur pour la première bande de la vallée transverse entre les cas écranté et non-écranté. Les valeurs des permittivités des oxydes sont prises de façon standard (3.9 pour le SiO_2 et 18 pour le HfO_2). La concentration de charges piégées dans l'oxyde est fixée à 10^9 m^{-1} (équivalent à environ 5.10^{12} cm^{-2} en planaire). Nous pouvons noter que la différence des fréquences entre les cas écranté et non écranté s'accroît en augmentant la polarisation de grille. Ceci s'explique par une plus forte charge d'inversion qui intensifie le phénomène d'écrantage.

6.5 Comparaison et validation sur données expérimentales

Une comparaison avec des données expérimentales est faite afin de valider la pertinence du code développé. Des transistors à nanofils de silicium empilés ont donc été fabriqués avec un empilement de grille composé de HfO_2(3nm)/TiN(10nm)/Poly-Si. La section du nanofil est rendue circulaire avec une recuit de H_2 ce qui a pour conséquence de faire croître une couche interfaciale de SiO_2 d'environ 1.5nm. Tous les détails techniques de la fabrication de ces dispositifs sont donnés dans Tachi *et al* [Tac09].
La figure 6.6 représente la mobilité totale des électrons en fonction de leur densité dans le nanofil pour un diamètre de 20nm. La comparaison montre un plutôt bon accord entre l'approche numérique et l'approche expérimentale. Cependant, du fait du procédé de

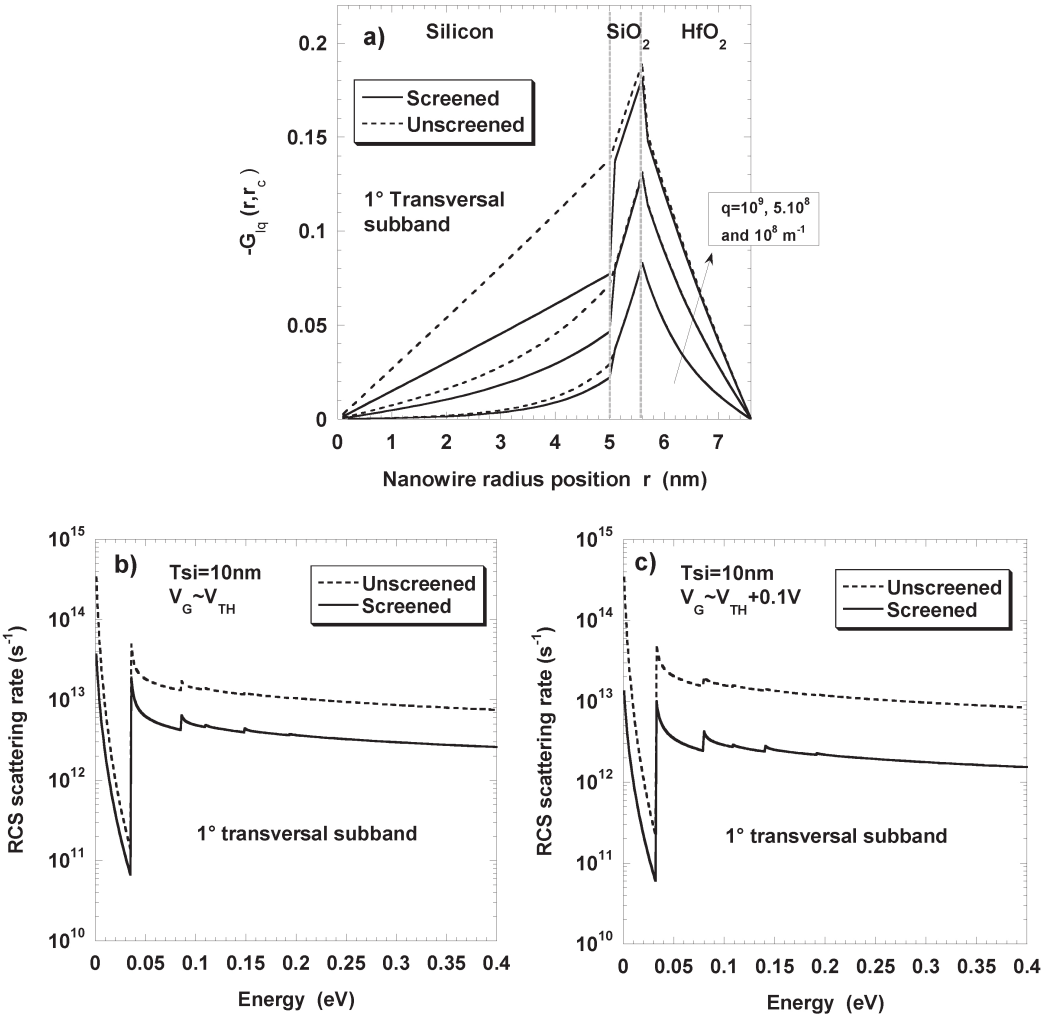


FIGURE 6.5: Fonction de Green écrantée ou non écrantée pour la première sous-bande transverse en fonction de la position sur le rayon du nanofil pour différent vecteurs d'ondes et pour une charge localisée à l'interface SiO_2/HfO_2 (a) ; Fréquences d'interaction pour le RCS écranté ou non écranté en fonction de l'énergie d'un porteur situé dans la première bande transverse pour deux polarisations de grille : au niveau du seuil du transistor (b) et à 0.1V plus fort (c).

fabrication non optimisé, l'empilement de grille est non seulement épais mais en plus, un grand nombre de charges piégées y figurent comme reporté dans l'article de Cassé *et al* [Cas10]. Il est donc indispensable de considérer une forte concentration de charges dans le code numérique pour retrouver un bon accord. Cette donnée est susceptible de générer un grand décalage de la tension de seuil (en supposant que toutes les charges ont le même signe) qui n'est pas observé expérimentalement. De plus, l'effet de la corrélation entre charges n'explique pas ce problème puisqu'il tendrait à accroitre cette différence. Le problème reste entier dans la littérature.

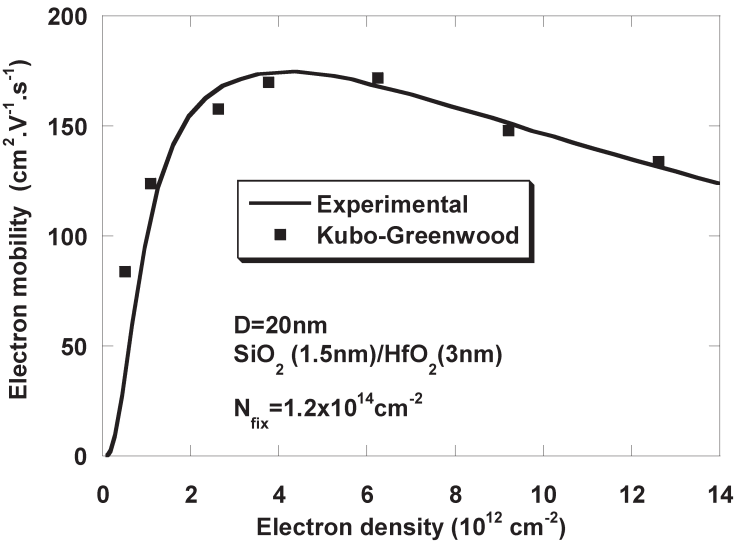


FIGURE 6.6: Mobilité totale des électrons en fonction de la charge d'inversion du canal ; Comparaison entre les données numériques Kubo-Greenwood et expérimentales pour un nanofil de 20nm disposant d'un empilement de grille SiO_2(1.5nm)/HfO_2(3nm)/TiN(10nm)/Poly-Si.

6.6 Résultats et discussions

6.6.1 Impact du diamètre du nanofil

A partir de maintenant nous allons nous pencher sur les projections de mobilité en faisant varier les paramètres clés du dispositifs. Dans le chapitre 3, nous avons vu la nécessité de réduire l'épaisseur de film des transistors MOSFETs afin de s'affranchir d'effets parasites tels que les effets de canaux courts. Mais quel est son impact sur le transport des porteurs dans le canal ? C'est dans cette question que tout l'intérêt du code réside. Nous avons pu sortir la mobilité incluant les interactions phonons, rugosité de surface et RCS pour différents diamètres de nanofils comme illustré figure 6.7. Pour des diamètres au delà de 10nm, la mobilité est quasiment la même que dans le matériau massif cependant, en deçà, la mobilité est fortement dégradée notamment à faible charge d'inversion où les phonons jouent un rôle plus important que la rugosité de surface (forte charge d'inversion). Incluant le RCS, la différence entre diamètres s'estompe mais reste significative.

6.6.2 Impact des paramètres technologiques

A l'instar du diamètre du film de silicium, il est important de connaître les tendances de mobilité lorsque tel ou tel paramètre change. Nous allons nous concentrer sur les principaux paramètres qui rentrent en jeu dans la mobilité limitée par le RCS à savoir le nombre de charges piégées (N_{fix}), l'épaisseur de la couche interfaciale (t_{SiO_2}) et la permittivité du

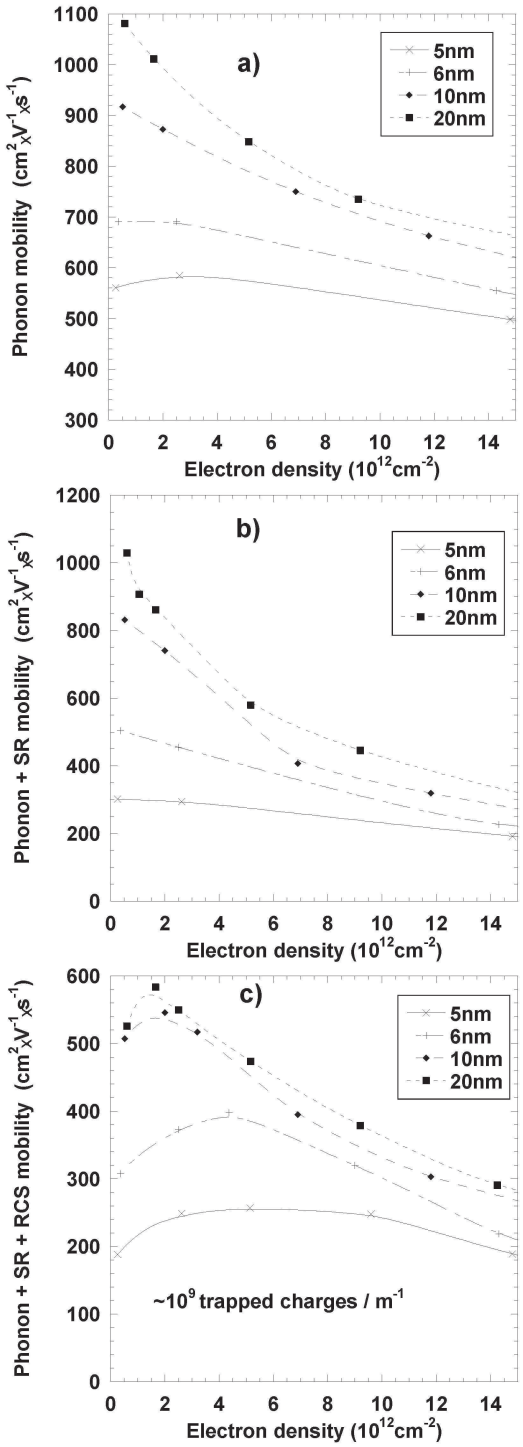


FIGURE 6.7: Mobilité totale des électrons en fonction de la charge d'inversion du canal pour différents diamètres de fils et pour les différents mécanismes d'interaction : phonon (a), phonon et rugosité (b) et phonon, rugosité et RCS (c).

diélectrique haute permittivité (κ). Ces paramètres sont très dépendants du procédé de fabrication et une grande incertitude règne sur leur valeur exacte.

La figure 6.8 montre la mobilité totale en fonction la densité électronique en faisant va-

rier les différents paramètres évoqués juste au dessus. Comme attendu, le nombre de charges ainsi que leur position (épaisseur t_{SiO_2}) perturbent fortement la mobilité ce qui pousse à contrôler le procédé afin d'éviter toute variabilité de ces paramètres là. Concernant la permittivité, le résultat est moins intuitif. En effet, en changeant de matériau haute-permittivité, la pénétration de l'enveloppe électrostatique d'une charge piégée va être différente ce qui modifie son impact sur la conduction du nanofil. Il s'agit là d'un paramètre clé afin d'obtenir un meilleur contrôle électrostatique ainsi que sur le transport. Cependant, un compromis doit être trouvé entre la permittivité de l'oxyde et sa qualité (densité de charges piégées).

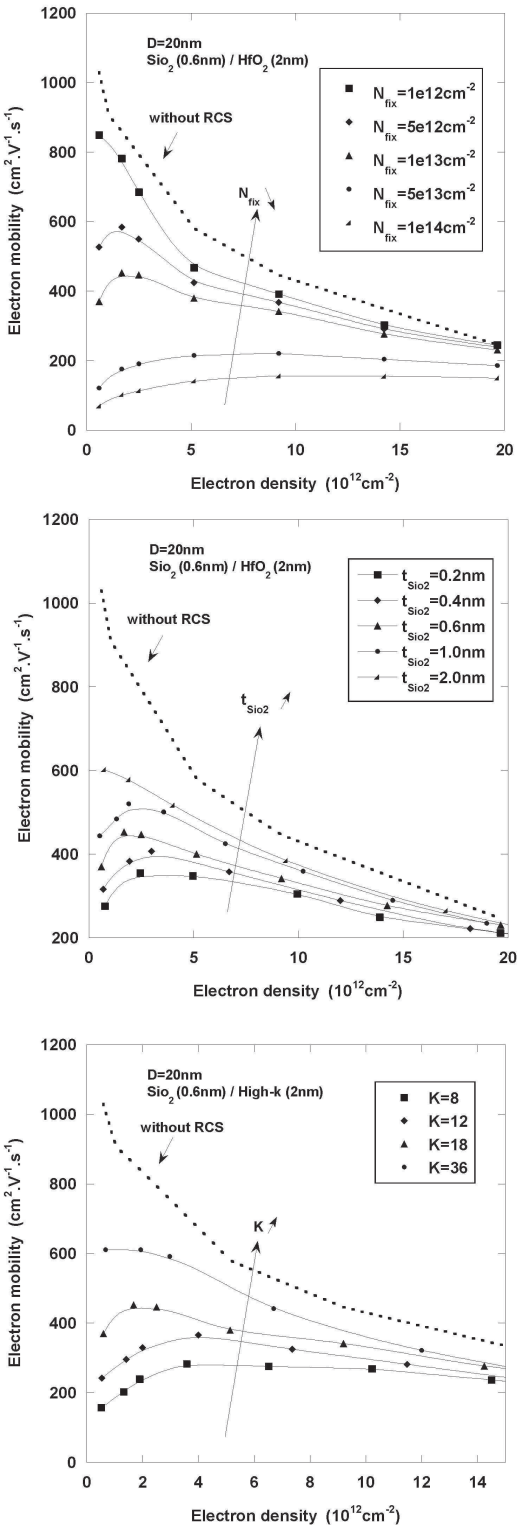


FIGURE 6.8: Mobilité totale des électrons en fonction de la charge d'inversion du canal en faisant varier différents paramètres : densité de charges piégées (N_{fix}), épaisseur de la couche interfaciale (t_{SiO_2}) et permittivité du diélectrique à haute permittivité (κ).

Chapitre 7

Modélisation analytique du courant quasi-balistique des MOSFETs à base de nanofil

Sommaire

7.1 La méthode des flux 128
7.1.1 Description physique générale d'un nanocomposant 128
7.1.2 Approche de Landauer 129
7.2 Modélisation du transport quasi-balistique 130
7.2.1 Notion de source virtuelle 130
7.2.2 Modèle en courant 131
7.3 Le coefficient de réflexion 134
7.3.1 État de l'art 134
7.3.2 Approche de McKelvey 136
7.3.3 Application à notre nanofil 137
7.3.4 Approche empirique de la puissance 138
7.3.5 Libre parcours moyen des porteurs 138
7.4 Résultats et comparaisons expérimentales 142
7.5 Application à l'étude de petits circuits 144

L'étude numérique du transport est essentielle pour comprendre les mécanismes d'interaction dans les transistors MOSFETs à base de nanofils. Elle a ainsi mis en avant l'effet de l'intégration géométrique qui devient critique sur la mobilité pour des diamètres de fils

inférieurs à 10nm. Cette caractéristique est la clé de la prédictibilité des performances des dispositifs des futurs noeuds technologiques. Toujours dans l'optique d'étudier les mécanismes de façon physique jusqu'à leur impact sur le dispositif voire sur les performances au niveau circuit, nous proposons dans ce chapitre un modèle compact en courant pour le transistor à nanofil incluant toute la physique décrite préalablement : de l'électrostatique de la partie 2 aux mécanismes d'interaction du chapitre précédent.
Dans le chapitre 2, nous avons vu l'étendue des méthodes de modélisation du transport électronique ; des méthodes numériques jusqu'aux modèles simplifiés tels que le modèle "dérive-diffusion" qui alimente les approches compactes. Cependant, de telles simplifications ne sont généralement pas compatibles avec la considération de phénomènes physiques émergents. Dans la suite, un formalisme alternatif aux méthodes classiques est repris puis transposé aux nanofils : la méthode des flux.

7.1 La méthode des flux

En parallèle des formalismes classiques de transport, McKelvey *et al* ont développé, dans les années 50-60, une nouvelle approche peu pertinente pour les systèmes de l'époque mais qui se révèle particulièrement intéressante aujourd'hui pour des transistors ayant des dimensions de l'ordre du libre parcours moyen des porteurs [McK61]. La nouveauté de la méthode des flux se trouve dans ses fondements qui rejoignent la définition même de la physique mésoscopique indispensable aujourd'hui.

7.1.1 Description physique générale d'un nanocomposant

Considérons un composant électronique connecté à deux électrodes dont chacune ayant pour caractéristique un potentiel électrostatique associé (μ_G pour l'électrode gauche et μ_D pour l'électrode droite). Lorsque ces deux potentiels différent sous l'effet d'une polarisation externe (tension source/drain pour le cas d'un transistor MOSFET), le nanocomposant est dans un état hors-équilibre et un flux d'électrons traverse alors le système. Les deux électrodes sont considérées comme des réservoirs de porteurs assez grands afin que les potentiels électrochimiques ne soient pas affectés par l'échange de porteurs avec la zone active.
Il est alors envisageable de décrire le comportement de la zone active avec les deux contacts de façon indépendante. Décrire précisément l'échange de porteurs entre le composant et chaque contact (d'où la notion de "$flux$") nous donne une indication forte sur le transport du système. Landauer [Lan57] a repris cette notion de flux et a développé une théorie afin d'en sortir une formule en courant complète.

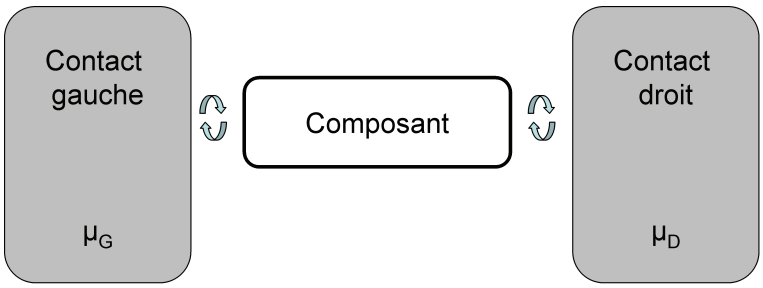


FIGURE 7.1: Nano-dispositif couplé à deux électrodes semi-infinies

7.1.2 Approche de Landauer

La théorie de Landauer considère qu'un porteur qui est injecté dans la zone active va avoir une probabilité **T** d'atteindre l'autre extrémité. Dans le cas d'un transport balistique, ce coefficient vaut 1. Toutefois, du fait de la présence d'interactions dans la zone active, le porteur est susceptible d'en subir une et d'être renvoyé dans son contact initial. La probabilité que cela arrive vaut alors **(1-T)**.

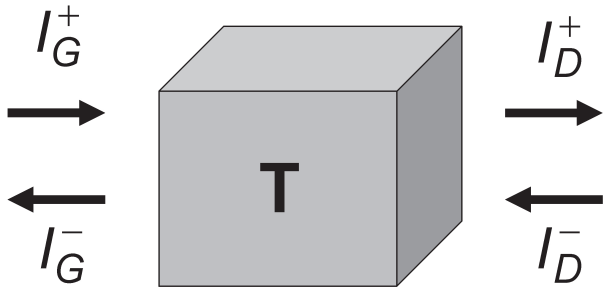


FIGURE 7.2: Représentation schématique des courants traversant un conducteur

Pour obtenir la nouvelle formule du courant, il nous faut effectuer un bilan des différents courants du système (cf fig 7.2). Le courant par unité d'énergie injecté par l'électrode de gauche (resp. de droite) s'écrit alors :

$$I_G^+ = -\frac{e}{h}.M.f(E-\mu_G) \quad I_D^- = \frac{e}{h}.M.f(E-\mu_D) \tag{7.1}$$

où M est le nombre de modes.

Ces deux composantes vont ensuite interagir avec la zone active. La partie réfléchie de chaque composante s'exprime :

$$I_G^- = (1-T).M.I_G^+ + T.I_D^- \quad I_D^+ = T.M.I_G^+ + (1-T).I_D^- \tag{7.2}$$

Le courant total traversant le système vaut alors :

$$I = I_G^+ - I_G^- = I_D^+ - I_D^- \tag{7.3}$$

En intégrant sur l'énergie, nous obtenons :

$$I = -\frac{e}{h}\int M.T(E).[f(E-\mu_G) - f(E-\mu_D)]dE \tag{7.4}$$

L'équation 7.4 est la formule généralisée de Landauer.

7.2 Modélisation du transport quasi-balistique

7.2.1 Notion de source virtuelle

En ce qui concerne la modélisation du système, Natori *et al* [Nat94] ont développé un modèle basé sur le formalisme introduit par Landauer. Il a donc été possible de mettre en place un modèle analytique du courant balistique pour le transistor MOSFET. Ce modèle repose sur le concept de *"source virtuelle"* directement lié à la base même du transport électronique dans le canal. Du fait des polarisations du transistor, une barrière énergétique se forme dans le canal et seuls les porteurs capables de franchir cette barrière contribueront au courant. Le modèle se base alors sur la méthode des flux en un point précis du canal, le maximum de la barrière énergétique, qui constituera notre source virtuelle.

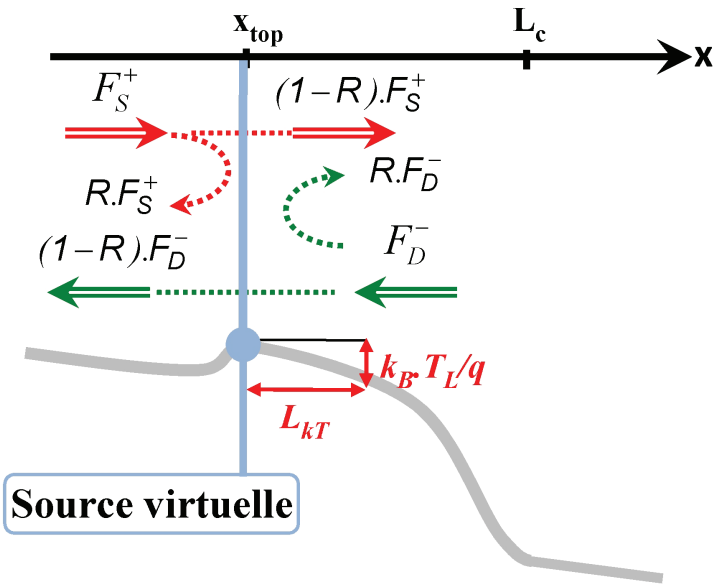


FIGURE 7.3: Illustration de la méthode des flux appliquée à un transistor MOSFET ; Définition de la source virtuelle, de la "kT-Layer" et des différents flux de porteurs au niveau de la source virtuelle.

Bien que Natori ait développé le premier modèle analytique du transport balistique, Lundstrom l'a généralisé pour tendre vers un transport de type quasi-balistique en introduisant le terme de rétrodiffusion [Lun00] [Rah02]. Ainsi, toujours en se plaçant à la source virtuelle, le flux total des contributions du drain et de la source s'exprime par :

$$F_S^- = R.F_S^+ + (1-R).F_D^- \tag{7.5}$$

où F_S^+ (respectivement F_D^-) représente le flux injecté par la source (respectivement par le drain) et R est le coefficient de réflexion de la zone active. Ce paramètre reflète la qualité du transport en terme d'interactions. Dans la suite, nous supposerons que le coefficient de réflexion est le même provenant de la source ou du drain.

7.2.2 Modèle en courant

Connaissant le flux de porteurs traversant le canal, il est alors possible non seulement d'exprimer la charge d'inversion (intégrée sur le rayon du nanofil) mais aussi le courant qui est juste la variation temporelle de cette charge.

$$\pi.D.Q_{inv} = e.(\frac{F_S^-}{v_{injS}^-} + \frac{F_D^+}{v_{injD}^+}) \tag{7.6}$$

où les v_{inj} représentent les vitesses d'injections.

$$I_D = e.(F_S^+ - F_S^-) \tag{7.7}$$

Cas non dégénéré

Dans un semiconducteur non dégénéré, la statistique de Fermi est équivalente à la statistique de Boltzmann. Sous cette condition, le flux de porteurs provenant du drain est égal à :

$$F_D^- = F_S^+.exp(-\frac{e.V_{DS}}{k_B.T}) \tag{7.8}$$

De plus, toujours dans le cas non dégénéré, toutes les vitesses d'injection (source ou drain) sont constantes et équivalent à la vitesse thermique v_{th} dont la forme analytique est [Mat04] :

$$v_{th} = \sqrt{\frac{2.k_B.T}{\pi.m_t}} \tag{7.9}$$

L'équation de la charge exprimée précédemment devient :

$$\pi.D.Q_{inv} = \frac{e}{v_{th}}.(F_S^- + F_D^+) \tag{7.10}$$

La combinaison des équations 7.7 et 7.10 donne l'expression analytique du courant quasi-balistique dans le cas non dégénéré :

$$I_D = \pi.D.Q_{inv}.v_{th}.\left(\frac{1-R}{1+R}\right).\left(\frac{1-exp(-\frac{e.V_{DS}}{k_B.T})}{1+\left(\frac{1-R}{1+R}\right).e^{-\frac{e.V_{DS}}{k_B.T}}}\right) \tag{7.11}$$

Cas dégénéré

Dans le cas dégénéré, la statistique de Fermi ne se simplifie pas et donc les flux de courant issus de la source et du drain s'expriment comme étant les produits de la charge d'inversion et de la vitesse d'injection [Dat02] :

$$F_S^+ = N_{1D}.\Im_{-1/2}(\eta_F).v_{injS}^+ \qquad avec \qquad v_{injS}^+ = v_{th}.\frac{\Im_0(\eta_F)}{\Im_{-1/2}(\eta_F)} \tag{7.12}$$

$$F_D^- = N_{1D}.\Im_{-1/2}(\eta_F - \frac{e.V_{DS}}{k_B.T}).v_{injD}^- \quad avec \quad v_{injD}^- = v_{th}.\frac{\Im_0(\eta_F - \frac{e.V_{DS}}{k_B.T})}{\Im_{-1/2}(\eta_F - \frac{e.V_{DS}}{k_B.T})} \tag{7.13}$$

où N_{1D}, la densité d'états 1D, et $\Im_n$, l'intégrale de Fermi d'ordre n, s'expriment par :

$$N_{1D} = \sqrt{\frac{2.m_t.k_B.T}{\pi.\hbar^2}} \tag{7.14}$$

$$\Im_n(x) = \frac{1}{\Gamma(n+1)}.\int_0^{+\infty}\frac{t^j}{exp(t-x)+1}dt \tag{7.15}$$

En introduisant la densité d'états dans l'expression de la charge, celle-ci devient :

$$\pi.D.Q_{inv} = e.N_{1D}.\left[(1+R).\Im_{-1/2}(\eta_F) + (1-R).\Im_{-1/2}(\eta_F - \frac{e.V_{DS}}{k_B.T})\right] \tag{7.16}$$

Toujours en combinant cette équation de charge avec les expressions des flux, nous

obtenons l'expression analytique du courant de drain quasi-balistique pour le nanofil :

$$I_D = \pi.D.Q_{inv}.v_{th}.\frac{\Im_0(\eta_F)}{\Im_{-1/2}(\eta_F)}.\left(\frac{1-R}{1+R}\right).\left(\frac{1-\frac{\Im_0(\eta_F-\frac{e.V_{DS}}{k_B.T})}{\Im_0(\eta_F)}}{1+\left(\frac{1-R}{1+R}\right).\frac{\Im_{-1/2}(\eta_F-\frac{e.V_{DS}}{k_B.T})}{\Im_{-1/2}(\eta_F)}}\right) \tag{7.17}$$

Dans cette expression, chaque composante physique rentre en jeu : l'électrostatique avec la charge d'inversion Q_{inv}, le transport avec le coefficient de réflexion R et la physique statistique à travers les intégrales de Fermi. Sur ces paramètres là, plusieurs remarques doivent être faites.

Tout d'abord, comme nous l'avons dit précédemment, nous définissons notre charge au niveau de la source virtuelle. Il est alors possible de l'exprimer en fonction de notre modèle en tension de seuil décrit au chapitre 5.

$$Q_{inv} = C_{ox}.(V_G - V_{th}).f_{raccord} \tag{7.18}$$

où $f_{raccord}$ est une fonction de raccord permettant de relier les différents régimes de fonctionnement [Mar09].

Deuxièmement, il est à noter que l'intégrale de Fermi d'ordre 0 peut se résoudre facilement dont la solution est :

$$\Im_0(x) = ln(1 + exp(x)) \tag{7.19}$$

Cependant, afin d'avoir une expression totalement analytique, il n'est pas concevable de laisser la résolution de l'intégrale de Fermi à l'ordre $-\frac{1}{2}$ telle qu'elle intervient dans l'équation du courant. Une des propriétés de cette équation est de perde un ordre lors de sa dérivée [Sel84] :

$$\frac{d\Im_n(x)}{dx} = \Im_{n-1}(x) \tag{7.20}$$

Ainsi, l'expression analytique de l'intégrale de Fermi à l'ordre $-\frac{1}{2}$ est la dérivée de l'expression de l'intégrale de Fermi à l'ordre $\frac{1}{2}$ qui elle se décompose [Sel84]. Le détail mathématique est donné en annexe.

Enfin, il ne reste plus qu'à exprimer précisément le potentiel de Fermi et notamment sa dépendance vis-à-vis de la polarisation de grille. Pour cela, il faut résoudre l'équation de la charge d'inversion 7.16. Dans le cas des dispositifs planaires, la solution est expli-

cite [Rah02] au regard de la forme analytique simple de l'intégrale de Fermi à l'ordre 0. Cependant, dans notre configuration de confinement 2D, la résolution est beaucoup plus complexe. Nous allons donc supposer que l'architecture n'a pas ou peu d'effet sur les variations du potentiel de Fermi. Son expression sera donc analogue à celle proposée dans le cas planaire [Rah02] :

$$\eta_F = ln\left[exp(\frac{\pi.D.Q_{inv}}{e.(1+R).N_{1D}}) - 1\right] \tag{7.21}$$

L'avantage d'un tel formalisme en courant est qu'il permet de relier facilement les différents types de transport (diffusif, balistique et quasi-balistique) à travers le terme de réflexion. Pour un transport théorique sans interactions, ce coefficient est donc nul ($R = 0$) alors que certaines études théoriques [Rah02] ou expérimentales ont montré que pour un transistor MOSFET ayant un canal long (transport diffusif) ce terme était de l'ordre de 0,5. Indépendamment de la modélisation en courant présentée au dessus, la difficulté est d'obtenir un coefficient de réflexion précis et réaliste notamment en réduisant la longueur du canal de conduction ce qui réduit le nombre d'interactions. Ceci constitue la base même d'une bonne modélisation du transport quasi-balistique.

7.3 Le coefficient de réflexion

Nombreux travaux se sont penché sur la question du coefficient de réflexion. Que ce soit à travers des modélisations plus ou moins pertinentes ou des caractérisations électriques, ce terme intrigue et est loin de faire l'unanimité. Cependant, une seule notion semble être commune à tous ces travaux. Il s'agit de la notion de distance critique ou généralement appelée "kT-Layer" qui modélise l'impact des interactions sur l'électrostatique de la zone active. Elle repose sur une hypothèse simple qui consiste à dire que la plupart des interactions subies par les porteurs se situe dans une zone où la gamme d'énergie est proche du maximum de la barrière énergétique. Ainsi, la "kT-Layer" définit les bornes géographiques de cette zone en considérant que la chute de la barrière énergétique ne doit pas excéder k_BT/e par rapport à son maximum (cf fig 7.3). Toutefois, l'expression analytique de ce terme n'est pas universelle comme nous allons le voir à travers un sommaire état de l'art.

7.3.1 État de l'art

L'expression usuelle concernant le coefficient de réflexion à faible et fort champ électrique d'après Lundstrom *et al* [Lun00] et redémontré plus tard par Clerc *et al* [Cle06]

est :

$$R = \frac{L_{kT}}{\lambda + L_{kT}} \tag{7.22}$$

où λ représente le libre parcours moyen et L_{kT} la longueur de la "kT-Layer" sachant qu'à faible champ cette longueur se rapproche de la longueur de canal.

Travaux de l'université de Purdue [Rah02] [Lun00]

L'équipe de l'université de Purdue s'est penché depuis longtemps sur la modélisation du courant par la méthode des flux initié par McKelvey. Ils ont donc été les premiers à introduire ce coefficient de réflexion et à proposer une modélisation de celui-ci. Dans les versions les plus avancées de leur travaux, l'expression de la "kT-Layer" s'écrit sous la forme d'une loi de puissance qui est directement reliée au type de transport.

$$L_{kT} = L_c.\left(\frac{k_B.T}{e.V_{DS}}\right)^{\frac{1}{\alpha}} \tag{7.23}$$

La valeur du paramètre α dépend directement du type de transport (1,5 pour du transport diffusif et 1,75 pour les cas de transport avancés considérés par Rahman [Rah02]). Néanmoins, le problème reste entier puisque aucune expression analytique de ce paramètre n'a été proposée. De plus, le raccord entre champ faible et champ fort n'a pas été envisagé.

Travaux de l'université de Chiao Tung [Che08a] [Che08b]

L'équipe de l'université de Chiao Tung s'est essentiellement consacrée aux techniques de caractérisations électriques du transport balistique. Toutefois, ils ont proposé une modélisation du coefficient de réflexion associée supposant un potentiel parabolique.

$$R = \frac{1 - e^{-\frac{L_c}{L_{kT}}}}{1 + \frac{2}{\sqrt{\pi}}.\frac{\lambda}{L_{kT}} - exp(-\frac{L_c}{L_{kT}})} \tag{7.24}$$

Toutefois, cette approche a été largement contredite aussi bien au niveau caractérisation électrique [Bar08] que pour sa modélisation puisque les résultats affichés sont en contradiction avec un fonctionnement standard d'un transistor MOSFET (certainement dû à l'hypothèse de potentiel parabolique peu importe la longueur de canal !).

Travaux de l'université de Tarragone [Ham07]

L'université de Tarragone a été la première à proposer un modèle de coefficient de réflexion reliant champs faible et fort [Ham07] [Jim04] :

$$R = \frac{L'_{kT}}{\lambda + L'_{kT}} \quad avec \quad L'_{kT} = \frac{L_{kT}}{\left(1 + \left(\frac{L_{kT}}{L_c}\right)^m\right)^{\frac{1}{m}}} \tag{7.25}$$

où $m = 3$ est un paramètre de calibration.
Il est à noter que si le champ est faible, L'_{kT} est egal à L_c et si le champ est fort, nous retrouvons l'expression initiale introduite par Lundstrom (loi de puissance avec $\alpha = 1$).

Le principal problème des différentes modélisation présentées ci-dessus se situe au niveau de l'appréhension de la "kT-Layer" ; c'est à dire au niveau du couplage entre les conditions électrostatiques et le mécanisme de transport mis en jeu dans le système. La plupart des modèles pertinents ne sont pas valables sur l'ensemble des régimes de fonctionnement du transistor ce qui est incompatible avec la mise en place d'un modèle analytique à des fins de simulations de circuits. Ce problème est résolu en reprenant le développement mathématique de la méthode des flux qui permet d'aboutir sur le coefficient de réflexion.

7.3.2 Approche de McKelvey

Le calcul du coefficient de réflexion proposé par McKelvey [McK61] s'attache à écrire les flux de porteurs de façon local ; c'est-à-dire sur une tranche fine du matériau (entre x et $x + dx$). Avec les notations définies par la figure 7.3, il est possible de définir des relations entre les différents flux :

$$F_S(x) = F_S(x + dx).(1 - r_{\leftarrow}.dx) + F_D(x).(r_{\rightarrow}.dx) \tag{7.26}$$

$$F_D(x + dx) = F_D(x).(1 - r_{\rightarrow}.dx) + F_S(x + dx).(r_{\leftarrow}.dx) \tag{7.27}$$

$$\frac{F_D(x)}{F_S(x)} = R_{\leftarrow}(x) \tag{7.28}$$

où r est le coefficient de réflexion local associé à sa position contrairement à R qui est macroscopique sur tout le canal.

Une équation différentielle vérifiée par le coefficient de réflexion R est alors obtenue dont la solution nous donne l'expression du coefficient. Le développement mathématique

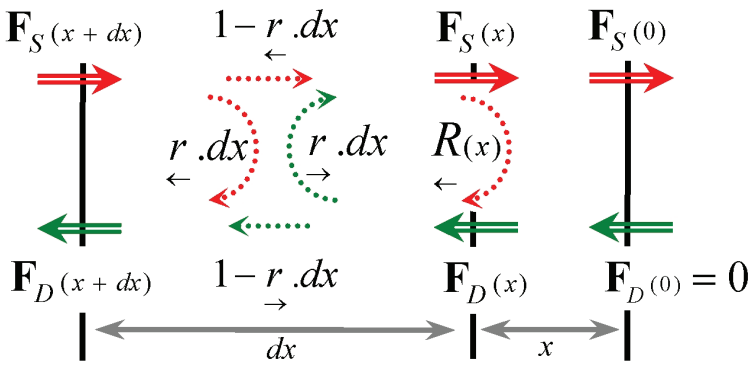


FIGURE 7.4: Illustration de la méthode des flux de façon locale vue par Mc Kelvey ; r : coefficient de réflexion local (au point x).

est donné dans [Mar09]. Le résultat est le suivant :

$$R = \frac{L''_{kT}}{\lambda + L''_{kT}} \tag{7.29}$$

avec

$$L''_{kT} = \left[\frac{1}{2.L_c}.\left(\frac{e.V_{DS}}{k_B.T}\right).\left(1+coth\left(\frac{x}{2.L_c}.\frac{e.V_{DS}}{k_B.T}\right)\right)\right]^{-1} = \left[\frac{1}{2.L_{kT}}.\left(1+coth\left(\frac{x}{2.L_{kT}}\right)\right)\right]^{-1} \tag{7.30}$$

L'introduction de cette nouvelle expression de la "kT-Layer" permet de relier les champs faible et fort de façon continue. De plus, contrairement aux travaux présentés, cette équation incorpore la dépendance en fonction de la position x.

7.3.3 Application à notre nanofil

Dans la suite de nos travaux, nous allons considérer cette modélisation afin de prendre en compte les interactions dans les transistors MOSFETs à nanofil. Comme de nombreux travaux ont essayé de le faire, nous allons tenter d'améliorer la description de la "kT-Layer" en adoptant une loi de puissance à l'instar des travaux de Lundstrom [Lun00]. Nous supposons donc que notre coefficient de réflexion a la forme suivante :

$$R(x) = \frac{\left[\frac{1}{2.L_{kT}}.\left(1+coth\left(\frac{x}{2.L_{kT}}\right)\right)\right]^{-1}}{\lambda + \left[\frac{1}{2.L_{kT}}.\left(1+coth\left(\frac{x}{2.L_{kT}}\right)\right)\right]^{-1}} \tag{7.31}$$

avec

$$L_{kT} = L'.\left(\frac{k_B.T}{e.V_{DS}}\right)^{\frac{1}{\alpha}} \quad et \quad L' = L_c.\left(\frac{V_{dd}-V_{th}}{V_{GS}-V_{th}}\right)^{\frac{1}{\alpha}} \tag{7.32}$$

Le terme L' sert à moduler la valeur de la "kT-Layer" afin d'obtenir une expression continue vis-à-vis de la polarisation de grille. Il ne reste plus qu'à traiter le coefficient α pour obtenir une expression complète de la réflexion dans le canal.

7.3.4 Approche empirique de la puissance

Afin de mettre en place la modélisation du terme de puissance, l'objectif est d'obtenir la valeur de la "kT-Layer" en fonction des différents paramètres du système (longueur de canal, diamètre du nanofil ou bien libre parcours moyen des porteurs) à partir de simulations numériques capables de coupler électrostatique et transport. Pour cela, nous avons utiliser des simulations TCAD dont le couplage électrostatique/transport est l'une des principales caractéristiques. Dans le but de modifier le libre parcours moyen des porteurs facilement, la mobilité quasi-balistique développée par Martinie *et al* [Mar09] a été implémentée.
Il est donc possible d'extraire la valeur de la "kT-Layer" pour les différentes configurations ainsi que que la valeur de la puissance α. En s'inspirant de l'expression fournie par [Mar09] et en calibrant sur les simulations numériques, nous pouvons exprimer la puissance comme :

$$\alpha = 1.4 + \left(\frac{1}{1 + exp(-\frac{L_c - 4.D}{D})} \right) \cdot \left(\frac{\lambda}{L_c} \right)^{0.5} \tag{7.33}$$

La figure 7.16 montre la validation de la "kT-Layer" et de la puissance entre notre modèle analytique et les simulations numériques de type TCAD [SIL].

Le coefficient de réflexion incluant cette expression de la "kT-Layer" est tracé sur la figure 7.6 en fonction du libre parcours moyen des porteurs. La validation du coefficient et du taux de balisticité (défini par $\frac{1-R}{1+R}$) est faite vis-à-vis de résolutions de l'équation de Wigner déterministe (cf chapitre 2) dont l'algorithme est présenté dans [Bar09].

A travers tout le développement que nous venons d'effectuer, l'impact des conditions électrostatiques a été considéré et établi par rapport au type de transport (dépendance en λ). Cependant, ce dernier paramètre reste inconnu. Il est directement lié au nombre d'interactions que les porteurs subissent lors de leur parcours. Nous avons donc développé un modèle analytique de ce libre parcours moyen basé sur l'étude numérique Kubo-Greenwood réalisée au chapitre 6.

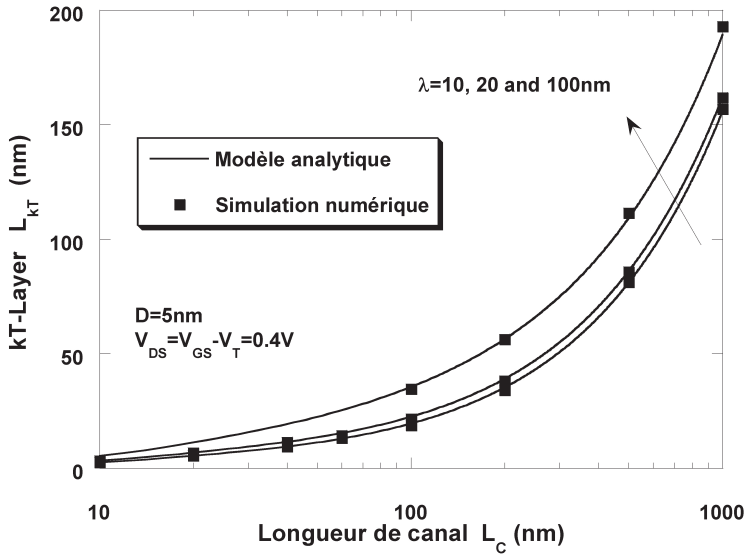


FIGURE 7.5: Évolution de la "kT-Layer" en fonction de la longueur de canal du transistor pour différent libre parcours moyen des porteurs ; Validation du modèle vis-à-vis de simulations numériques de type TCAD.

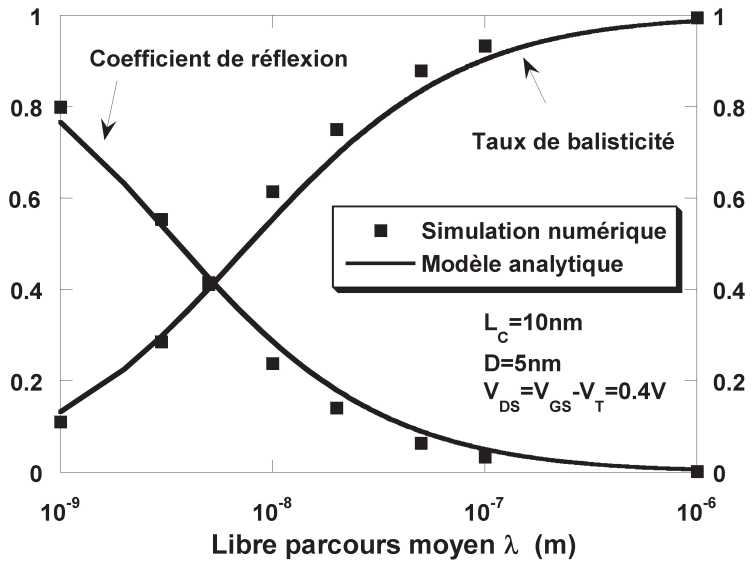


FIGURE 7.6: Évolution du coefficient de réflexion et du taux de balisticité en fonction du libre parcours moyen des porteurs ; Comparaison entre le modèle analytique et des simulations numériques de type Wigner déterministe.

7.3.5 Libre parcours moyen des porteurs

L'étude numérique de la mobilité du chapitre 6 a permis de mettre en exergue des tendances de valeurs vis-à-vis de l'intégration géométrique des nanofils. Cependant, au regard de la complexité mathématique des équations, il est inconcevable d'inclure une telle modélisation dans un simulateur circuit. Un compromis est donc trouvé en mettant en

place une expression analytique simple basée sur le code Kubo-Greenwood. Pour cela, afin d'inclure l'ensemble des mécanismes d'interaction limitant pour le transport des porteurs, une formulation de la mobilité se fait de façon similaire à la règle de Matthiessen :

$$\lambda = \frac{2kT}{e.v_{inj}}.\mu_{total} \tag{7.34}$$

$$\mu_{total}^{-1} = \left(\frac{\mu_{0,ph}}{E_{eff}^{\theta_{ph}}}\right)^{-1} + \left(\frac{\mu_{0,SR}}{E_{eff}^{\theta_{SR}}}\right)^{-1} + \left(\frac{\mu_{0,RCS}}{E_{eff}^{\theta_{rcs}}}\right)^{-1} \tag{7.35}$$

où μ_0 est la mobilité à champ faible et θ représente la dépendance de la mobilité vis-à-vis du champ électrique transverse.

Mobilité à champ faible

Afin d'inclure l'effet du diamètre, la mobilité de chaque mécanisme est définie par rapport à la valeur du matériau massif ($\mu_{0,bulk}$) introduisant une variation relative ($\delta\mu(D)$).

$$\mu_0 = \mu_{0,bulk}.\delta\mu(D) \tag{7.36}$$

A partir de là et pour chaque mécanisme, la dépendance en diamètre est extraite à partir des équations maitresses de l'approche Kubo-Greenwood. Par exemple, la mobilité limitée par les phonons est environ proportionnelle à la racine carrée du diamètre. Il est alors possible d'écrire la variation relative de mobilité comme :

$$\delta\mu_{ph}(D) = \frac{\mu_{0,ph}(D)}{\mu_{0,bulk,ph}} = \sqrt{\frac{D}{D_{bulk}}} = \sqrt{1+\delta D} \tag{7.37}$$

où

$$\delta D = \frac{D - D_{bulk}}{D_{bulk}} \tag{7.38}$$

Le terme correspondant à la mobilité phonon à champ faible s'écrit alors :

$$\mu_{0,ph}(D) = \mu_{0,bulk,ph}.\sqrt{1 + A_{ph}.\delta D + B_{ph}.\delta D^4} \tag{7.39}$$

où A_{ph} et B_{ph} sont des paramètres de calibrage sur les résultats numériques présentés au chapitre précédent. Le terme δD^4 est rajouté pour une meilleure précision.

Le même raisonnement est appliqué à la rugosité de surface et à l'interaction Coulombienne à distance. Les mobilités respectives à champ faible peuvent alors s'exprimer :

$$\mu_{0,SR}(D) = \mu_{0,bulk,SR}.(1 + A_{SR}.\delta D + B_{SR}.\delta D^4)^6 \tag{7.40}$$

$$\mu_{0,RCS}(D) = \frac{\mu_{0,bulk,RCS}}{N_{fix}.\pi.D}.(1 + A_{RCS}.\delta D + B_{RCS}.\delta D^4)^{3/2} \tag{7.41}$$

où N_{fix} est la densité linéïque de charges piégées dans l'oxyde de grille et A_{SR}, B_{SR}, A_{RCS} et B_{RCS} sont des paramètres de calibrage sur les résultats numériques.

La figure 7.7 montre la comparaison entre le modèle analytique et les données numériques pour la mobilité à champ faible pour chaque mécanisme en fonction du diamètre du nanofil.

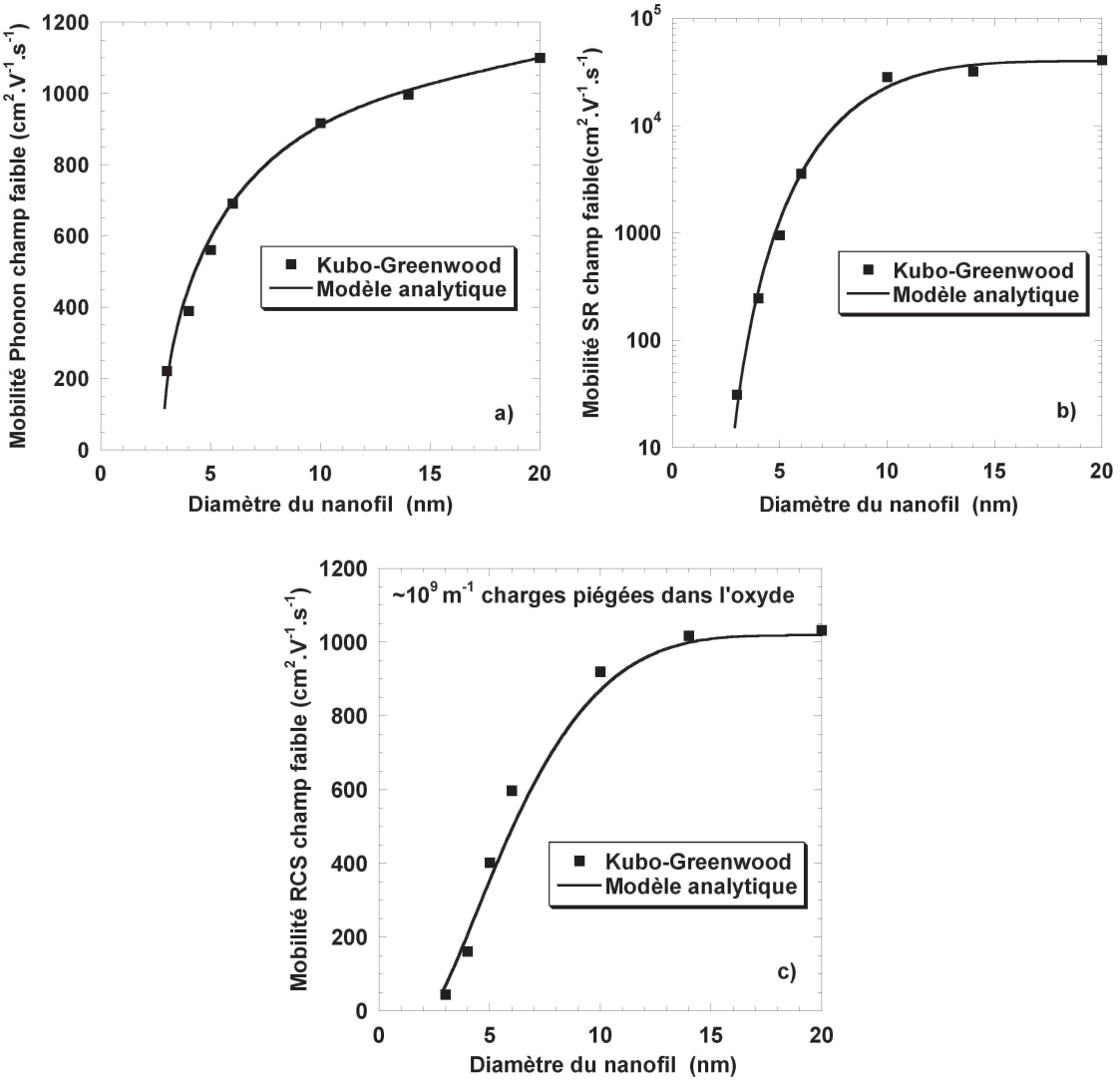


FIGURE 7.7: Mobilité à champ faible en fonction du diamètre du nanofil pour les différents mécansimes d'interaction : phonon (a), rugosité de surface (b) et RCS (c).

Dépendance au champ électrique transverse

Il ne reste plus qu'à décrire proprement la dépendance de la mobilité vis-à-vis du champ électrique transverse pour avoir une expression en mobilité totalement analytique. Celle-ci s'exprime à travers le paramètre θ de la règle de Matthiessen présentée ci-dessus. De la même manière que précédemment, l'objectif est de faire ressortir la dépendance par rapport au diamètre du film de silicium. Des expressions analytiques sont donc trouvées pour chaque mécanismes d'interaction.

$$\theta_{ph} = \theta_{bulk,ph}.(1 + \Theta_{1,ph}.\delta D + \Theta_{2,ph}.\delta D^6) \tag{7.42}$$

$$\theta_{SR} = \theta_{bulk,SR}.(1 + \Theta_{1,SR}.\delta D + \Theta_{2,SR}.\delta D^6) \tag{7.43}$$

$$\theta_{RCS} = \theta_{bulk,RCS} \tag{7.44}$$

où θ_{bulk} et Θ sont des paramètres de calibrage validés sur les données numériques en mobilité. Il est à noter que le diamètre n'affecte pas la dépendance du champ électrique sur la mobilité pour les interactions de type RCS.

La figure 2.8 montre la mobilité totale en fonction de la charge d'inversion pour différents diamètres et notamment la comparaison entre la modélisation analytique et les résultats numériques issus de l'approche Kubo-Greenwood.

7.4 Résultats et comparaisons expérimentales

Une fois le coefficient de réflexion décrit au complet, il est alors possible d'observer son évolution en fonction des dimensions des dispositifs. La figure 7.9 présente le coefficient de réflexion en fonction de la longueur de grille pour différents diamètres et pour les cas de faible et de forte inversion. Comme nous avions commencé à le voir sur la mobilité, la réduction de l'épaisseur de film de la zone active nuit gravement au passage des porteurs à travers le canal.

Le courant de drain du transistor MOSFET à nanofil est donc totalement modélisé incluant aussi bien les effets électrostatiques que les variations de mobilité dues aux changement de dimensions. Afin de vérifier la pertinence de notre modèle, une confrontation avec des données expérimentales a été faite (cf figure 7.10). Comme pour la validation de la mobilité du chapitre 6, les données sont issues des travaux de thèse de K. Tachi [Tac11]. Le nanofil est à grille totalement enrobante et dispose d'un diamètre de 15nm et d'une longueur de grille de 40nm. La comparaison montre un bon accord entre le modèle et l'expérimental avec un petit bémol entre les régimes sous et sur le seuil (la fonction de

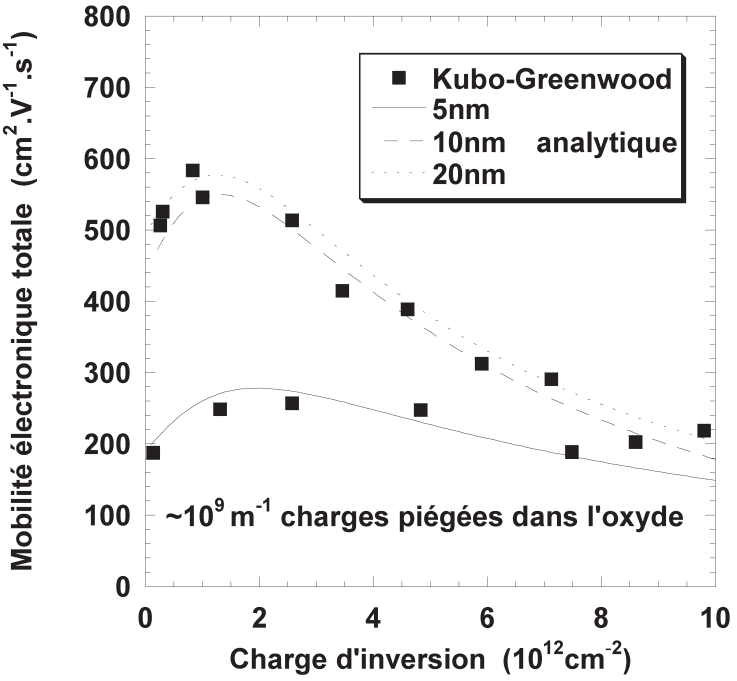


FIGURE 7.8: Mobilité électronique totale en fonction de la charge d'inversion de la zone active pour différent diamètre du nanofil ; Comparaison entre le modèle analytique et les résultats numériques Kubo-Greenwood.

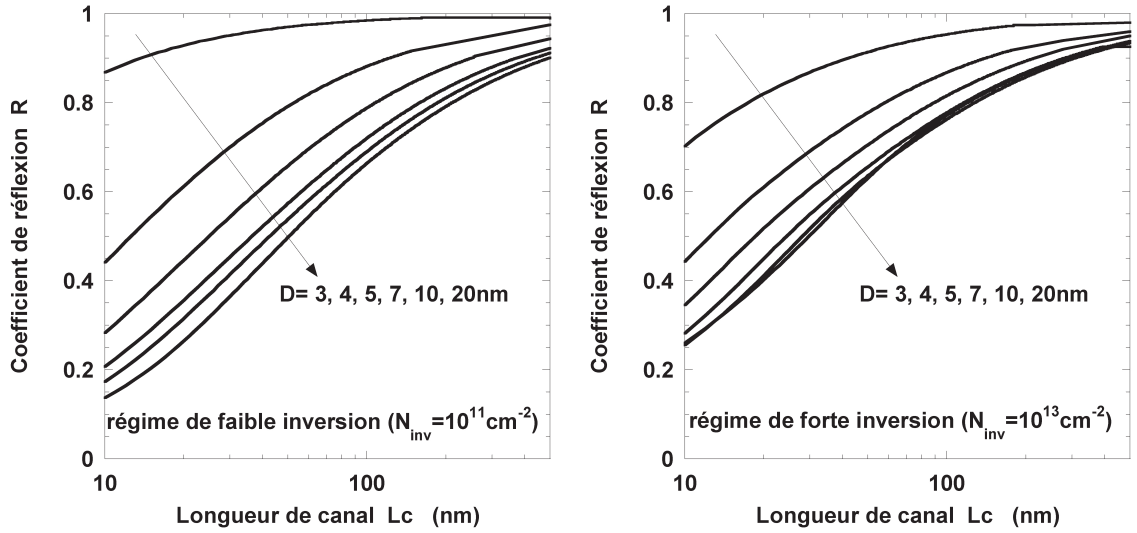


FIGURE 7.9: Coefficient de réflexion analytique en fonction de la longueur de canal du transistor pour différents diamètres de fils et pour un régime de faible (gauche) et de forte inversion (droite).

raccord pourrait être améliorée).

Sur la figure 7.9, nous avons vu que la réduction du diamètre du nanofil a un effet négatif sur la conduction des porteurs ce qui dégrade les performances en fonctionnement du transistor. Cependant, il est important de confronter cette dégradation aux effets élec-

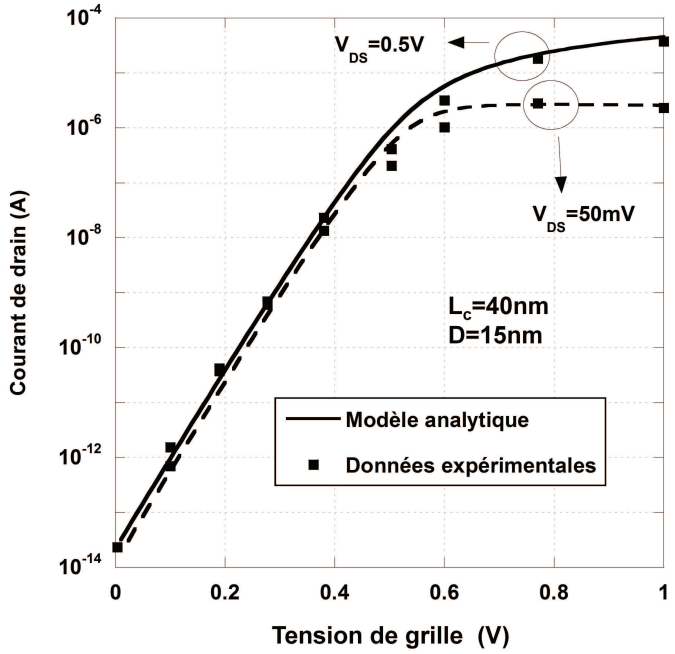


FIGURE 7.10: Courant de drain en fonction de la tension de grille pour un transistor MOSFET à nanofil de diamètre 15nm et de canal 40nm ; Comparaison entre le modèle analytique et des données expérimentales.

trostatiques qui ont un comportement inverse (diminution des effets SCE par la réduction du diamètre). La figure 7.11 montre le ratio de courant I_{ON}/I_{off} afin d'estimer, pour une longueur de canal donnée, quel diamètre choisir. On voit que pour les longueurs importantes, les effets de diamètre ont des variations de l'ordre du linéaire. Un diamètre important doit être choisi afin d'éviter toute dégradation de mobilité. Toutefois, pour les longueurs extrêmement courtes, la dégradation du courant de fuite est tel que le transistor n'est plus viable. Un petit diamètre est donc nécessaire même si nous devons sacrifier un peu la mobilité.

7.5 Application à l'étude de petits circuits

Dans cette dernière section, nous allons illustrer l'intérêt du modèle compact à travers la simulation de petits circuits CMOS à base de nanofils. Cette étude est loin d'être exhaustive et ne s'attarde que sur les effets physiques décrits précédemment. Pour cela, le modèle a été implémenté en langage Verilog-A afin de simuler les circuits dans un environnement ELDO. Dans la suite, les transistors de type p-MOS seront pris symétriques aux transistors n-MOS. De cette manière, nous nous affranchissons de toute contrainte de dimensionnement des transistors afin d'optimiser les circuits.

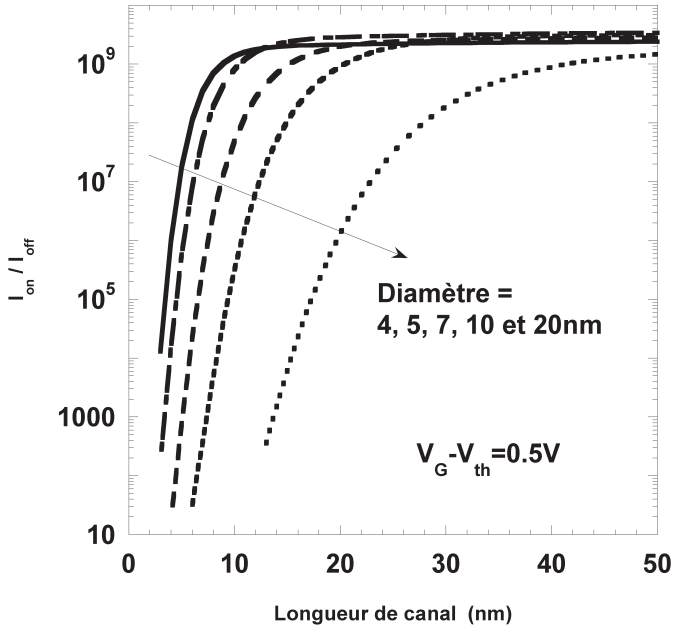


FIGURE 7.11: Ratio I_{ON}/I_{off} en fonction de la longueur de canal pour différents diamètres de fils en régime d'inversion forte (pour le I_{ON}).

Inverseur

Un inverseur est la porte logique élémentaire constitué de deux transistors (un de type n et un de type p). Sa fonction est d'inverser l'état de l'entrée. La figure 7.12 montre la représentation schématique de l'inverseur ainsi que sa caractéristique théorique dans le cas équilibré (quand les niveaux des courants ON des deux transistors sont égaux). Ainsi, tant que V_{in} est inférieur à la polarisation $V_{dd}/2$, le transistor n-MOS reste bloqué tandis que le p-MOS est passant. Au delà de cette tension, le comportement des transistors s'inverse et la sortie devient nulle. Il est à noter que plus ce changement est abrupte, meilleure est la porte logique. Ce dernier point est totalement dépendant de la caractéristique électrostatique (tension de seuil et pente sous le seuil) des transistors MOSFETs utilisés.

La figure 7.13 montre le résultat de la simulation des inverseurs à base de nanofil pour différents diamètres et longueurs de grille des transistors. Le paramètre extrait représente la qualité de l'inverseur et dépend du fait que sa caractéristique est plus ou moins abrupte. Plus ce paramètre est petit, plus la porte logique bascule rapidement. Nous voyons clairement un effet du diamètre sur l'inverseur. Les observations faites sur la tension de seuil au chapitre 5 se retrouvent ici. La quantification de l'énergie des porteurs améliore clairement l'électrostatique des transistors jusqu'au niveau circuit. La réduction de la longueur de grille fait intervenir les effets canaux courts qui, eux, dégradent fortement les performances de l'inverseur.

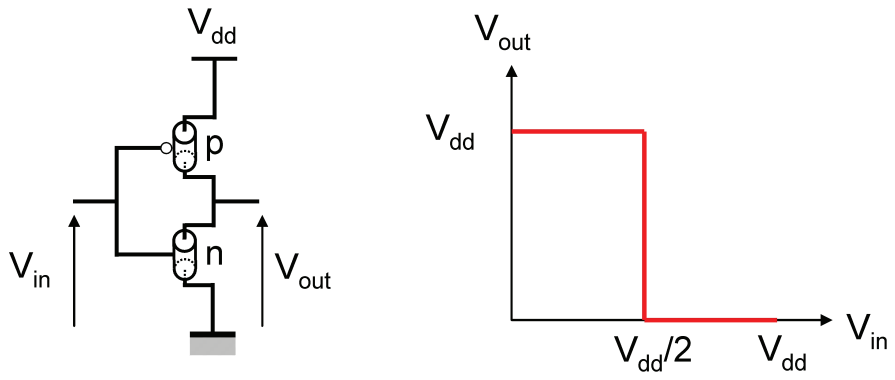


FIGURE 7.12: Schématisation de l'inverseur (gauche) et de la caractéristique idéale de celui-ci (droite).

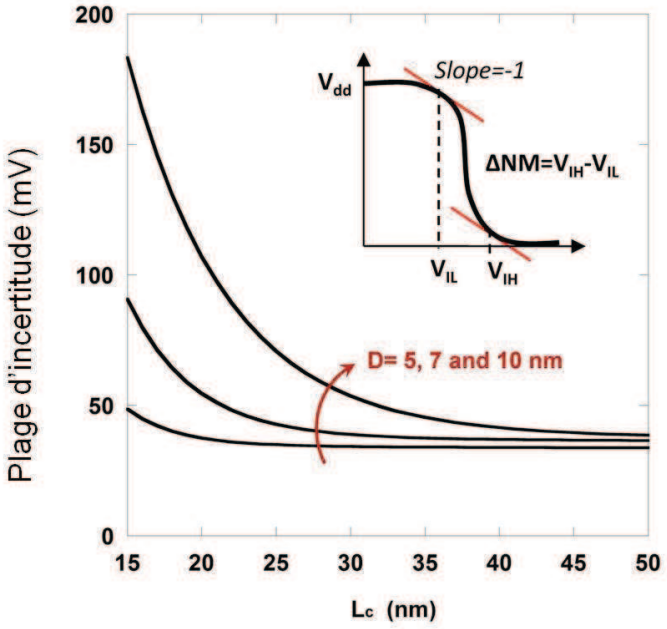


FIGURE 7.13: Basculement de l'inverseur en fonction de la longueur de canal pour différents diamètres de nanofil ; schématisation de l'extraction du NM sur la caractéristique (encart).

Oscillateur en anneau

L'oscillateur en anneau est une chaine d'inverseurs bouclée sur elle-même. Il est très utile pour mettre en avant les caractéristiques dynamiques des transistors. C'est pourquoi il apparaît souvent dans de nombreuses applications des hyperfréquences. Dans notre cas, la fréquence d'oscillation représente l'inverse du temps de propagation d'une chaine d'inverseurs qui est directement influencé par les propriétés de transport. Dans la suite, nous considérons une chaîne de 11 inverseurs, chacun associé à une capacité de charge de 1fF.

La figure 7.14 (a) montre la variation de la fréquence d'oscillation en fonction de la longueur de canal pour trois diamètres de fil différents. Le diamètre joue directement sur la mobilité comme nous l'avons vu dans le chapitre 6, ainsi que sur la section ; d'où un courant de fonctionnement plus faible à 5nm qu'à 10nm. Cette différence s'observe sur les caractéristiques de l'oscillateur. Une bonne modélisation du courant est donc nécessaire pour estimer et prédire les performances des circuits. Pour illustration, la figure 7.14 (b) montre la fréquence d'oscillation pour différentes longueurs de canal et pour différents types de transport en fonction des approximations suivantes : balistique (en fixant le coefficient de réflexion à 0), quasi-balistique, mais en n'incluant pas les effets de bandes (variation du gap et des masses en fonction du diamètre) et quasi-balistique avec effets de bande (le modèle quasi-balistique final développé dans ce manuscrit). Les variations sont loin d'être négligeables d'où la nécessité de retranscrire la physique observée en amont jusqu'au circuit.

Cellule mémoire SRAM

Étant données les bonnes projections du nanofil pour le contrôle électrostatique des transistors MOSFETs, cette architecture pourrait être candidate pour les mémoires volatiles telles que la mémoire SRAM (*Static Random Access Memory*). Dans notre cas, nous allons nous pencher sur le cellule mémoire à six transistors (6T) composée de deux inverseurs retro-couplés et deux transistors d'accès. Le fonctionnement d'une telle cellule est constitué de trois modes (lecture, écriture et rétention), commandés par une ligne de mot (WL). Afin d'estimer les performances de la cellule, deux principaux paramètres sont à observer : la RNM (*Read Noise Margin*) pour le mode écriture et la SNM (*Static Noise Margin*) pour la rétention. Leur extraction est schématisée sur la figure 7.15 en fonction de la caractéristique de la SRAM. La simulation pour différents diamètres de fils est donnée sur la figure 7.16. Sachant que meilleure est la valeur de la SNM, plus la rétention de la mémoire est de qualité, nous pouvons voir l'effet d'amélioration de l'électrostatique par la réduction du film et ce jusqu'à la cellule mémoire.

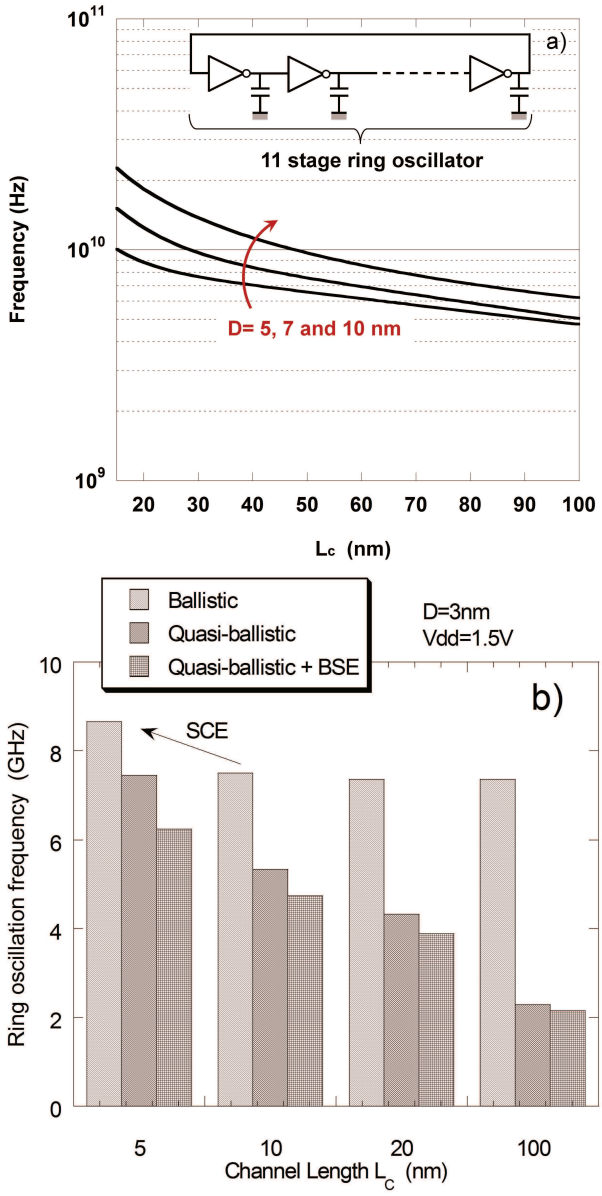


FIGURE 7.14: Fréquence de l'oscillateur en anneau en fonction de la longueur du canal pour différents diamètres de nanofil utilisant le modèle quasi-balistique(a) ; Fréquence de l'oscillateur en anneau en fonction de la longueur de canal pour un diamètre de 3nm en faisant varier le mode de transport : balistique, quasi-balistique sans effets de bandes et quasi-balistique (b).

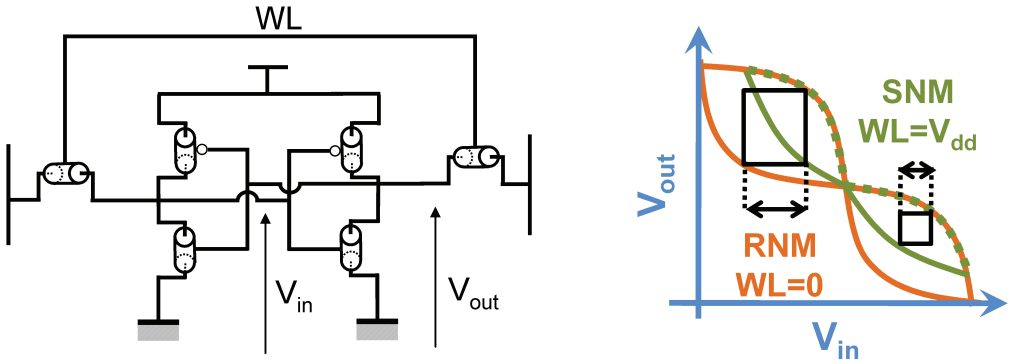


FIGURE 7.15: Schématisation de la structure d'une cellule mémoire SRAM (gauche) et de sa caractéristique électrique avec illustration de l'extraction des principaux facteurs de mérite (droite).

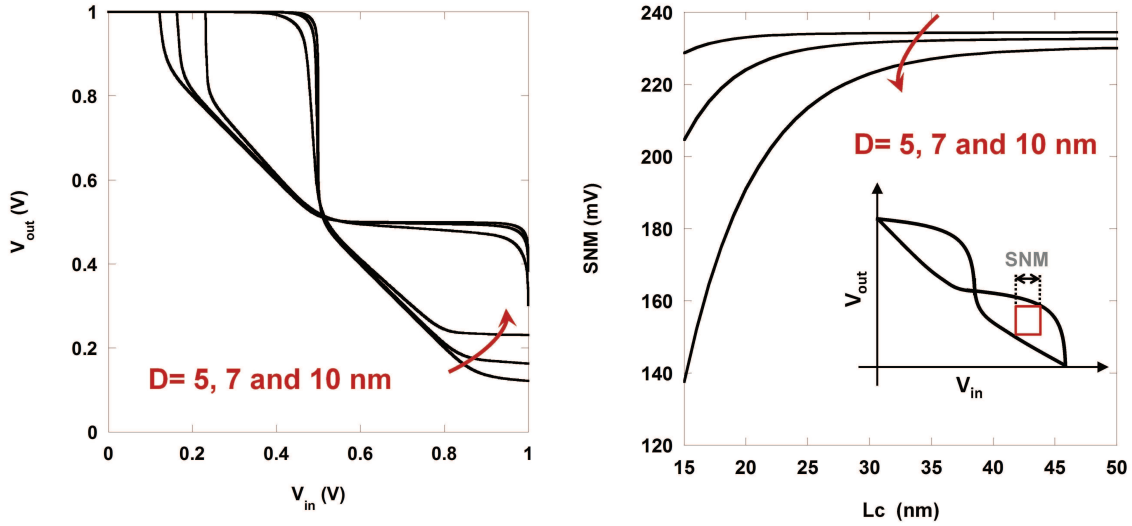


FIGURE 7.16: Caractéristique tension de sortie en fonction de la tension d'entrée pour la cellule mémoire SRAM pour différents diamètres de nanofils (gauche) ; Marge de bruit statique en fonction de la longueur du canal pour différents diamètres (droite).

Conclusion de la partie III

Dans cette dernière partie du manuscrit, nous nous sommes intéressés aux différentes caractéristiques du transport électronique dans un nanofil de silicium pour application MOSFET. Au niveau comportement électrostatique, nous avons clairement vu, dans la partie 2, l'intérêt d'utiliser une architecture "nanofil" pour les futurs noeuds technologiques. Cependant, le transport a un rôle à part entière dans les performances d'un dispositif ce qui justifie totalement cette partie.

Dans le premier chapitre de cette partie, la théorie du temps de relaxation d'un porteur a été développée pour les principaux mécanismes d'interactions qui limitent le transport dans un nanofil à grille enrobante : interaction avec les phonons, l'effet de la rugosité de surface et l'interaction Coulombienne à distance due à la présence de charges dans l'empilement de grille du transistor. La mobilité est alors décrite à partir de l'équation de Boltzmann en utilisant la théorie de Kubo-Greenwood qui limite l'étude aux transistors à canal long et champ faible. A l'instar de l'électrostatique où nous avons vu le fort impact du diamètre du fil sur les propriétés de conduction du silicium (bande interdite et masses effective) ou sur les caractéristiques du transistors (tension de seuil), l'intérêt d'un tel développement numérique est d'extraire les dépendances de la mobilité en fonction de certains paramètres clés de l'intégration des dispositifs comme l'épaisseur du film de silicium. Après analyse, cette étude est d'autant plus intéressante puisque la mobilité décroit fortement pour les diamètres en deçà de 10nm. Ce point-là est à inclure dans toute modélisation ayant pour but de prédire les performances d'un transistor à nanofil. De plus, d'autres paramètres appelés "technologiques", comme l'épaisseur de la couche interfaciale ou la permittivité du diélectrique à haute permittivité utilisé dans l'empilement de grille, ont été balayés afin d'estimer leur impact sur la mobilité. Cela peut apporter quelques pistes pour l'optimisation des procédés de fabrication ou le changement éventuel de matériau au regard des performances ciblées. Ce code numérique a notamment pu être validé sur des toutes premières données expérimentales réalisées au CEA-LETI sur des dispositifs à base de nanofil à grille totalement enrobante et à section circulaire. Ceci a soulevé le problème des charges piégées dans l'oxyde de grille qui sont difficilement localisables

expérimentalement (géographiquement ou énergétiquement). Sur ce point, le code peut être largement amélioré en prenant en compte les effets de corrélation entre charges, une répartition de charges différentes le long de l'oxyde de grille, voire des charges de signe contraire.

Afin de poursuivre la modélisation compacte initiée au chapitre 5, le deuxième chapitre de cette partie s'est porté sur la modélisation du transport dans le nanofil. La base même du courant a été développée à partir de la méthode des flux faisant intervenir l'électrostatique avec la tension de seuil et la notion de coefficient de réflexion des porteurs pour représenter la qualité du transport électronique. Sur ce dernier, deux points ont particulièrement été décrits : le premier est la conséquence directe de l'étude numérique faite sur la mobilité. Pour cela, un modèle analytique incluant la dépendance en diamètre est proposé pour la mobilité du nanofil incluant les phonons, la rugosité de surface et le RCS. Le deuxième point est la prise en compte de l'effet de quasi-balisticité que nous voyons apparaître lors de la réduction de la longueur du canal. Un modèle empirique est proposé puis validé sur des simulations numériques de type TCAD et une résolution déterministe de l'équation de Wigner. Finalement, l'ensemble du modèle compact est comparé aux données expérimentales en courant dont nous disposons. Nous avons donc un modèle continu en fonction des différentes polarisations du transistor, capable de reproduire les caractéristiques expérimentales en courant pour des diamètres importants et susceptible de prédire les performances lors de l'intégration puisque l'ensemble des effets liés à la réduction des dimensions y sont inclus. La dernière section illustre les capacités du modèle pour la simulation de petits circuits à base de nanofil implémentés dans un environnement ELDO.

Conclusion générale et perspectives

Dans cette thèse, nous nous sommes penchés sur l'étude théorique des propriétés des nanofils de silicium ainsi que leur modélisation pour une application MOSFET. Cette architecture est encore trop récente pour juger de sa pertinence sur des circuits contenant plusieurs milliers de transistors. Ceci est d'autant plus vrai que son architecture et les dimensions géométriques ciblées engendrent de nouveaux phénomènes peu ou pas observés jusqu'alors. Tout ce travail consiste donc à se placer à mi chemin entre l'observation et la compréhension des phénomènes physiques ultimes susceptibles d'affecter les performances et la mise en place d'une modélisation simple de ceux-ci pour soutenir des simulations TCAD ou circuits.

Que ce soit pour l'électrostatique ou le transport électronique, l'approche fût similaire. Des codes très physiques comme le code de liaisons fortes utilisé sont des outils absolument nécessaires pour étudier la structure de bande du matériau en question ; cependant ils deviennent incompatibles avec des simulations de dispositif complet. Nous avons donc simplifié le système en apportant des approximations pertinentes pour le nanofil telles que les approximations de la masse effective et de l'isotropie. Il est alors possible d'extraire les densités de porteurs par sous-bandes ou les fonctions d'onde pour un système ayant des dimensions assez importantes, proche de ce qui est fait expérimentalement. Le développement d'un modèle analytique incluant des phénomènes émergents tels que le confinement énergétique des porteurs ou l'effet de la structure est d'autant plus facilité par l'utilisation et la validation par des codes numériques. Pour le transport, le développement d'un code de mobilité basé sur la formule de Kubo-Greenwood est un bon outil intermédiaire pour l'évaluation du transport dans un dispositif à nanofil. Évidemment moins précise que des approches telles que des résolutions déterministe ou les fonctions de Green, la mobilité a pu être extraite incluant, au moins au premier ordre, les principaux mécanismes limitant le déplacement d'un porteur dans le nanofil ; à savoir les phonons, la rugosité de surface et surtout les interactions Coulombiennes à distance essentielles pour envisager des comparaisons avec des données expérimentales. Ainsi, des tendances de mobilité vis-à-vis de la réduction du diamètre du fil par exemple ont pu être observées pour une large gamme

de dimensions (des dispositifs actuels jusqu'à des valeurs ultimes de l'ordre de quelques nanomètres). Une modélisation du transport électronique a donc pu être mis en place à travers le coefficient de réflexion incluant aussi bien les effets de réduction de diamètre mais également les effets de quasi-balisticité liés à la réduction du canal. Basé fortement sur des codes numériques physiques, le modèle mis en place a été confronté également, pour plus de pertinence, à des données expérimentales que ce soit pour l'électrostatique à travers la tension de seuil, la mobilité électronique et le courant de drain du dispositif MOSFET à nanofil. Malheureusement, l'architecture nanofil à grille totalement enrobante et à section circulaire n'est pas très répandue au niveau résultats expérimentaux ce qui ne nous a pas permis de comparer le modèle pour un jeu de paramètres conséquent. Toutefois, l'implémentation du code dans un langage Verilog-A a montré tout l'intérêt d'un tel code puisque des effets tels que les effets de structure de bande ou de quasi-balisticité ont pu être prédits sur les performances de petits circuits à base de dispositifs à nanofil.

Bien d'autres choses auraient pu être apportées à ce travail et les perspectives de suites sont nombreuses. Suivant les inspirations de chacun, un travail complémenatire pourra être ajouté aussi bien en amont sur l'amélioration du code ou le développement d'autres approches moins simplificatrices soit en aval avec une étude circuit plus exhaustive. Afin d'affiner le travail qui a été fait au niveau numérique, il est tout à fait envisageable de s'affranchir de certaine approximation comme l'isotropie et en apportant des réponses aux problématiques actuelles comme les effets de contraintes (en faisant du calcul k.p par exemple) ou simplement en améliorant le code Kubo-Greenwood développé ici (considération des ordres supérieurs, considération du confinement des phonons, corrélation entre charges pour le RCS...). Concernant le modèle et la partie simulation de circuit, beaucoup de choses restent à faire. Nous nous sommes essentiellement intéressés à la physique du nanofil mais tout un travail sur la compacité du modèle et sa robustesse doit être apporté avant d'envisager la simulation de plus gros circuits. De plus, certaines études non modélisées ici ont commencé à être faites sans approfondissement comme le courant tunnel direct entre la source et le drain du transistor qui affecte les caractéristiques du transistor pour des longueurs de grille en deça de 10nm.

Pour définitivement conclure, la force de ce travail réside sur la simulation multi-échelle qu'il utilise et notamment la mise en relation d'un niveau par rapport à l'autre. L'étude des nanostructures ne peut plus se contenter d'étudier la physique d'un coté et les applications de l'autre. La combinaison des deux études est dont indispensable pour les dimensions ciblées où la physique est complètement bousculée.

Bibliographie

[Akh11] N.D. Akhavan, A. Afzalian, A. Kranti, I. Ferain, C.W. Lee, R. Yan, P. Razavi, R. Yu et J.P. Colinge, *Influence of Elastic and Inelastic Electron-Phonon Interaction on Quantum Transport in Multigate Silicon Nanowire MOSFETs*, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. **58**, pp. 1029–1037, 2011.

[Anc89] M.G. Ancona et G.J. Iafrate, *Quantum correction to the equation of state of an electron-gas in a semiconductor*, Physical Review B, Vol. **39**, pp. 9536–9540, 1989.

[And82] T Ando, A.B Fowler et F Stern, *Electronic properties of two-dimensional systems*, Reviews of Modern Physics, Vol. **54**, pp. 437–672, 1982.

[Apa94] Y. Apanovich, E. Lyumkis, B. Polsky, A. Shur et P. Blakey, *Steady-state and transient analysis of submicron devices using energy-balance and simplified hydrodynamic models*, IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, Vol. **13**, pp. 702–711, 1994.

[Asc76] N.W. Aschchoft et N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Aunders College Publishing, 1976.

[Aut04] J.L. Autran, D. Munteanu, O. Tintori, S. Harrison, E. Decarre et T. Skotnicki, *Quantum-mechanical analytical Modeling of threshold voltage in long-channel double-gate MOSFET with symmetric and asymmetric gates*, In NSTI Nanotech 2004, Vol. **2**, Technical proceedings, pp. 163–166, 2004.

[Aut05] J.L. Autran, K. Nehari et D. Munteanu, *Compact modeling of the threshold voltage in silicon nanowire MOSFET including 2D-quantum confinement effects*, Molecular Simulation, Vol. **31**, pp. 839–843, 2005.

[Bac08] G. Baccarani, *Device physics for the modeling of future nanoscale silicon devices*, In SINANO summer School on Device Modeling, 2008.

[Ban95] S.R. Banna, P.C.H. Chan, P.K. Ko, C.T. Nguyen et M.S. Chan, *Threshold voltage model for deep-submicrometer fully depleted SOI MOSFETs*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **42**, pp. 1949–1955, 1995.

[Bar08] V. Barral, *Etude, simulation et caractérisation du transport quasi-balistique dans les dispositifs nanométriques*, Thèse de doctorat, Université de Provence, 2008.

[Bar09] S. Barraud, *Phase-coherent quantum transport in silicon nanowires based on Wigner transport equation : Comparison with the nonequilibrium-Green-function formalism*, Journal of Applied Physics, Vol. **106**, pp. 063714, 2009.

[Ber06] G. Bersuker, C. S. Park, J. Barnett, P. S. Lysaght, P. D. Kirsch, C. D. Young, R. Choi, B. H. Lee, B. Foran, K. van Benthem, S. J. Pennycook, P. M. Lenahan et J. T. Ryan, *The effect of interfacial layer properties on the performance of Hf-based gate stack devices*, Journal of Applied Physics, Vol. **100**, pp. 094108, 2006.

[Bes04] M. Bescond, *Modélisation et simulation du transport quantique dans les transistors MOS nanométriques*, Thèse de doctorat, Université Aix-Marseille, 2004.

[Bin82] G. Binnig et H. Rohrer :
U.S. Patent : Scanning tunneling microscope.
Rapport technique, I.B.M, 4,343,993, 1982.

[Bin86] G. Binnig, C.F. Quate et C. Gerber, *Atomic force microscope*, Physical Review Letters, Vol. **56**, pp. 930–933, 1986.

[Bjo02] M.T. Bjork, B.J. Ohlsson, C. Thelander, A. Persson, K. Deppert, L.R. Wallenberg et L. Samuelson, *Nanowire resonant tunneling diodes*, Applied Physics Letters, Vol. **81**, pp. 4458–4460, 2002.

[Blo70] K. Blotekja, *Transport equations for electrons in 2-valley semiconductors*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **17**, pp. 38, 1970.

[Boh52] D. Bohm, *A suggested interpretation of the quantum theory in terms of hidden variables*, Physical Review, Vol. **85**, pp. 166–179, 1952.

[Bon06] A. Bonaccorsi et G. Thoma :
Scientific and technological regimes in nanotechnology : combinatorial inventors and performance.
Rapport technique, Laboratory of economics and management, p.43, 2006.

[Bor27] M. Born et R. Oppenheimer, *Zur Quantentheorie der Molekeln*, Annalen der Physik, Vol. **84**, pp. 457–484, 1927.

[Boy04] T.B. Boykin, G. Klimeck et F. Oyafuso, *Valence band effective-mass expressions in the sp(3)d(5)s(*) empirical tight-binding model applied to a Si and Ge parametrization*, Physical Review B, Vol. **69**, pp. 115201, 2004.

[BSI09] Berkeley BSIM4.6.2 Manual :

http ://www.device.eecs.berkeley.edu/bsim3/bsim4.html, 2009.

[Bur05] K. Burke, J. Werschnik et E.K.U. Gross, *Time-dependent density functional theory : Past, present, and future*, Journal of Chemical Physics, Vol. **123**, pp. 062206, 2005.

[Cal01] A. Callegari, E. Cartier, M. Gribelyuk, H.F. Okorn-Schmidt et T. Zabel, *Physical and electrical characterization of Hafnium oxide and Hafnium silicate sputtered films*, Journal of Applied Physics, Vol. **90**, pp. 6466–6475, 2001.

[Car66] M. Cardona et F.H. Pollak, *Energy-Band Structure of Germanium and silicon-K.P Method*, Physical Review, Vol. **142**, pp. 530, 1966.

[Cas10] M. Casse, K. Tachi, S. Thiele et T. Ernst, *Spectroscopic charge pumping in Si nanowire transistors with a high-kappa/metal gate*, Applied Physics Letters, Vol. **96**, pp. 123506, 2010.

[Cel03] G.K. Celler et S. Cristoloveanu, *Frontiers of silicon-on-insulator*, Journal of Applied Physics, Vol. **93**, pp. 4955–4978, 2003.

[Che08a] M.J. Chen et L.F. Lu, *A parabolic potential barrier-oriented compact model for the k BT layer's width in nano-MOSFETs*, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. **55**, pp. 1265–8, 2008.

[Che08b] M.J. Chen, L.F. Lu et C.Y. Hsu, *On the Mean Free Path for Backscattering in k(B)T Layer of Bulk Nano-MOSFETs*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **55**, pp. 3594–3598, 2008.

[Chi04] T.K. Chiang et M.L. Chen, *A compact, continuous analytic I-V model for surrounding-gate MOSFETs*, In 2004 : 7th International Conference on Solid-State and Integrated Circuits Technology, Vols 1- 3, Proceeding, pp. 1196–1199, 2004.

[Chu00] S.W. Chung, J.Y. Yu et J.R. Heath, *Silicon nanowire devices*, Applied Physics Letters, Vol. **76**, pp. 2068–2070, APR 10 2000.

[Cle06] R Clerc, P Palestri et L Selmi, *On the physical understanding of the kT-layer concept in quasi-ballistic regime of transport in nanoscale devices*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **53**, pp. 1634–1640, 2006.

[Coh95] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique, tome 1 & 2*, Dunod, 1995.

[Col07] J. P. Colinge, *Multi-gate SOI MOSFETs*, Microelectronic Engineering, Vol. **84**, pp. 2071–2076, 2007.

[Cui01] Y Cui et C.M. Lieber, *Functional nanoscale electronic devices assembled using silicon nanowire building blocks*, Science, Vol. **291**, pp. 851–853, 2001.

[Cui03] Y. Cui, Z.H. Zhong, D.L. Wang, W.U. Wang et C.M. Lieber, *High performance silicon nanowire field effect transistors*, Nano Letters, Vol. **3**, pp. 149–152, 2003.

[Dat02] S. Datta, *The non-equilibrium Green's function (NEGF) formalism : An elementary introduction*, In International Electron Devices 2002 Meeting, Technical Digest, pp. 703, 2002.

[Del04] C. Delerue et M. Lannoo, *Nanostrutures Theory and Modelling*, Springer, 2004.

[Den74] R.H. Dennard, F.H. Gaensslen, H.N. Yu et A.R. Leblanc, *Design of Ion Implanted MOSFET's with very small physical dimensions*, IEEE of Solid State Circuits, Vol. **9**, pp. 256, 1974.

[Dic04] K.A. Dick, K. Deppert, M.W. Larsson, T. Martensson, W. Seifert, L.R. Wallenberg et L. Samuelson, *Synthesis of branched 'nanotrees' by controlled seeding of multiple branching events*, Nature Materials, Vol. **3**, pp. 380–384, 2004.

[Dua02] X.F. Duan, Y. Huang et C.M. Lieber, *Nonvolatile memory and programmable logic from molecule-gated nanowires*, Nano Letters, Vol. **2**, pp. 487–490, 2002.

[Dup08] C. Dupre, A. Hubert, S. Becu, M. Jublot, V. Maffini-Alvaro, C. Vizioz, F. Aussenac, C. Arvet, S. Barnola, J.-M. Hartmann, G. Garnier, F. Allain, J.-P. Colonna, M. Rivoire, L. Baud, S. Pauliac, V. Loup, T. Chevolleau, P. Rivallin, B. Guillaumot, G. Ghibaudo, O. Faynot, T. Ernst et S. Deleonibus, *15 nm-diameter 3D stacked nanowires with independent gates operation : PhiFET*, In 2008. IEEE International Electron Devices Meeting Technical Digest, 2008.

[Eig90] D.M. Eigler et E.K. Schweizer, *Positioning single atoms with scanning tunneling microscope*, Nature, Vol. **344**, pp. 524–526, 1990.

[Enz06] C.C. Enz et E.A. Vittoz, *charge-based MOS transistor modeling : The EKV model for low-power and RF IC design*, Wiley, 2006.

[Ern08] T. Ernst, L. Duraffourg, C. Dupre, E. Bernard, P. Andreucci, S. Becu, E. Ollier, A. Hubert, C. Halte, J. Buckley, O. Thomas, G. Delapierre, S. Deleonibus, B. de Salvo, P. Robert et O. Faynot, *Novel Si-based nanowire devices : Will they serve ultimate MOSFETs scaling or ultimate hybrid integration ?*, In 2008. IEEE International Electron Devices Meeting Technical Digest, 2008.

[Ess03] D. Esseni et A. Abramo, *Modeling of electron mobility degradation by remote Coulomb scattering in ultrathin oxide MOSFETs*, IEEE Transaction on Electron Devices, Vol. **50**, pp. 1665–1674, 2003.

[Fay95] O. Faynot, *Caractérisation et modélisation du fonctionnement des transistors MOS ultra-subnicroniques fabriqués sur film SIMOX très minces*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1995.

[Fen04] C. Fenouillet-Beranger, T. Skotnicki, S. Monfray, N. Carriere et F. Boeuf, *Requirements for ultra-thin-film devices and new materials for the CMOS roadmap*, Solid-State Electronics, Vol. **48**, pp. 961–967, 2004.

[Fen09] C. Fenouillet-Beranger, P. Perreau, L. Pham-Nguyen, S. Denorme, F. Andrieu, L. Tosti, L. Brevard, O. Weber, S. Barnola, T. Salvetat, X. Garros, M. Casseacute, C. Leroux, J.P. Noel, O. Thomas, B. Le-Gratiet, F. Baron, M. Gatefait, Y. Campidelli, F. Abbate, C. Perrot, C. de Buttet, R. Beneyton, L. Pinzelli, F. Leverd, P. Gouraud, E. Josse, N. Planes, D. Delprat, F. Boedt, K. Bourdelle, B.Y. Nguyen, F. Boeuf, O. Faynot et T. Skotnicki, *Hybrid FDSOI/Bulk high-k/Metal gate platform for Low Power (LP) multimedia technology*, In 2009 IEEE International Electron Devices Meeting Technical Digest, 2009.

[Fer76] D.K. Ferry, *1st-order optical and intervalley scattering in semiconductors*, Physical Review B, Vol. **14**, pp. 1605–1609, 1976.

[Fis93] M.V Fischetti et S.E Laux, *Monte-Carlo study of electron transport in silicon inversion layers*, Physical Review B, Vol. **48**, pp. 2244–2274, 1993.

[Gil03] D. C. Gilmer, R. Hegde, R. Cotton, J. Smith, L. Dip, R. Garcia, V. Dhandapani, D. Triyoso, D. Roan, A. Franke, R. Rai, L. Prabhu, C. Hobbs, J. M. Grant, L. La, S. Samavedam, B. Taylor, H. Tseng et P. Tobin, *Compatibility of silicon gates with hafnium-based gate dielectrics*, Microelectronic Engineering, Vol. **69**, pp. 138–144, 2003.

[Gil04] G. Gildenblat, H.L. Wang, T.L. Chen, X. Gu et X.W. Cai, *SP : An advanced surface-potential-based compact MOSFET model*, IEEE Journal of Solid-State Circuits, Vol. **39**, pp. 1394–1406, 2004.

[Gil06] G. Gildenblat, X. Li, W. Wu, H. Wang, A. Jha, R. van Langevelde, G.D. Smit, A.J. Scholten et D.B. Klaassen, *PSP : An advanced surface-potential-based MOSFET model for circuit simulation*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **53**, pp. 1979–1993, 2006.

[Gol06] J. Goldberger, A.I. Hochbaum, R. Fan et P. Yang, *Silicon vertically integrated nanowire field effect transistors*, Nano Letters, Vol. **6**, pp. 973–977, 2006.

[Goo85] S.M Goodnick, D.K Ferry, C.W Wilmsen, Z Liliental, D Fathy et O.L Krivanek, *Surface-roughness at the Si(100)-SiO2 interface*, Physical Review B, Vol. **32**, pp. 8171–8186, 1985.

[Gre58] D.A. Greenwood, *The Boltzmann equation in the theory of electrical conduction in metals*, Proceedings of the Physical Society of London, Vol. **71**, pp. 585–596, 1958.

[Gri02] M. Gritsch, *Numerical modeling of silicon-on-insulator MOSFETs*, Thèse de doctorat, Technischen Universität Wien, 2002.

[Gud02] M.S. Gudiksen, L.J. Lauhon, J. Wang, D.C. Smith et C.M. Lieber, *Growth of nanowire superlattice structures for nanoscale photonics and electronics*, Nature, Vol. **415**, pp. 617–620, 2002.

[Gus03] E. P. Gusev, C. Cabral, M. Copel, C. D'Emic et M. Gribelyuk, *Ultrathin HfO2 films grown on silicon by atomic layer deposition for advanced gate dielectrics applications*, Microelectronic Engineering, Vol. **69**, pp. 145–151, 2003.

[Hah04] J. Hahm et C.M. Lieber, *Direct ultrasensitive electrical detection of DNA and DNA sequence variations using nanowire nanosensors*, Nano Letters, Vol. **4**, pp. 51–54, 2004.

[Ham07] A.E. Hamdy, *Compact Modeling of multiple gate MOS devices*, Thèse de doctorat, XX, 2007.

[Han89] W. Hansch, T. Vogelsang, R. Kircher et M. Orlowski, *Carrier-transport near the Si/SiO2 interface of a MOSFET*, Solid-State Electronics, Vol. **32**, pp. 839–849, 1989.

[Har28] P.R. Hartree, *The wave mechanics of an atom ith a non-coulomb central field : Theory and methods*, Cambridge Philosophical Society, Vol. **24**, pp. 89–110, 1928.

[Har05] S. Harrison, *Dispositifs GAA en technologie SON : conception, caractérisation et modélisation en vue de l'intégration dans les noeuds CMOS avancés*, Thèse de doctorat, Université de Provence, 2005.

[Hed65] L. Hedin, *New Method for Calculating 1-Particule Greens Functionwith A pplication to Electron-Gas Problem*, Physical Review, Vol. **139**, pp. A796+, 1965.

[Hu08] Y. Hu, J. Xiang, G. Liang, H. Yan et C.M. Lieber, *Sub-100 nanometer channel length Ge/Si nanowire transistors with potential for 2 THz switching speed*, Nano Letters, Vol. **8**, pp. 925–930, 2008.

[Hua01] Y. Huang, X.F. Duan, Y. Cui, L.J. Lauhon, K.H. Kim et C.M. Lieber, *Logic gates and computation from assembled nanowire building blocks*, Science, Vol. **294**, pp. 1313–1317, 2001.

[Hue08] K. Huet, *Modélisation du transport sous contraintes mécaniques dans les transistors sub-65nm pour la microélectronique CMOS*, Thèse de doctorat, Université Paris Sud, 2008.

[Hyb86] M.S. Hybertsen et S.G. Louie, *Electron Correlation in Semiconductors and Insulators - Band-Gaps and Quasi-particle energies*, Physical Review B, Vol.

34, pp. 5390–5413, 1986.

[Ini05] B. Iniguez, D. Jimenez, J. Roig, H.A. Hamid, L.F. Marsal et J. Pallares, *Explicit continuous model for long-channel undoped surrounding gate MOSFETs*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **52**, pp. 1868–1873, 2005.

[ITR05] ITRS :
2005 International Technology Roadmap for Semiconductors.
http://public.itrs.net, 2005.

[ITR11] ITRS :
2011 International Technology Roadmap for Semiconductors.
http://public.itrs.net, 2011.

[Jac83] C. Jacoboni et 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**, pp. 645–705, 1983.

[Jan98] J.M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram et F. Bassani, *Empirical spds* tight-binding calculation for cubic semiconductors : General method and material parameters*, Physical Review B, Vol. **57**, pp. 6493–6507, 1998.

[Jau06] M.A. Jaud, *Approche du potentiel effectif pour la silmulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs*, Thèse de doctorat, Institut national Polytechnique de Grenoble, 2006.

[Jim04] D. Jimenez, B. Iniguez, J. Sune, L.F. Marsal, J. Pallares, J. Roig et D. Flores, *Continuous analytic I-V model for surrounding-gate MOSFETs*, IEEE Electron Device Letters, Vol. **25**, pp. 571–573, 2004.

[Jin06] S Jin, YJ Park et HS Min, *A three-dimensional simulation of quantum transport in silicon nanowire transistor in the presence of electron-phonon interactions*, Journal of Applied Physics, Vol. **99**, pp. 123719, 2006.

[Jin07] S. Jin, M.V. Fischetti et T.W. Tang, *Modeling of electron mobility in gated silicon nanowires at room temperature : Surface roughness scattering, dielectric screening and band nonparabolicity*, Journal of Applied Physics, Vol. **102**, pp. 083715, 2007.

[Kem08] T.J. Kempa, B. Tian, D.R. Kim, J. Hu, X. Zheng et C.M. Lieber, *Single and tandem axial p-i-n nanowire photovoltaic devices*, Nano Letters, Vol. **8**, pp. 3456–3460, 2008.

[Kot04] R. Kotlyar, B. Obradovic, P. Matagne, M. Stettler et M.D. Giles, *Assessment of room-temperature phonon-limited mobility in gated silicon nanowires*, Applied Physics Letters, Vol. **84**, pp. 5270–5272, 2004.

[Kub57] R. Kubo, *Statistical-mechanical theory of irreversible processes.1.General theory and simple applications to magnetic and conduction problems*, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **12**, pp. 570–586, 1957.

[Lan57] R. Landauer, *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction*, IBM Journal of Research and Development, Vol. **1**, pp. 223–231, 1957.

[Lee04] S. Lee, F. Oyafuso, P. von Allmen et G. Klimeck, *Boundary conditions for the electronic structure of finite-extent embedded semiconductor nanostructures*, Physical Review B, Vol. **69**, pp. 045316, 2004.

[Lie07] C.M. Lieber et Z.L. Wang, *Functional nanowires*, MRS Bulletin, Vol. **32**, pp. 99–108, 2007.

[Liu90] W. Liu, *Semiconductor device simulation using quantum transport theory*, Thèse de doctorat, Cornell University, 1990.

[Liu09] F. Liu, J. Zhang, F. He, F. Liu, L. Zhang et M. Chan, *A charge-based compact model for predicting the current-voltage and capacitance-voltage characteristics of heavily doped cylindrical surrounding-gate MOSFETs*, Solid-State Electronics, Vol. **53**, pp. 49–53, 2009.

[Lui11] M. Luisier, *Phonon-limited and effective low-field mobility in n- and p-type [100]-, [110]-, and [111]-oriented Si nanowire transistors*, Applied Physics letters, Vol. **98**, pp. 32111, 2011.

[Lun00] M. Lundstrom, *Fundamentals of carrier transport*, Cambridge University Press, 2000.

[Mar09] S. Martinie, *Modélisation du transport quasi-balistique pour la simulation de circuits à base de nano-transistors multigrilles*, Thèse de doctorat, Université de Provence, 2009.

[Mat04] H. Mathieu, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, **5° édition DUNOD**, 2004.

[McK61] JP McKelvey, TP Brody et RL Longini, *Alternative approach to solution of added carrier transport problems in semiconductors*, Physical Review, Vol. **123**, pp. 51, 1961.

[Mun03] D. Munteanu et J.L. Autran, *Two-dimensional modeling of quantum ballistic transport in ultimate double-gate SOI devices*, Solid-State Electronics, Vol. **47**, pp. 1219–1225, 2003.

[Mun05] D. Munteanu, J.L. Autran, S. Harrison, K. Nehari, O. Tintori et T. Skotnicki, *Compact model of the quantum short-channel threshold voltage in symmetric Double-Gate MOSFET*, Molecular Simulation, Vol. **31**, pp. 831–837, 2005.

[Mun08] D. Munteanu, *Modélisation et simulation numérique des dispositifs Multi-grilles*, Thèse de doctorat, Rapport HDR, Université Aix-Marseille, 2008.

[Nat94] K. Natori, *Ballistic metal-oxide semiconductor field-effect transistor*, Journal of Applied Physics, Vol. **76**, pp. 4879–4890, 1994.

[Neh06] K. Nehari, N. Cavassilas, J.L. Autran, M. Bescond, D. Munteanu et M. Lannoo, *Influence of band structure on electron ballistic transport in silicon nanowire MOSFET's : An atomistic study*, Solid-State Electronics, Vol. **50**, pp. 716–721, 2006.

[Neo08] N. Neophytou, A. Paul, M. S. Lundstrom et G. Klimeck, *Bandstructure effects in silicon nanowire electron transport*, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. **55**, pp. 1286–1297, 2008.

[Niq00] Y.M. Niquet, C. Delerue, G. Allan et M. Lannoo, *Method for tight-binding parametrization : Application to silicon nanostructures*, Physical Review B, Vol. **62**, pp. 5109–5116, 2000.

[Niq06] Y.M. Niquet, A. Lherbier, N.H. Quang, M.V. Fernandez-Serra, X. Blase et C. Delerue, *Electronic structure of semiconductor nanowires*, Physical Review B, Vol. **73**, pp. 165319, 2006.

[Pal09] M.G. Pala, C. Buran, S. Poli et M. Mouis, *Full quantum treatment of surface roughness effects in Silicon nanowire and double gate FETs*, Journal of Computational Electronics, Vol. **8**, pp. 374–381, 2009.

[Par02] J.T. Park et J.P. Colinge, *Multi-Gate SOI MOSFETs : Device designGuidelines*, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. **49**, pp. 2222–2229, 2002.

[Pau06] P.J. Pauzauskie et P. Yang, *Nanowire photonics*, Materials Today, Vol. **9**, pp. 36–45, 2006.

[Per08] M.P. Persson, A. Lherbier, Y.M. Niquet, F. Triozon et S. Roche, *Orientational Dependence of Charge Transport in Disordered Silicon Nanowires*, Nano Letter, Vol. **8**, pp. 4146–4150, 2008.

[Pol08] S. Poli, M.G. Pala, T. Poiroux, S. Deleonibus et G. Baccarani, *Size Dependence of Surface-Roughness-Limited Mobility in Silicon-Nanowire FETs*, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. **55**, pp. 2968–2976, 2008.

[Que06] D. Querlioz, J. Saint-Martin, V.N. Do, A. Bournel et 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.

[Rah02] A. Rahman et M.S. Lundstrom, *A compact scattering model for the nanoscale double-gate MOSFET*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **49**, pp.

481–489, 2002.

[Ram07] E. B. Ramayya, D. Vasileska, S. M. Goodnick et I. Knezevic, *Electron mobility in silicon nanowires*, IEEE Transactions on Nanotechnology, Vol. **6**, pp. 113–117, 2007.

[Ran96] F. Rana, S. Tiwari et D.A. Buchanan, *Self-consistent modeling of accumulation layers and tunneling currents through very thin oxides*, Applied Physics letters, Vol. **69**, pp. 1104–1106, 1996.

[Rog09] K. Rogdakis, S. Poli, E. Bano, K. Zekentes et M. G. Pala, *Phonon- and surface-roughness-limited mobility of gate-all-around 3C-SiC and Si nanowire FETs*, Nanotechnology, Vol. **20**, pp. 295202, 2009.

[Rur10] R. Rurali, *Colloquium : Structural, electronic, and transport properties of silicon nanowires*, Reviews of Modern Physics, Vol. **82**, pp. 427–449, 2010.

[Ryn08] D. Ryndyk, *Green function techniques in the treatment of quantum transport at the molecular scale*, Springer, 2008.

[Sai06] J. Saint-Martin, A. Bournel, F. Monsef, C. Chassat et P. Dollfus, *Multi sub-band Monte Carlo simulation of an ultra-thin double gate MOSFET with 2D electron gas*, Semiconductor Science and Technology, Vol. **21**, pp. L29–L31, 2006.

[Sar08] E. Sarrazin, S. Barraud, F. Triozon et A. Bournel, *A self-consistent calculation of band structure in silicon nanowires using a Tight-Binding model*, In SISPAD 2008 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and devices, pp. 349–352, 2008.

[Sar09] E. Sarrazin, *Etude du transport électronique dans un nanofil de silicium*, Thèse de doctorat, Université Paris-Sud 11, 2009.

[Sca07] S. Scaldaferri, G. Curatola et G. Iannaccone, *Direct solution of the boltzmann transport equation and poisson-schrodinger equation for nanoscale MOSFETs*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **54**, pp. 2901–2909, 2007.

[Sel84] S. Selberherr, *Analysis and simulation of semiconductor devices*, Springer-Verlag Wien New-York, 1984.

[SIL] SILVACO :
Atlas users manual.
http ://www.silvaco.com.

[Sla54] J.C. Slater et G.F. Koster, *Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem*, Physical Review, Vol. **94**, pp. 1498–1524, 1954.

[Ste74] F. Stern, *Quantum properties of surface space-charge layers*, Critical Reviews in Solid State Sciences, Vol. **4**, pp. 499–514, 1974.

[Suk07] S.D. Suk, M. Li, Y.Y. Yeoh, K.H. Yeo, K.H. Cho, I.K. Ku, H.C., W.J. Jang, D.W. Kim, D. Park et W.S. Lee, *Investigation of nanowire size dependency on TSNWFET*, In 2007 IEEE International Electron Devices Meeting - IEDM, pp. 891–4, 2007.

[Suz96] K. Suzuki, Y. Tosaka et T. Sugii, *Analytical threshold voltage model for short channel n(+)-p(+) double-gate SOI MOSFET's*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **43**, pp. 732–738, 1996.

[Tac09] K. Tachi, M. Casse, D. Jang, C. Dupre, A. Hubert, N. Vulliet, V. Maffini-Alvaro, C. Vizioz, C. Carabasse, V. Delaye, J. M. Hartmann, G. Ghibaudo, H. Iwai, S. Cristoloveanu, O. Faynot et T. Ernst, *Relationship between mobility and high-k interface properties in advanced Si and SiGe nanowires*, In 2009 IEEE International Electron Devices Meeting, pp. 288–291, 2009.

[Tac11] K. Tachi, *A Study on Carrier Transport Properties of Vertically-Stacked Nanowire Transistors*, Thèse de doctorat, Science and engineering Tokyo institute of technology, 2011.

[Tan90] I.H. Tan, G.L. Snider, L.D. Chang et E.L. Hu, *A Self-consistent solution of Schrödinger-Poisson equations using a nonuniform mesh*, Journal of Applied Physics, Vol. **68**, pp. 4071–4076, 1990.

[The03] C. Thelander, T. Martensson, M.T. Bjork, B.J. Ohlsson, M.W. Larsson, L.R. Wallenberg et L. Samuelson, *Single-electron transistors in heterostructure nanowires*, Applied Physics Letters, Vol. **83**, pp. 2052–2054, 2003.

[Tia07] B. Tian, X. Zheng, T.J. Kempa, Y. Fang, N. Yu, G. Yu, J. Huang et C.M. Lieber, *Coaxial silicon nanowires as solar cells and nanoelectronic power sources*, Nature, Vol. **449**, pp. 885–U8, 2007.

[Tri05] V.P. Trivedi et J.G. Fossum, *Quantum-mechanical effects on the threshold voltage of undoped double-gate MOSFETs*, IEEE Electron Device Letters, Vol. **26**, pp. 579–582, 2005.

[Tse93] C. Tserbak, H.M. Polatoglou et G. Theodorou, *Unified approach to the electronic-structure of strained Si/Ge superlattices*, Physical Review B, Vol. **47**, pp. 7104–7124, 1993.

[Van94] M.J. Van Dort, P.H. Woerlee et A.J. Walker, *A simple-model for quantization effects in heavily-doped silicon MOSFETs at inversion conditions*, Solid-State Electronics, Vol. **37**, pp. 411–414, 1994.

[Ven02] R. Venugopal, Z. Ren, S. Datta, M.S. Lundstrom et D. Jovanovic, *Simulating quantum transport in nanoscale transistors : Real versus mode-space approaches*, Journal of Applied Physics, Vol. **92**, pp. 3730–3739, 2002.

[Vin09] M. Vinet, T. Poiroux, C. Licitra, J. Widiez, J. Bhandari, B. Previtali, C. Vizioz, D. Lafond, C. Arvet, P. Besson, L. Baud, Y. Morand, M. Rivoire, F. Nemouchi, V. Carron et S. Deleonibus, *Self-Aligned Planar Double-Gate MOSFETs by Bonding for 22-nm Node, With Metal Gates, High-kappa Dielectrics, and Metallic Source/Drain*, IEEE Electron Device Letters, Vol. **30**, pp. 748–750, 2009.

[Vog83] P. Vogl, H.P. Hjalmarson et J.D. Dow, *A Semi-empirical Tight-Binding theory of the electronic structure of semiconductors*, Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol. **44**, pp. 365–378, 1983.

[Wag64] R.S. Wagner et W.C. Ellis, *Vapor-Liquid-Solid mechanism of single crystal growth*, Applied Physics Letters, Vol. **4**, pp. 89–90, 1964.

[Wan05] J Wang, E Polizzi, A Ghosh, S Datta et M Lundstrom, *Theoretical investigation of surface roughness scattering in silicon nanowire transistors*, Applied Physics letter, Vol. **87**, pp. 43101, 2005.

[Wan06] Y. Wang, V. Schmidt, S. Senz et U. Goesele, *Epitaxial growth of silicon nanowires using an aluminium catalyst*, Nature Nanotechnology, Vol. **1**, pp. 186–189, 2006.

[Web08] O. Weber, O. Faynot, F. Andrieu, C. Buj-Dufournet, F. Allain, P. Scheiblin, J. Foucher, N. Daval, D. Lafond, L. Tosti, L. Brevard, O. Rozeau, C. Fenouillet-Beranger, M. Marin, F. Boeuf, D. Delprat, K. Bourdelle, B. Y. Nguyen et S. Deleonibus, *High Immunity to Threshold Voltage Variability in Undoped Ultra-Thin FDSOI MOSFETs and its Physical Understanding*, In IEEE 2008 International Electron Devivces Meeting Technical Digest, pp. 245–248, 2008.

[Wet01] A. Wettstein, A. Schenk et W. Fichtner, *Quantum device-simulation with the density-gradient model on unstructured grids*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **48**, pp. 279–284, 2001.

[Wil00] G.D. Wilk, R.M. Wallace et J.MM Anthony, *Hafnium and zirconium silicates for advanced gate dielectrics*, Journal of Applied Physics, Vol. **87**, pp. 484–492, 2000.

[Yok86] K Yokoyama et K Hess, *Monte-Carlo study of electronic transport in Al1-XGaXAs/GsAs single well heterostructures*, Physical Review B, Vol. **33**, pp. 5595–5606, 1986.

[Yu07a] B. Yu, H. Lu, M. Liu et Y. Taur, *Explicit continuous models for double-gate and surrounding-gate MOSFETs*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **54**, pp. 2715–2722, 2007.

[Yu07b] B. Yu, W. Lu, H. Lu et Y. Taur, *Analytic charge model for surrounding-gate MOSFETs*, IEEE Transactions on Electon Devices, Vol. **54**, pp. 492–496, 2007.

[Zer04] M Zervos et LF Feiner, *Electronic structure of piezoelectric double-barrier InAs/InP/InAs/InP/InAs(111) nanowires*, Journal of Applied Physics, Vol. **95**, pp. 281–291, 2004.

[Zha10] W. Zhang, C. Delerue, Y.M. Niquet, G. Allan et E. Wang, *Atomistic modeling of electron-phonon coupling and transport properties in n-type [110] silicon nanowires*, Physical Review B, Vol. **82**, pp. 115319, 2010.

[Zhe04] G.F. Zheng, W. Lu, S. Jin et C.M. Lieber, *Synthesis and fabrication of high-performance n-type silicon nanowire transistors*, Advanced Materials, Vol. **16**, pp. 1890+, 2004.

[Zho03] Z.H. Zhong, D.L. Wang, Y. Cui, M.W. Bockrath et C.M. Lieber, *Nanowire crossbar arrays as address decoders for integrated nanosystems*, Science, Vol. **302**, pp. 1377–1379, 2003.

Liste de publications de l'auteur

Chapitre de livre

J. Dura, S. Martinie, D. Munteanu, F. Triozon, S. Barraud, Y. M. Niquet et J. L. Autran, *Nanowires : promising candidates for electrostatic control in future nanoelectronic devices*, Intech book, ISBN : 978-953-51-0239-7, 2012.

Publications revues à comité de lecture

J. Dura, F. Triozon, S. Barraud, D. Munteanu, S. Martinie et J.L. Autran. *Kubo-Greenwood approach to analytical model for the calculation of mobility in GAA nanowire MOSFET including screened remote Coulomb scattering - Comparison with experimental data*, Journal of Applied Physics, vol. **111**, 103710, 2012.

S. Martinie, D. Munteanu, G. Le Carval, J. Dura, M.A. Jaud, S. Barraud et J.L. Autran. *Impact of (Quasi-)Ballistic Transport on Operation of Complementary Metal-Oxide-Semiconductor Inverters Based on Fully-Depleted Silicon-on-Insulator and Nanowire Devices*, Japanese Journal of Applied Physics, 2011

Conférences internationales

J. Dura, S. Martinie, D. Munteanu, M.A. Jaud, S. Barraud et J.L. Autran. *Analytical model of quantum threshold voltage in short-channel nanowire MOSFET including band structure effects*, Proceedings of NSTI-Nanotech WCM, Vol. **2**, pp.801-804, ISBN 978-1-4398-3402-2, Anaheim, California, USA, June 21-24, 2010.

J. Dura, S. Martinie, D. Munteanu, F. Triozon, S. Barraud, Y.M. Niquet, J.C. Barbé et J.L. Autran. *Analytical model of ballistic current for GAA nanowire MOSFET including band structure effects : Application to ring oscillator*, Proceedings of 2011 Ultimate Integration of Silicon, ISBN 978-1-4577-0089-7, Cork, Ireland, March 14-16, 2011.

J. Dura, S. Martinie, D. Munteanu, F. Triozon, S. Barraud, Y.M. Niquet et J.L. Autran.

Analytical model of drain current in nanowire MOSFETs including quantum confinement, band structure effects and quasi-ballistic transport : device to circuit performances analysis, Proceedings of 2011 Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), Osaka, Japan, Sept 08-10, 2011.

J. Dura, F. Triozon, D. Munteanu, S. Barraud et J.L. Autran. *Electronic transport in GAA silicon nanowire MOSFETs : from Kubo-Greenwood mobility including screening remote coulomb scattering to analytical backscattering coefficient*, Proceedings of 2012 International Workshop on Computational Electronics (IWCE), accepted (2012).

J. Dura, F. Triozon, D. Munteanu, S. Barraud et J.L. Autran. *Numerical study of variability of technological parameters on remote coulomb scattering in nanowire MOSFETs*, Proceedings of 2012 Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), Denver, USA, Sept 05-07, 2012.

O. Thomas, J.P. Noel, C. Fenouillet-Beranger, M.A. Jaud, J. Dura, P. Perreau, F. Boeuf, F. Andrieu, D. Delprat, F. Boedt, K. Bourdelle, B.Y. Nguyen, A. Vladimirescu et A. Amara. *32nm and beyond Multi-V(T) Ultra-Thin Body and BOX FDSOI : From Device to Circuit*, Proceedings of 2010 IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS), ISBN : 978-1-4244-5309-2, 2010.

M.A. Jaud, P. Scheiblin, S. Martinie, M. Casse, O. Rozeau, J. Dura, J. Mazurier, A. Toffoli, O. Thomas, F. Andrieu et O. Weber. *TCAD simulation vs. experimental results in FDSOI technology : From advanced mobility modeling to 6T-SRAM cell characteristics prediction*, Proceedings of 2010 Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), Bologna, Italy, Sept 06-08, 2011.